

Agradecimentos

*Ao Prof. Alexandre e ao Prof. Aristeu,
pela excelente orientação, paciência e persistência;*

*ao Rudi, ao João Marcelo, à Olga,
pela amizade e cooperação explícita neste trabalho;*

*à minha família,
por serem exemplos de amor e pelo incentivo;*

*à Alessandra, à Danuza, à Ana Sofia, à Ana Marta, ao Temico, ao Marcelo, ao
Alexandre ...*

pela amizade incondicional;

*aos colegas do LTCM e amigos
pelo apoio e cooperação neste trabalho;*

*à Universidade Federal de Uberlândia e à Faculdade de Engenharia Mecânica
pela oportunidade de realizar este Curso;*

*ao IME/USP-SP,
pela cooperação e oportunidade de crescimento;*

*ao CNPq,
pelo financiamento deste trabalho;*

*à FAPESP #04/13781 – 1,
pelo suporte computacional.*

VILLAR, M. M., 2007, “Análise Numérica Detalhada de Escoamentos Multifásicos Bidimensionais”. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil.

Resumo

A modelagem matemática de escoamentos multifásicos envolve a interação de geometrias móveis e deformáveis com o meio fluido que as envolve. Este tipo de interação faz parte de uma extensa lista de aplicações. Uma linha proposta para o tratamento numérico deste tipo de problema são os métodos híbridos *Front-Tracking/Front-Capturing*. Esta abordagem leva à separação do problema em dois domínios distintos (líquido/gás e líquido/líquido), um domínio fixo, euleriano, utilizado para discretizar as equações de ambas as fases, e outro móvel, lagrangiano, usado para as interfaces. Para o presente trabalho, na metologia utilizada, ambos os domínios são geometricamente independentes e não apresentam restrição quanto ao movimento e à deformação da fase dispersa.

Seguindo esta linha, no presente trabalho propõe-se capturar detalhes deste tipo escoamento, resolvendo adequadamente as escalas físicas do tempo e do espaço, utilizando malhas bloco estruturada refinadas localmente, as quais se adaptam dinamicamente para recobrir as regiões de interesse do escoamento (como, por exemplo, ao redor da interface fluido-fluido). Para se obter a resolução necessária no tempo, é usada uma discretização semi-implícita de segunda ordem para solucionar as equações de Navier-Stokes. A modelagem da turbulência é introduzida no presente trabalho via Simulação de Grandes Escalas.

A eficiência e a robustez da metodologia implementada são verificadas via análise de convergência do método, bem como a simulação de escoamentos monofásicos e bifásicos para diferentes números Reynolds. São também apresentados resultados para escoamentos bifásicos com uma só bolha assim como para múltiplas bolhas. Os resultados de escoamentos mono-bolhas são comparados com o diagrama de forma de Clift *et al.* (1978).

Palavras-chave: Refinamento Local Adaptativo, Escoamentos Multifásicos, Turbulência, Multigrid-Multinível.

x

VILLAR, M. M., 2007, "Detailed Two-Dimensional Numerical Analysis of Multiphase Flows". Doctor Thesis, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brazil.

Abstract

The mathematical modeling of multiphase flows involves the interaction between deformable and moving geometries with the fluid in which they are dispersed (immersed). This kind of interaction is present in many practical applications. A common approach to handle these problems is the so called Front-Tracking/Front-Capturing Hybrid Methods. This methodology consists in separating the problem into two domains: an eulerian domain, which is kept fixed and is used to discretize the fluid equations of both phases, and a lagrangian domain, which is used to solve the equations of motion of the interface. Since there is no geometric dependence between these two domains, the method can easily handle moving and deformable interfaces that are dispersed in the flow.

Following this line of research, the present work aims to capture accurately details of such flows by resolving adequately the relevant physical scales in time and in space. This can be achieved by applying locally refined meshes which adapt dynamically to cover special flow regions, e.g. the vicinity of the fluid-fluid interfaces. To obtain the required resolution in time, a semi-implicit second order discretization to solve the Navier-Stokes equations is used. The turbulence modeling is introduced in the present work through Large Eddy Simulation.

The efficiency and robustness of the methodology applied are verified via convergence analysis, as well as with simulations of one-phase and two-phase flows for several Reynolds numbers. The results of two-phase flows, with one bubble and with multiple bubbles, are presented. The results obtained for a single bubble case are compared with Clift's shape diagram (Clift *et al.*, 1978)).

Key Words: Adaptive Mesh Refinement, Mutltiphas Flows, Turbulence, Multigrid-Multilevel.

Listas de Símbolos

Letras Latinas

A_b	área da bolha
C	coeficiente de segurança
C_s	constante de Smagorinsky
d_d	diâmetro da interfase
D_{ij}	função distribuição
Eo	número de Eötvös
\mathbf{f}	vetor força euleriano
\mathbf{F}	vetor força interfacial lagrangiano
G	função filtro
\mathbf{g}	vetor aceleração gravitacional
l	nível de refinamento
M	número de Morton
\mathbf{n}	vetor normal unitário
\mathbf{t}	vetor tangente unitário
p	pressão
q	correção de pressão
r	raio de influência da função distribuição
R	resíduo
Re	número de Reynolds
S_{ij}	taxa de deformação

T	tensor de tensão interfacial
t	tempo
\mathbf{u}	vetor velocidade
u_a	velocidade tangencial
\mathbf{u}	vetor velocidade euleriano
\mathbf{v}_b	vetor velocidade do centróide
\mathbf{u}_{ib}	vetor velocidade lagrangiano
\mathbf{x}	vetor posição euleriano
\mathbf{X}	vetor posição lagrangiano

Letras Gregas

α	razão volumétrica
α_i	cosntantes do método Gear
β_i	cosntantes do método Gear
ρ	massa específica
μ	viscosidade
δ	delta de kronecher
Δx	espaçamento da malha computacional nas direção x
Δy	espaçamento da malha computacional nas direção y
Δt	passo no tempo
Γ	domínio lagrangiano
Ω	domínio euleriano
λ	razão entre as massas específicas das diferentes fases
γ	razão entre as viscosidades das diferentes fases
κ	curvatura da interface
ψ	função indicadora
ϕ	variável genérica
τ_{ij}	tensor sub-malha de Reynolds

Índices

<i>base</i>	nível base
<i>c</i>	fase contínua
<i>d</i>	fase dispersa
<i>ef</i>	efetiva
<i>k</i>	ponto lagrangiano
<i>i, j</i>	pontos eulerianos
max	máximo
min	mínimo
<i>n</i>	norte
<i>s</i>	sul
<i>l</i>	leste
<i>o</i>	oeste
<i>top</i>	nível máximo de refinamento

Superíndices

*	grandeza adimensional
<i>n</i>	iteração
'	variável aproximada

Operadores Matemáticos

\mathcal{R}	operador de restrição
\mathcal{P}	operador de prolongamento
∇^2	laplaciano
∂	derivada parcial

∇	gradiente
\int	integral
\sum	somatório
\prod	produtório

Sumário

Lista de Figuras	xix
Lista de Tabelas	xix
Lista de Algoritmos	xxii
1 Introdução	1
1.1 Organização do Trabalho	6
2 Revisão Bibliográfica	7
2.1 Escoamentos Multifásicos	7
2.2 Refinamento Adaptativo	12
2.3 Turbulência e Restrição Temporal	14
3 Modelo Matemático	17
3.1 Formulação Euleriana	18
3.2 Formulação Lagrangiana	23
3.2.1 Escoamentos Bifásicos	23
3.2.2 Regularização da Distribuição de Pontos Lagrangianos	25
3.3 Acoplamento Euleriano-Lagrangiano	27
3.4 Turbulência	27
3.4.1 Equações Filtradas de Navier-Stokes	28
3.4.2 Modelo Sub-Malha de Smagorinsky	30
3.5 Adimensionalização das Equações	32

4 Metodologia Numérica	37
4.1 Discretização Temporal	38
4.2 Acoplamento Pressão - Velocidade	41
4.3 Discretização do Domínio Espacial	45
4.3.1 Refinamento Local Adaptativo	47
4.3.2 Geração de Malhas	48
4.3.2.1 Seleção de pontos	51
4.3.2.2 Agrupamento de Pontos	53
4.3.3 Adaptatividade	56
4.4 Células Fantasmas	57
4.4.1 Células Fantasmas para Variáveis Centradas	58
4.4.2 Células Fantasmas para Variáveis Deslocadas	58
4.5 Discretização Espacial das Equações de Navier - Stokes	59
4.5.1 Discretização das Equações para o Cálculo das Estimativas das Velocidades	62
4.5.2 Discretização da Equação para a Correção de Pressão	63
4.5.3 Discretização das Equações para as Velocidades Corrigidas	64
4.5.4 Discretização do Modelo Sub-Malha de Smagorinsky	65
4.6 Discretização Espacial para o Acoplamento Lagrangiano - Euleriano	65
4.6.1 Função Distribuição	66
4.6.2 Função Indicadora	68
4.7 Discretização do Domínio Lagrangiano	69
4.7.1 Discretização Espacial da Força Lagrangiana	71
4.7.2 Discretização Espacial da Equação do Movimento da Interface	74
4.8 Estabilidade	76
5 Método Multigrid-Multinível	81
5.1 Método Multigrid na Malha Uniforme	84
5.1.1 Processo Iterativo	85
5.1.2 Operador de Transferência entre as Malhas	86
5.1.2.1 Operador para o Processo de Restrição	86
5.1.2.2 Operador para o Processo de Prolongamento	87

5.1.3	Estratégias de Mudança de Nível de Malha	89
5.2	Método Muligrid na Malha Composta	90
5.2.1	Equação Elíptica na Malha Composta	91
5.2.2	Processo Iterativo no Método Multigrid-Multinível	95
6	Resultados e Discussão	99
6.1	Normas e Estudo de Convergência	100
6.1.1	Validação da Metodologia por Ordem de Convergência	101
6.1.1.1	Equação Elíptica para Correção de Pressão	103
6.1.1.2	Equações de Navier-Stokes	106
6.2	Simulações de Escoamentos em uma Cavidade	115
6.2.1	Topologia dos Escoamentos	116
6.3	Resultados para Testes de Regularização da Malha Lagrangiana	123
6.4	Simulações Numéricas de Escoamentos Bifásicos	127
6.4.1	Ascensão da Bolha Isolada a Baixos Números de Reynolds	129
6.4.1.1	Regime Esférico	129
6.4.2	Ascensão da Bolha Isolada a Moderados Números de Reynolds	139
6.4.2.1	Regime Elipsoidal	142
6.4.2.2	Regime Calota-Elipsoidal	146
6.4.2.3	Regime Calota-Esférica	152
6.4.3	Ascensão da Bolha Isolada a Altos Números de Reynolds	159
6.4.4	Ascensão de Múltiplas Bolhas	175
7	Conclusão e Perspectivas Futuras	185
8	Bibliografia	189
A	Mapas Lagrangiano e Euleriano	203
B	Estrutura de Dados	207

List of Tables

6.1	Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno de Neumann e massa específica constante.	105
6.2	Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno periódicas e massa específica constante.	105
6.3	Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno de Dirichlet em todas as direções e massa específica constante.	105
6.4	Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno periódicas e massa específica variável.	106
6.5	Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas constantes.	111
6.6	Teste de convergência na malha composta para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas constantes.	112
6.7	Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas variáveis.	112
6.8	Teste de convergência na malha composta para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas variáveis.	112

6.9	Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno Periódica na direção x e Dirichlet em y , com propriedades físicas constantes.	113
6.10	Teste de convergência na malha composta para condições de contorno Periódica na direção x e Dirichlet em y , com propriedades físicas constantes.	113
6.11	Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas constantes.	113
6.12	Teste de convergência na malha composta para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas constantes.	114
6.13	Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas variáveis.	114
6.14	Teste de convergência na malha composta para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas variáveis.	114

Listas de Algoritmos

5.1	Ciclo V para a malha uniforme	90
5.2	Multigrid-Multinível para o Ciclo- V	97
A.1	Mapa euleriano - algoritmo para a montagem da <i>região proibida</i>	205
A.2	Mapa lagrangiano	205
B.1	Leitura de dados utilizando lista ligada	209

Capítulo 1

Introdução

Escoamentos multifásicos transicionais e turbulentos são freqüentes em atividades de engenharia que envolvam a dinâmica dos fluidos. O termo escoamento multifásico é utilizado para qualquer escoamento que apresente mais de uma fase ou componente escorando simultaneamente. Esses escoamentos são observados tanto em processos industriais quanto na natureza. São citados como exemplos a cavitação de turbinas e bombas hidráulicas, processos de fabricação de papel e plásticos, extração de petróleo, aspersão de líquidos no ar como venenos e aerosóis, fluxo de sangue e dispersão de poluentes na atmosfera.

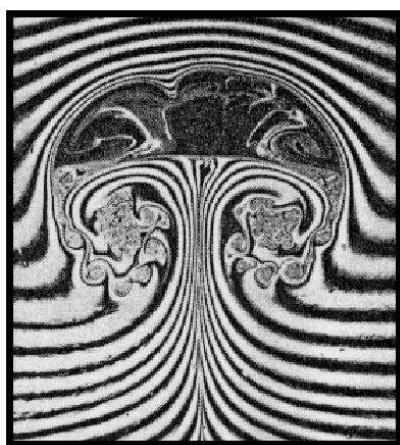


Figura 1.1: Escoamento em transição ao redor e no interior de uma bolha (Couder *et al.* 1989).

São poucos os escoamentos industriais que se desenvolvem em regime laminar, sendo

estes, mais interessantes para fins acadêmicos, ocorrendo sob condições controladas ou em escoamentos altamente viscosos. Para ilustrar esta afirmação, mostra-se na Fig. 1.1 o escoamento em transição à jusante e no interior de uma bolha que sobe em um meio fluido. Nesta figura, observa-se a formação de duas recirculações simétricas de tamanhos característicos da ordem do tamanho da bolha. Estas recirculações são nitidamente compostas de instabilidades de Kelvin-Helmholtz. Se a fotografia apresentasse maior nível de detalhes poder-se-ia detectar instabilidades menores, as quais apresentariam sinais de novas instabilidades sobre si mesmas, mostrando o processo de multiplicidade de escalas e caracterizando assim um escoamento em transição à turbulência.

A turbulência em escoamentos multifásicos chama a atenção não somente pelo fenômeno de formação de esteiras turbinholares, mas também pelo fato de que a turbulência na fase contínua afeta a dinâmica de um conjunto de bolhas/gotas. A turbulência também pode levar à deformação por cisalhamento, fragmentando assim uma bolha/gota e criando várias outras bolhas/gotas satélites (ver Fig. 1.2). Outro fator observado é que a turbulência altera a rotação e a aceleração de uma bolha/gota, as quais podem se aproximar uma das outras e gerar a coalescência (ver Fig. 1.3).

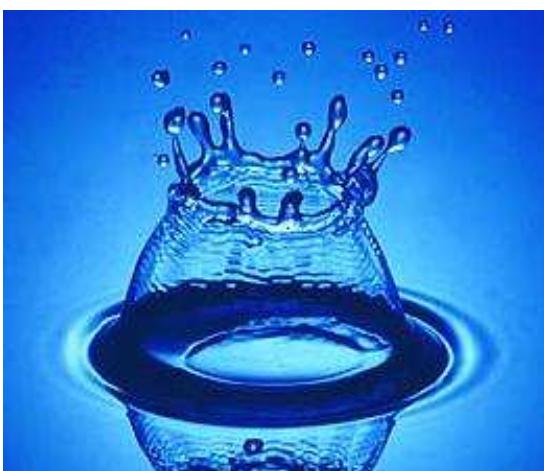


Figura 1.2: Fragmentação de gotas em uma superfície livre (www.rit.edu/andpph).



Figura 1.3: Colisão entre duas gotas (www.rit.edu/andpph).

Esta interação entre as diferentes fases chama também a atenção na previsão dos escoamentos multifásicos em tubulações diversas e notavelmente em tubulações de petróleo. A produção de óleo e gás natural envolvem o transporte de fluidos provenientes do reservatório, nas fases líquida (óleo e água) e gasosa (gás natural) - eventualmente com grãos de

areia dispersos - até a unidade de processamento onde será realizada a separação de fases. Nos últimos anos, as operações de produção *offshore* tem se tornado cada vez maiores, levando os custos associados a serem ainda mais altos e fazendo com que sejam imprescindíveis os estudos detalhados de viabilização, visando a otimização dos equipamentos e processos relacionados. Convém ressaltar que, no Brasil, cerca de 85% da produção de óleo bruto advém de campos de petróleo *offshore*.

Buscando compreender os mecanismos governantes, muitas vezes é suficiente considerar apenas duas fases escoando (e.g., líquido e gás). As fases podem se arranjar em diversas configurações na tubulação, as quais influenciarão diretamente as características do escoamento associado. Inúmeros estudos têm sido realizados ao longo dos anos para mapear os possíveis regimes de acordo com as propriedades dos fluidos, geometria do escoamento e condições de operação. No caso de escoamento horizontal, os padrões comumente encontrados são bolhas de gás dispersas no líquido, bolhas alongadas, escoamento estratificado, escoamento estratificado ondulado, golfadas e anular. Para os escoamentos verticais, há ainda o padrão caótico. Na configuração de bolhas dispersas a fase gasosa se encontra distribuída em bolhas discretas ao longo da fase contínua líquida, podendo ser estas bolhas desde pequeno diâmetros com forma esférica até diâmetros maiores apresentando formas mais alongadas.

Quando as bolhas atingem o diâmetro da tubulação o regime é caracterizado como golfadas ou *sulg flow*. Neste, a parte superior da bolha possui forma esférica e o gás é separado da parede do fluido da tubulação por um fino filme de líquido. Duas bolhas sucessivas são separadas por partes líquidas que podem conter bolhas de menor diâmetro em forma dispersa. O padrão caótico é observado quando o regime de golfadas se instabiliza e as grandes bolhas se quebram dando lugar a um escoamento caótico no centro da tubulação, deslocando o líquido contra as paredes. Se o líquido se concentra em uma camada relativamente grossa sobre as paredes com um núcleo de gás contendo uma quantidade considerável de líquido em forma gotas então o regime é classificado como anular com bolhas. Finalmente, no regime anular o líquido escoa pelas paredes formando um anel fino e o gás escoa pelo centro da tubulação com escassa ou nenhuma presença de gotas ou bolhas dispersas. A Fig. 1.4 exemplifica tais regimes presentes em um escoamento bifásico para dutos verticais.

A análise desta família de problemas complexos têm sido realizada comumente por

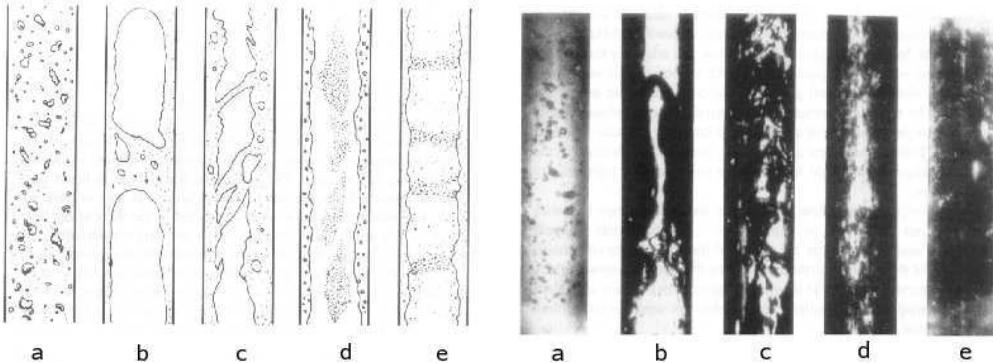


Figura 1.4: Regimes de escoamentos em dutos verticais. (a) bolhas dispersas, (b) golfadas, (c) padrão caótico, (d) anular com bolhas, (e) anular.

meio de experiências laboratoriais e modelagens matemáticas, onde as equações governantes são resolvidas fornecendo informações do problema em estudo. Para casos como estes, a descrição rigorosa demanda grandes esforços para a solução de modelos matemáticos, para os quais um compromisso entre acurácia e rapidez são normalmente procurados.

Uma das dificuldades encontradas na simulação de escoamentos bifásicos consiste no alto custo computacional existente se malhas uniformes e regulares são utilizadas para capturar os detalhes dos escoamentos. Assim, os métodos numéricos experimentam limitações quanto à velocidade e capacidade de armazenamento computacional. A alta densidade da malha euleriana gerada devido a diferença de escalas entre a fase dispersa e a fase contínua, requer que novas alternativas sejam implementadas com o intuito de diminuir o custo computacional, além de captar detalhes geométricos e fenômenos locais com maiores níveis de informações. Se a modelagem da turbulência é aplicada visando captar escalas ainda menores no escoamento, o cuidado não deve se reter apenas ao domínio espacial mas também no domínio temporal. Este último fator, leva à necessidade de métodos numéricos robustos que permitem trabalhar com largos passos no tempo.

Este tipo de simulação numérica envolve a análise de escoamentos ao redor de geometrias complexas que podem ser móveis e/ou deformáveis. Métodos clássicos têm sido empregados na busca de determinar maiores detalhes de escoamentos multifásicos, apresentando alguns inconvenientes e sendo dificilmente empregados, com eficiência, a todos os casos. Basicamente duas metodologias vêm sendo empregadas na simulação desse tipo de problema. Uma faz o uso de malhas não estruturadas, para descrever geometrias

complexas e utiliza técnicas de remalhagem nos casos de corpos deformáveis. Tem-se alternativamente os métodos baseados no conceito de Acompanhamento de Interfaces (*Front-Tracking Method*). Esta última apresenta algumas vantagens, podendo-se citar: a possibilidade de simular geometrias complexas em malhas cartesianas sem a necessidade de reconstrução da malha usada para discretizar a fase contínua, a cada passo de tempo, processo este bastante dispendioso computacionalmente.

Partindo-se do princípio de que malhas cartesianas são empregadas, no presente trabalho propõe-se aplicar o conceito de *malha bloco-estruturada refinada localmente* em conjunto com o Método de Acompanhamento de Interfaces para a simulação de escoamentos bifásicos bidimensionais, de forma que a solução de ambas as fases passe pela solução das equações de Navier-Stokes e para o movimento da interface recorre-se a formulação lagrangiana. Devido ao movimento da interface é necessário atualizar as propriedades físicas a todo instante do tempo, para isso uma função indicadora é aplicada. O fato de se ter uma interface, onde a função indicadora é utilizada para atualizar as propriedades físicas, o caracteriza também como um método de Captura de Interface. A turbulência é modelada utilizando Simulação de Grandes Escalas (LES ou SGE), onde passos de tempo da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x)$ são utilizados em todos os casos simulados. Esta capacidade advém da discretização temporal semi-implícita desenvolvida pelos autores do presente trabalho, a qual é baseada no Método de Gear Extrapolado. Esta é a principal contribuição do presente trabalho.

Pelo fato de se ter domínios de simulação variáveis no tempo devido a mobilidade da interface, um refinamento adaptativo é necessário ao longo do domínio. Problemas desta natureza são normalmente tratados com métodos de transformação de coordenadas ou com malhas não estruturadas. Como a metodologia *Front-Tracking/Front-Capturing* há a vantagem de se utilizar malhas cartesianas para discretizar qualquer geometria. Assim, um refinamento local adaptativo por meio de malhas bloco-estruturadas é aplicado no presente trabalho. Com essas características, a metodologia numérica aqui adotada apresenta grande potencial para modelar matematicamente e tratar numericamente problemas multifásicos contendo bolhas isoladas ou múltiplas bolhas, onde espaçamentos mínimos e largos passos no tempo são utilizados.

1.1 Organização do Trabalho

A redação da presente tese é dividida em sete capítulos, sendo que no Capítulo 1 apresentam-se as motivações que levaram ao seu desenvolvimento. No Capítulo 2 é apresentado um levantamento bibliográfico acerca dos temas relevantes ao desenvolvimento do trabalho, onde são abordados temas ligados a métodos numéricos em escoamentos multifásicos, turbulência e refinamento localizado. A modelagem matemática da fase dispersa e da fase contínua, bem como os fundamentos do tratamento matemático para a interface móvel e para a modelagem da turbulência são apresentados no Capítulo 3. O Capítulo 4 apresenta uma descrição dos métodos numéricos e a discretização das equações utilizadas na solução numérica das equações. No Capítulo 5, em particular, apresenta-se a metodologia Multigrid-Multinível utilizada para resolver os sistemas lineares. Os resultados das simulações numéricas e as validações de todos os casos testados podem ser encontrados no Capítulo 6. Nele também podem ser verificados os resultados comparativos com o diagrama de Clift (1978) para escoamentos bifásicos considerando uma única bolha. Uma aplicação com múltiplas bolhas também é apresentada. O Capítulo 7 apresenta as conclusões e sugestões para futuros desenvolvimentos e aplicações que podem ser derivadas do presente trabalho. Nas conclusões são ressaltadas a simplicidade e a flexibilidade do método nas simulações apresentadas, lembrando que os resultados apresentam boa concordância com resultados experimentais ou numéricos disponíveis, conforme o teste envolvido. São citadas também as limitações da presente metodologia. Finalizando, no Apêndice A é possível encontrar de forma mais detalhada o tratamento dado ao refinamento localizado adaptativo a partir da posição da interface. A estrutura de dados utilizada é descrita no Apêndice B.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

Neste capítulo, apresenta-se revisão da literatura sobre a metodologia adotada e implementada no presente trabalho. Os temas abordados tratam de escoamentos multifásicos e as possíveis técnicas de modelagem que envolvem este tipo de problema, assim como o refinamento adaptativo localizado. Uma revisão sobre os passos de tempo utilizados quando se trata de modelagem da turbulência usando Simulação de Grandes Escalas também é apresentada.

2.1 Escoamentos Multifásicos

A forma e a dimensão de uma bolha ou de uma gota afeta significantemente o seu movimento assim como os processos de transferência de calor e massa. A força de arrasto depende da forma da partícula e é um dos fatores que determinam a magnitude da velocidade do fluido. O transporte depende fortemente da área interfacial a qual é função da dimensão e da forma da interface, assim como de todo o movimento do fluido. Na interface entre uma bolha e o ambiente fluido, para que ocorra o equilíbrio da mesma, um balanço entre as forças gravitacional e de tensão superficial precisa ser estabelecido. Este balanço governa a forma e o seu movimento. A dimensão também pode ser influenciada, particularmente se uma mudança de fase ocorre.

Esta complexidade dos escoamentos multifásicos bem como a dinâmica das partículas tanto em fluidos newtoniano como não newtonianos tem se destacado na pesquisa

científica. Os fenômenos de desprendimento e ascensão de bolhas de gases em um fluido estático foram extensivamente estudados experimentalmente na década de 60. Os trabalhos pioneiros partem de Datta *et al.* (1950), Peebles e Garber (1953), Davidson e Schuler (1960), Ramakishnan *et al.* (1969), Khurana e Kumar (1969), Satyanarayan *et al.* (1969) e Wraith (1971). Clift *et al.* (1978), realizam levantamentos detalhados sobre o número de Reynolds e forças de arrasto tanto para interfaces gás-fluido como sólido-fluido, em particular para o movimento de interfaces isoladas. Magnaudet e Eames (2000) apresentam resultados experimentais do movimento de bolhas isoladas em um fluido não homogêneo. A influência de surfactantes, tensões cisalhantes e deformações também são destacadas como fatores que influenciam o movimento de bolhas. Recentemente, o estudo experimental tem se voltado para a análise do comportamento de bolhas sobre condições específicas, como por exemplo a influência de campos elétricos no desprendimento de bolhas (MARCO *et al.*, 2003) e o estudo do comportamento de gotas em micro e mini canais (PEHLIVAN *et al.*, 2006).

A forma de modelar matematicamente escoamentos bifásicos ou multifásicos depende fortemente do regime de escoamento. Portanto, existem diferentes enfoques para a modelagem de escoamentos bifásicos, os quais podem ser separados em: Modelos Homogêneos, Modelos de Difusão e Modelos a Dois-Fluidos ou Modelo Euler-Euler (WÖNER, 2003). O primeiro tipo pressupõe que ambas as fases se movimentam com a mesma velocidade e o equacionamento é similar ao caso monofásico com propriedades físicas calculadas a partir de médias ponderadas pelas frações volumétricas das diferentes fases. Os modelos de difusão podem ser considerados como uma generalização dos modelos homogêneos. Neste caso, assume-se que as fases estão em equilíbrio mecânico. Dessa forma, as velocidades das fases diferem entre si. A principal suposição do modelo de difusão é que a velocidade relativa entre as fases pode ser aproximada por uma expressão algébrica.

Finalmente, os modelos a dois-fluidos modelam cada fase separadamente junto com as condições de transferência interfacial ponto a ponto. Assim, matematicamente tem-se uma equação da conservação da massa e uma equação de balanço da quantidade de movimento para cada fase. Em escoamentos dispersos reais, uma grande variação nas dimensões das bolhas são observadas freqüentemente. Se as bolhas coalescem ou se fragmentam, nem o diâmetro nem a massa específica são constantes ou uniformes. Para superar esta restrição, os modelos a dois-fluidos são conceitualmente estendidos. Assim, equações de

transporte para a concentração de área interfacial e equações de balanço de população são introduzidas (RIBEIRO *et al.*, 2004).

Outro método apresentado por Wörner (2003) para a simulação de escoamentos multifásicos é o método euleriano-lagrangiano. Este nome advém do fato de que a fase contínua é tratada de certa forma, em um domínio euleriano e a fase dispersa é tratada em um domínio lagrangiano. Na aproximação lagrangiana a velocidade e a posição da bolha é uma função somente do tempo. Nesta aproximação, as equações de conservação de massa e balanço de quantidade de movimento são resolvidas para a fase contínua e dispersa. Para a fase dispersa, em contraste, a posição e a velocidade da partícula são obtidas pela segunda lei de Newton. Isto requer interpolações entre ambas as fases.

Áreas que contém a presença de interfaces móveis e deformáveis envolvem um conjunto maior de equações que se interagem. Existem basicamente duas técnicas usadas em simulações de escoamentos com a presença de interfaces móveis e deformáveis: Captura (*Capturing*) e Acompanhamento (*Tracking*). Em Captura da Interface, ela é tratada como uma região com variação acentuada, mas com algumas propriedades mantendo-se contínuas. Experimentos numéricos têm mostrado que esta metodologia não requer detalhes adicionais no algoritmo para modelar trocas na interface. A desvantagem é que há uma difusão da interface sobre várias células, resultando numa perda de precisão. Um exemplo desse método é o denominado *Level-Set Method*. Um outro método que utiliza essa técnica é o denominado *Volume-of-Fluid* (PUCKETT, 1997). Neste método, rastreia-se o volume ocupado de cada fase em cada célula a cada passo no tempo e estes volumes são usados para reconstruir uma aproximação da frente ou interface.

Em Acompanhamento da Interface, ela é tratada explicitamente movendo-se de forma independe sobre a malha na qual está inserida. Este método oferece uma melhor precisão que o método anterior, mas há um custo maior em complexidade. Utilizando esta metodologia de representação da interface pode-se destacar os métodos *Volume-Tracking*, *Boundary-Integral* e *Immersed Boundary* (Fronteira Imersa).

Unverdi e Tryggvason (1992) utilizam a metodologia na qual o escoamento é simulado por diferenças finitas em uma malha estacionária da fase contínua e a interface é explicitamente representada por uma malha não-estruturada que se move através da malha estacionária. Como a interface se deforma continuamente e a malha da interface interage com a malha estacionária é necessário reestruturar a interface dinamicamente a cada

passo no tempo, através da deleção ou inserção de pontos. Como a interface é tratada de forma explícita, mas também tem-se a presença de uma função indicadora que permite atualizar as propriedades do fluido à medida que a interface se desloca e tendo esta uma característica difusiva, esta metodologia se enquadra dentro dos modelos híbridos *Front-Tracking/Front-Capturing Method*. Particularmente, este é um método derivado do Método da Fronteira Imersa. Para mostrar a potencialidade desta metologia foram simulados casos com uma e duas bolhas em domínios bidimensionais e tridimensionais, onde observaram que este método evita difusão numérica e oscilações, além de permitir que a tensão superficial seja incorporada de uma forma natural.

A partir do trabalho de Unverdi e Tryggvason (1992), o qual é baseado no Método da Fronteira Imersa desenvolvido por Peskin (1977), Tryggvason e co-autores têm adicionado conhecimento considerável sobre escoamentos bifásicos a baixos, moderados e altos números de Reynolds. Sussman *et al.* (1994), visando trabalhar com altas razões de massa específica, utilizam um método *upwind* para o tratamento do termo advectivo. Escoamentos bifásicos com fragmentação e coalescência para altas razões de massa específica e viscosidade são apresentados por estes autores. Esmaelli e Tryggvason (1996), dando prosseguimento ao estudo de Unverdi, simulam a evolução de algumas centenas de bolhas bidimensionais e Esmaelli e Tryggvason (1998, 1999) simulam o movimento variável de várias bolhas para os casos bi e tridimensionais. Esmaelli e Tryggvason (1998) examinam um caso onde o número de Reynolds para as bolhas em ascensão permanecem baixos (i.e 1-2) e Esmaelli e Tryggvason (1999) examinam outro caso onde o número de Reynolds varia de 20 – 30, dependendo da fração volumétrica. Em ambos os casos, a maioria das simulações são limitadas ao domínio bidimensional. Entretanto, algumas simulações com 8 bolhas tridimensionais também são realizadas. Simulações envolvendo matrizes com bolhas dispersas livremente, em contraste com matrizes de bolhas dispersas regularmente, são também analisadas. Os autores verificam que as bolhas dispersas em matrizes regulares ascendem com menor velocidade que as bolhas dispersas em matrizes irregulares ou livres para baixos números de Reynolds. Para altos números de Reynolds, a análise inversa é observada. Os autores também relatam que os resultados apresentam alta dependência das dimensões do domínio para baixos números de Reynolds. Entretanto, alguns dos aspectos qualitativos são bem capturados.

Bunner e Tryggvason (2002) simulam um número maior de bolhas esféricas tridimen-

sionais utilizando uma versão paralelizada do método apresentado por Esmaeeli e Tryggvason (1998, 1999). Os resultados são apresentados para 216 bolhas ascendentes em um domínio periódico por um tempo relativamente longo, para um número de Reynolds variando de 20 a 30. Os resultados mostram que há uma tendência das bolhas a se alinharem lado-a-lado, para baixos números de Reynolds.

Para examinar os efeitos de deformações das bolhas, Bunner e Tryggvason (2003) conduzem dois conjuntos de simulações utilizando 27 bolhas. Em um dos casos as bolhas eram esféricas e em outro as bolhas se deformaram em elipsóides. As bolhas esféricas permaneceram uniformemente distribuídas, enquanto que as bolhas deformáveis inicialmente se comportaram da mesma forma, mas posteriormente se acumularam em linhas verticais. Tryggvason *et al.* (2006) discorrem sobre resultados a altos números de Reynolds onde são observados o regime *wobbling*, verificando-se instabilidades no escoamento. Smolianski *et al.* (2007) apresentam uma série de resultados para o caso *wobbling* com a coalescência de bolhas, levando à formação de golfadas em um canal vertical.

A influência da simulação numérica direta em escoamentos que envolvem a mudança de fase é discutida em Tryggvason *et al.* (2005), com principal ênfase na formação de micro-estruturas durante a solidificação e durante o processo de aquecimento. A partir deste ponto, várias análises têm focado em escoamentos bifásicos em canais verticais. Lu *et al.* (2006) têm examinado escoamentos laminares de bolhas em canais verticais. Os autores relatam que para um escoamento ascendente, as bolhas são atraídas para as paredes. O contrário se observa em escoamentos descendentes. Dando continuidade aos estudos de comportamento em canais, Lu e Tryggvason (2007) estudam os efeitos das dimensões das bolhas nas propriedades de escoamentos turbulentos em um canal vertical, onde as equações de Navier-Stokes são resolvidas utilizando um método de Acompanhamento de Interface e Volumes Finitos, de forma paralelizada. Os autores notam que apenas as flutuações das velocidades e os perfis de velocidade que cruzam o canal são alterados.

Sousa *et al.* (2004) apresentam um método o qual utiliza conceitos de *Front-Tracking* e *Front-Capturing* na simulação de escoamentos bifásicos tridimensionais. Nesta técnica, os pontos da interface são ajustados utilizando método dos mínimos quadrados e filtros que removem pequenas ondulações. Outras referências que não tratam a interface de forma explícita têm também apresentado bons resultados, como os observados por Sussmann *et al.* (1999) e Annaland *et al.* (2005).

2.2 Refinamento Adaptativo

A maioria dos métodos numéricos assumem que o domínio de interesse é dividido em pequenas células ou simplesmente elementos. O conjunto de células define uma malha. Assim, há dois tipos de malhas: estruturada e não estruturada. As malhas estruturadas oferecem certa vantagens sobre a malha não estruturada, como por exemplo o fato de apresentarem uma simples implementação e serem convenientes para o uso de diferenças finitas, além de requerer menor capacidade de armazenamento.

Muitas alternativas surgiram para o uso de malhas estruturadas, como o sistema de coordenadas coincidentes com a fronteira, técnicas de multi-blocos (VATSA *et al.* 1995) ou a técnica conhecida por Chimera (BENEK *et al.*, 1985), a qual permite que diferentes malhas geradas, especificamente para diferentes variáveis, possam se sobrepor.

A grande desvantagem de uma malha estruturada é a falta de flexibilidade em ajustar o domínio a uma forma mais complexa. Frente a esta dificuldade, malhas não estruturadas se ajustam com grande facilidade a geometrias complexas, mas demanda uma capacidade de armazenamento três vezes maior que malhas estruturadas, pois necessita armazenar informações dos pontos vizinhos. Embora malhas estruturadas permitam que a paralelização seja facilmente implementada, em malhas não estruturadas, sofisticados algoritmos de partição são necessários.

Como alternativa para contornar as dificuldades da malha estruturada ao se trabalhar com geometrias complexas, a metodologia euleriana-lagrangiana propõe discretizar o escoamento em uma malha estruturada e definir a partícula sólido/líquido, a qual contém uma geometria complexa, em uma malha lagrangiana não estruturada que trabalha de forma independente da malha euleriana. Mital e Iaccarino (2005) fazem uma análise sobre as vantagens e desvantagens do Método da Fronteira Imersa, que pertecem à classe de métodos *Front-Tracking*. Os autores afirmam que apesar da aplicação das condições de contorno e da conservação das propriedades do esquema numérico não serem óbvias, a discretização das equações do movimento é simples. As vantagens deste método se tornam claras quando a interface é móvel ou deformável, pois não requerem uma remalhagem a cada passo no tempo.

Quando se trata de escoamentos multifásicos por exemplo, a região de interesse é muito pequena quando comparada com todo o domínio de cálculo. Surge então a necessidade de

um refinamento localizado a fim de captar fenômenos físicos locais ou de definir com maior precisão regiões com elevadas curvaturas ou ângulos estreitos. Adaptações locais envolvem a inserção de nós em uma malha pré-existente. Assim duas diferentes estratégias de refinamento são possíveis: conformes e não conformes. Na estratégia conforme, a conectividade entre novos nós é rescostruída, sendo melhor aplicada à malhas não estruturadas e consequentemente a elementos triangulares.

No refinamento não conforme, novos nós são gerados pela subdivisão de células pré-existentes. Para a interface entre uma região refinada e uma não refinada, processos de interpolação e/ou reconstrução da solução são requeridos. Thornburg *et al.* (1998) por exemplo, utilizam gradientes para modificar as funções de controle de geradores de malhas. Durbin e Iaccarino (2002) propõem um refinamento por inserção de linhas e “anulam” segmentos de linhas onde o refinamento não se faz necessário.

Outra aproximação de refinamento localizado, consiste no uso de blocos em malhas estruturadas. Seguindo esta técnica Berger e Oliger (1984) propõem utilizar uma seqüência de malhas devidamente aninhadas. Assim, este refinamento é dado pela união de malhas retangulares orientadas com espaçamentos seqüencialmente menores. Cada uma dessas malhas são formadas basicamente por pontos onde o erro da solução da malha mais grossa é elevado devido a fenômenos localizados. Trabalhos posteriores os quais visaram estender esta técnica são apresentados por: Berger e Jameson (1985), Berger (1986), Berger (1987), Berger (1989), Berger e Rigoutsos (1991) e Berger e Le Veque (1991). Roma *et al.* (1999) estendem a técnica de refinamento adaptativo ao redor de geometrias complexas usando o Método da Fronteira Imersa. Recentemente, Griffith (2005) aplicou técnicas de paralelização a esta metodologia em um domínio tridimensional na simulação de escoamentos sanguíneos em um coração e válvulas.

Nessa mesma linha de pesquisa, Sussman *et al.* (1999) usando *level-set* para a solução de escoamentos bifásios, aplicam malha adaptativa no movimento de bolhas ascendentes e bolhas em coalisão. Mais recente, Nourgaliev (2005) utilizando *Front-Tracking* e Malhas Adaptativas Bloco-Estruturada simulou ondas de choque interagindo com bolhas cilíndricas de refrigerante.

2.3 Turbulência e Restrição Temporal

Da mesma forma que em escoamentos turbulentos monofásicos, escoamentos multifásicos geralmente apresentam uma grande diversidade de escalas, devido à dimensão da bolha quando comparada ao domínio em análise. Para uma coluna de bolhas ou escoamentos ao redor de uma embarcação, a razão entre as menores estruturas turbilhonares e o tamanho do domínio em análise atinge cerca de dezenas ou centenas de milhares.

Biswas *et al.* (2005) supõem que ao assumir 10 células na discretização da menor estrutura (bolha), onde esta bolha tem cerca de um milímetro e assumindo também que o sistema têm dimensões na ordem de metros, então a discretização para este simples sistema exigiria cerca de 10^{12} células. Isto levaria cerca de 10 a 20 anos para que a solução numérica fosse obtida. Mesmo se o refinamento adaptativo fosse aplicado, ainda assim seria pouco provável que simulações dessa ordem de grandeza possam ser praticadas. Como referência, Kaneda *et al.* (2003) atingem 4096^3 células na simulação trimensional de escoamentos multifásicos.

Esse tipo de análise leva a crer que a tendência da pesquisa científica é buscar conhecer o comportamento médio ou uma banda do escoamento e permitir que as pequenas escalas sejam levadas em conta pelos modelos de fechamento. Quando se fala em modelagem da turbulência e do uso da metodologia da fronteira imersa, fortes restrições da ordem $O(\Delta x^2)$, são exigidas.

Grigoriadis *et al.* (2004) fazem uma análise sobre o comportamento da modelagem sub-malha para LES, em escoamentos ao redor de geometrias complexas, utilizando-se o método da fronteira imersa. Neste estudo, ao utilizar Adam's Bashforth, também se observa uma restrição temporal da ordem de $O(\Delta x^2)$, devido ao tratamento explícito do termo viscoso.

Balaras (2003), afirma que um tratamento implícito do termo viscoso utilizando Adams-Bashforth/Crank-Nicolson não resulta em um ganho significante no passo de tempo. Yang e Balaras (2006) aplicam LES e MFI, onde o campo de velocidade para os pontos próximo à interface é reconstruído usando “momentos de força”, para uma simulação tridimensional de válvulas cardíacas. Os autores relatam que ao usarem Runge-Kutta de terceira ordem e Crank-Nicolson para os termos advectivos e viscosos respectivamente, passos de tempo da ordem de $O(\Delta x^2)$ foram necessários. No presente trabalho um método semi-implícito

baseado no método de Gear Extrapolado é aplicado. Dessa forma, é possível assegurar passos de tempo da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x)$ ao se utilizar LES.

Capítulo 3

Modelo Matemático

Este capítulo está voltado para a formulação matemática de escoamentos incompressíveis envolvendo a interação entre fluidos de propriedades físicas distintas. Tal formulação é fundamentada na mecânica do contínuo e é expressa pela lei de conservação da massa (equação da continuidade) e balanço da quantidade de movimento (segunda lei de Newton).

Os escoamentos, em sua grande parte são encontrados em processos industriais, tais como, câmaras de ebulação, processos de cavitação em sistemas hidráulicos, reatores químicos, colunas de bolhas e centrífugas na indústria petroquímica (BUNNER e TRYGGVASON, 2003). As bolhas também apresentam papel relevante na natureza, tais como a propagação de som nos oceanos, troca de gases e calor entre os oceanos e a atmosfera e nas erupções vulcânicas. Tais processos envolvem a ação de uma força atuando entre as diferentes fases, a qual é consequência da tensão interfacial. Na simulação numérica desses fenômenos, utilizam-se as equações de Navier-Stokes na modelagem do escoamento e a formulação lagrangiana para a modelagem do movimento da interface.

No presente trabalho, o foco está voltado para escoamentos bidimensionais bifásicos, isotérmicos e incompressíveis de fluidos imiscíveis newtonianos. No entanto, escoamentos monofásicos em uma cavidade também são analizados. O domínio físico global de análise é dividido em um domínio euleriano, o qual envolve todo o meio fluido, incluindo as duas ou mais fases presentes, e um domínio lagrangiano (*interface fluido-fluido ou fluido-sólido*). A Fig. 3.1 ilustra uma bolha no interior de um fluido, exemplificando o domínio euleriano

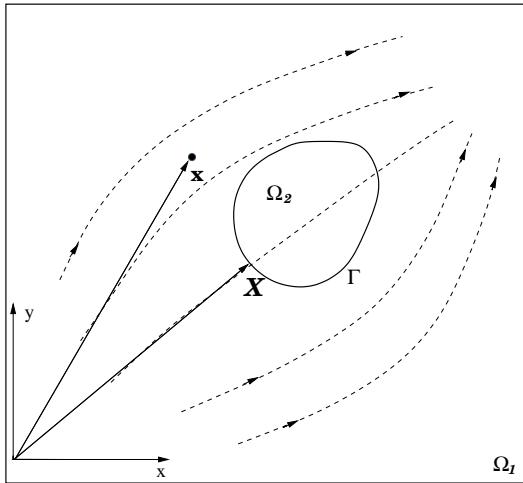


Figura 3.1: Representação de um corpo imerso de geometria arbitrária definindo o domínio euleriano $\Omega_1 \cup \Omega_2$ e o domínio lagrangiano Γ .

Ω e o domínio lagrangiano Γ .

As formulações para o domínio euleriano, ou seja, as equações de Navier-Stokes são tratadas na Seção 3.1. As equações governantes para uma interface móvel e deformável de massa desprezável, são apresentadas na Seção 3.2. A Seção 3.3 apresenta o acoplamento entre esses dois domínios, ou seja, as funções utilizadas nos processos de interpolação e espalhamento de velocidades e forças entre os domínios euleriano-lagrangiano.

Na Seção 3.4, descrevem-se as equações filtradas de Navier-Stokes e a modelagem sub-malha da turbulência para escoamentos bifásicos. O modelo de Smagorinsky é brevemente apresentado para ilustrar as potencialidades da metologia ao se trabalhar com viscosidade variável. Finalmente, na Seção 3.5, descrevem-se as equações de Navier-Stokes adimensionalizadas para escoamentos bifásicos, bem como os parâmetros adimensionais de controle do escoamento.

3.1 Formulação Euleriana

A formulação euleriana é empregada para descrever a dinâmica do fluido. Nesta formulação, o escoamento é modelado pelas equações de Navier-Stokes em todo domínio de cálculo. As equações de Navier-Stokes, as quais compõem um sistema acoplado de equações diferenciais parciais não lineares, podem ser escritas na forma vetorial para es-

escoamentos isotérmicos e compressíveis, como (WHITE, 1991)

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (3.2)$$

onde ρ e μ são respectivamente a massa específica e a viscosidade dinâmica, propriedades que caracterizam o fluido. As características dos escoamentos são representadas por: p (campo de pressão), \mathbf{u} (vetor velocidade), \mathbf{f} (vetor campo de força externa que atua sobre o escoamento na interface) e \mathbf{g} (aceleração gravitacional).

Observa-se aqui que o termo fonte de força \mathbf{f} permite a comunicação entre as equações de Navier-Stokes e as equações para o movimento da interface, ou seja, é o termo responsável por fazer o escoamento “sentir” a presença da interface, forçando assim o aparecimento de escoamentos coerentes internos e externos a ela. Dessa forma, o termo fonte de força euleriano pode ser diferente de zero sobre à interface, sendo sempre nulo fora da interface. A representação matemática desse comportamento singular do campo de forças é feita com o auxílio da “função” Delta de Dirac δ (veja Seção 4.6.1). O campo de forças euleriano é então definido por

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}) d\mathbf{x}, \quad (3.3)$$

onde $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t)$ é a força lagrangiana calculada sobre as partículas de fluido que compõem a interface. O vetor \mathbf{x} é a posição de uma partícula de fluido no domínio euleriano e o vetor \mathbf{X} é a posição de uma partícula de fluido que está sobre a interface, tal que

$$\mathbf{X} = (X(s, t), Y(s, t)), \quad s \in \mathcal{S}. \quad (3.4)$$

Destaca-se aqui, que para escoamentos bifásicos com condições periódicas na direção da gravidade, uma restrição precisa ser adicionada ao termo gravitacional para se evitar uma aceleração uniforme descendente em todo fluido (ESMAEELI e TRYGGVASON, 1999). O termo gravitacional passa então a ser definido por $(\rho_o - \rho)\mathbf{g}$, onde $\rho_o = (1 - \alpha)\rho_c + \alpha\rho_d$, ρ_c é a massa específica para a fase contínua e ρ_d é massa específica para a fase dispersa do escoamento bifásico e α é a fração volumétrica, ou seja, a razão entre o volume da fase dispersa pelo volume da fase contínua.

Para o cálculo das propriedades físicas da fase contínua e da fase dispersa e para a região de transição entre ambas as fases, utiliza-se a função indicadora. Várias técnicas

que vão desde a aplicação de geometria computacional (CENICEROS e ROMA, 2005) quanto à solução de uma equação de Laplace (UNVERDI e TRYGGVASON, 1992) têm sido aplicadas para determinar os valores da função indicadora, a qual assume valor de referência constante positivo para a fase contínua e um valor de referência constante negativo para a fase dispersa, em geral adota-se os valore de 0 (fase contínua) e 1 (fase dispersa). Assim, ao longo da interface estendida a função indicadora $\psi(\mathbf{X}(s, t))$ assume valores entre zero e um. Com $\psi(\mathbf{X}(s, t))$ sendo calculada a cada passo no tempo, as propriedades físicas são então obtidas pelas relações

$$\rho(\psi) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)\psi(\mathbf{X}(s, t)), \quad (3.5)$$

$$\mu(\psi) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)\psi(\mathbf{X}(s, t)), \quad (3.6)$$

onde ρ_d e μ_d são as propriedades da fase dispersa (bolha) e ρ_c e μ_c são as propriedades da fase contínua.

Frente à formulação euleriana apresentada acima para escoamentos transientes compressíveis e isotérmicos, uma restrição é então imposta a fim de tratar escoamentos bifásicos usando a modelagem para escoamentos incompressíveis, ou seja, considerando ρ constante para cada uma das fases diferentes entre si. Para que isto seja possível, admite-se a hipótese simplificadora de que a massa específica permanece constante sobre uma determinada linha de corrente (SILVEIRA-NETO, 1997). A partir desta hipótese, define-se a seguinte equação para a massa específica ρ

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0, \quad (3.7)$$

identificando que a massa específica pode ser variável apenas de uma linha de corrente para a outra.

Escrevendo a equação da continuidade para escoamentos compressíveis na sua forma estendida

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0, \quad (3.8)$$

e aplicando a Eq. (3.7) na Eq. (3.8), obtém-se a equação da continuidade para escoamentos incompressíveis, ou seja,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.9)$$

Dessa forma, as equações da quantidade de movimento e da conservação da massa para escoamentos bifásicos incompressíveis mas com ρ variável são dadas por

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (3.10)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (3.11)$$

Observa-se que ρ é considerado variável porque existe diferentes fluidos com diferentes massas específicas. Para cada fase ρ é constante.

Convém destacar aqui que essa hipótese simplificadora não é válida sobre a interface estendida, pois as linhas de corrente que cruzam esta região experimentam variação da massa específica. A Fig. 3.2 apresenta o desenvolvimento das linhas de corrente ao redor de uma interface. Ao observar a variação da massa específica ao longo das linhas de corrente que cruzam a interface estendida, conclui-se que a conservação da massa nessa região não é garantida.

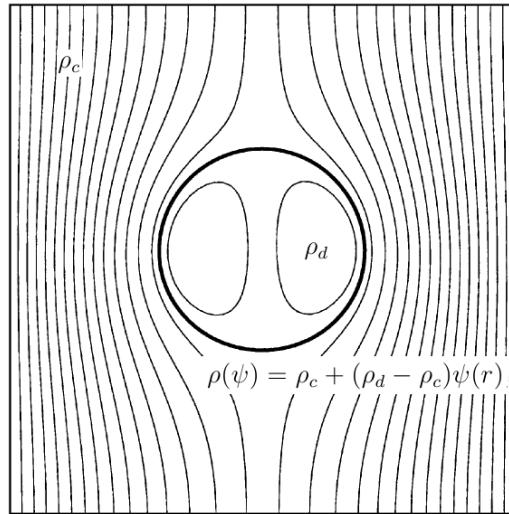


Figura 3.2: Linhas de corrente ao redor de uma interface, onde ρ_c é a massa específica da fase contínua e ρ_d é a massa específica da fase dispersa, $\rho(\psi)$ identifica a massa específica variável na interface estendida, onde $\psi(r)$ é a função indicadora e seus valores variam de 0 (fase dispersa) a 1 (fase contínua).

Esmaeeli e Tryggvason (1999), afirmam que apesar da massa não estar explicitamente imposta, na prática ela é bem conservada. Realmente, nos métodos híbridos *Front-Tracking/Front-Capturing* a variação da massa ao longo do cálculo é geralmente pequena quando comparada com os métodos *level-set*. Enright *et al.* (2005) e Min e Gibou (2006),

mostram de forma quantitativa a perda de massa utilizando métodos *level-set*. No entanto, quando se compara com o método *Volume-of-Fluid* (AULISA *et al.*, 2003), este apresenta melhor conservação da massa que os métodos híbridos *Front-Tracking/Front-Capturing*. No presente trabalho, observa-se que esta variação de massa é da ordem da espessura da interface estendida. Uma análise matemática pode ser feita sobre a interface no instante $t = t_0$ e $t = t_1$, sendo que no instante $t = t_1$, sua geometria é alterada. A Fig. 3.3, mostra a interface no instante $t = t_0$ e $t = t_1$.

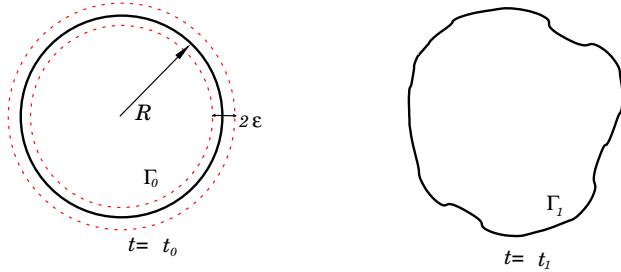


Figura 3.3: Variação da massa na interface.

Admitindo que a interface estendida tem espessura 2ϵ , e sabendo-se que o divergente da velocidade na interface estendida é diferente de zero. Então, aplicando o teorema do transporte, a variação da área ao longo do tempo $t = t_0$ e $t = t_1$ é dada por

$$\frac{d}{dt} \int_{\Gamma_{t_1}} d\mathbf{x} = \int_{\Gamma_{t_0}} (\nabla \cdot \mathbf{u}) d\mathbf{x}, \quad (3.12)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Gamma_{t_1}} d\mathbf{x} = \int_0^{2\pi} \int_{R-\epsilon}^{R+\epsilon} (\nabla \cdot \mathbf{u}) r d\theta dr, \quad (3.13)$$

$$(3.14)$$

e lembrando que, $\nabla \cdot \mathbf{u} \approx \bar{\nabla} \cdot \mathbf{u} = \text{constante}$, tem-se

$$\frac{d}{dt} \int_{\Gamma_{t_1}} d\mathbf{x} = \bar{\nabla} \cdot \mathbf{u} \int_0^{2\pi} \int_{R-\epsilon}^{R+\epsilon} r d\theta dr, \quad (3.15)$$

$$\frac{d}{dt} \int_{\Gamma_{t_1}} d\mathbf{x} = \bar{\nabla} \cdot \mathbf{u} 4\pi^2 \epsilon. \quad (3.16)$$

Assim, conclui-se que a variação da área em um dado instante de tempo t_1 é da ordem de ϵ , ou seja,

$$\frac{d}{dt} A(t) = \mathcal{O}(\epsilon). \quad (3.17)$$

Conhecendo-se a ordem dessa variação, a formulação apresentada acima é aplicada devido aos bons resultados gerados. Os resultados apresentados no Capítulo 6, demonstram a variação definida na Eq. (3.17).

3.2 Formulação Lagrangiana

A densidade de força lagrangiana \mathbf{F} localizada sobre a interface, pode ser modelada de diferentes formas, em função do tipo de problema que é analisado. Problemas de interação fluido-estrutura como tecidos biológicos (PESKIN, 1977) e fronteiras móveis (OLIVEIRA, 2006) ou ainda escoamentos bifásicos (UNVERDI e TRYGGVASON, 1992; TRYGGVASON *et al.*, 2006) e escoamentos ao redor de fronteiras rígidas (LIMA e SILVA, 2002) são exemplos de aplicação da força lagrangiana através do Método de Acompanhamento de Interface (*Front-Tracking Method*) ou Método da Fronteira Imersa. No presente trabalho a ênfase está na formulação lagrangiana aplicada à escoamentos bifásicos utilizando um Método Híbrido *Front-Tracking/Front-Capturing*, ou seja, a interface é implementada de forma explícita utilizando a formulação lagrangiana, mas também é tratada como uma região com variação acentuada devido à aplicação da função indicadora.

3.2.1 Escoamentos Bifásicos

Como já citado anteriormente, a forma de modelar escoamentos bifásicos depende fortemente do regime de escoamento. O presente trabalho está voltado para simulação de escoamentos bifásicos utilizando o método Euler-Lagrange (WÖRNER, 2003), de forma que a interface é simulada através do Método Híbrido *Front-Tracking/Front-Capturing*, onde tanto a solução da fase contínua quanto a da fase dispersa passam pela solução das equações de Navier-Stokes e o movimento da interface utiliza a formulação lagrangiana para cada partícula de fluido que compõe a interface.

O método usado para acompanhar as interfaces foi inicialmente desenvolvido por Peskin e McQueen (1980) e estendido para fluidos com diferentes massas específicas por Unverdi e Tryggvason (1992). Neste método, a interface é definida por um domínio lagrangiano que se desloca delimitando a fase dispersa, enquanto que a fase contínua é completamente definida no domínio euleriano. As modelagens nesses dois domínios são

tratadas separadamente e as interações entre estas diferentes fases são feitas por meio de interpolações. Estas interações se caracterizam por: (i) a força superficial resultante é calculada na interface e distribuída para o domínio euleriano; (ii) a velocidade do fluido é calculada no domínio euleriano e interpolado para o domínio lagrangiano; (iii) a nova posição da interface é recalculada, e as propriedades do fluido são atualizadas.

A modelagem da densidade de força lagrangiana aqui apresentada segue a proposta de Unverdi e Tryggvason (1982), os quais estendem a proposta original de Peskin (1977), onde os pontos lagrangianos estão unidos entre si por uma força elástica, para escoamentos multifásicos. Nesta, a força elástica é substituída pela força de tensão superficial entre os fluidos. Dessa forma, a densidade de força lagrangiana depende apenas dos parâmetros geométricos da interface e do par de fluidos.

Se $F(\mathbf{X}, t)$ é a densidade de força aplicada pela interface no domínio euleriano, o balanço de força em um ponto arbitrário sobre um segmento da interface de comprimento Δs definido por $s_1 \leq s \leq s_2$ (Fig. 3.4), é:

$$\frac{d}{dt} \int_{s_1}^{s_2} m(s) \frac{\partial \mathbf{x}_k(s, t)}{\partial t} ds = [T(s, t)\mathbf{t}(s, t)]_{s_1}^{s_2} + \int_{s_1}^{s_2} -\mathbf{F}(s, t)ds, \quad (3.18)$$

onde $m(s)$ representa a massa da interface, \mathbf{t} é o vetor tangente unitário e T é a tensão superficial gerada pela descontinuidade da propriedade física entre os dois lados da interface e $(-\mathbf{F})$ é a reação do fluido na interface em resposta a ação de \mathbf{F} no fluido (ROMA, 1996).

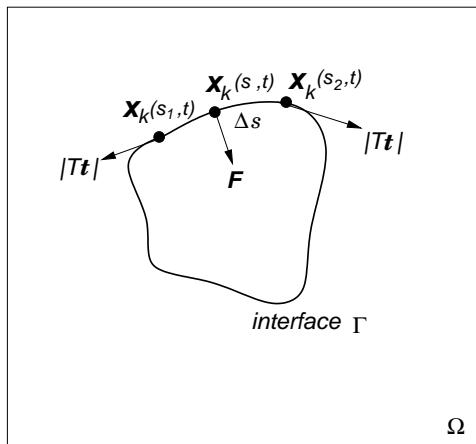


Figura 3.4: Esquema representativo da interface Γ em um domínio Ω .

Assumindo em (3.18) que a massa da interface é desprezável o termo esquerdo de

(3.18) desaparece. Aplicando o teorema Fundamental do Cálculo, o qual afirma que se uma função contínua é primeiramente integrada e depois diferenciada, volta-se a função original e rearranjando seus termos, (3.18) pode ser reescrita como

$$\int_{s1}^{s2} [\mathbf{F} - \frac{\partial(T\mathbf{t})}{\partial s}] ds = 0. \quad (3.19)$$

Sabendo que s_1 e s_2 são valores arbitrários, a densidade de força lagrangiana é então definida por

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \frac{\partial(T\mathbf{t})}{\partial s} = \frac{\partial T}{\partial s}\mathbf{t} + T\frac{\partial\mathbf{t}}{\partial s} \\ &= \frac{\partial T}{\partial s}\mathbf{t} + T \parallel \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial s} \parallel \kappa\mathbf{n}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde $\kappa = \parallel \frac{\partial\mathbf{t}}{\partial s} \parallel / \parallel \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial s} \parallel$ é a curvatura da interface, $\mathbf{t} = \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial s} / \parallel \frac{\partial\mathbf{X}}{\partial s} \parallel$ é o vetor tangente unitário à direção da interface e $\mathbf{n} = \frac{\partial\mathbf{t}}{\partial s} / \parallel \frac{\partial\mathbf{t}}{\partial s} \parallel$ é o vetor normal à interface.

Quando a interface se movimenta devido à velocidade do fluido ou devido à ação da gravidade para o caso de escoamentos multifásicos, a nova posição da interface pode ser expressa matematicamente em função da velocidade do fluido, a qual é conhecida como *condição de não deslizamento* e é dada por

$$\frac{\partial\mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \mathbf{u}(\mathbf{X}, t). \quad (3.21)$$

Com o movimento da interface mais um dispositivo entre as formulações lagrangianas e eulerianas é requerido, o qual interpola as velocidades eulerianas para os pontos lagrangianos, usando-se formalmente as propriedades da função Delta de Dirac, tal que

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x}, \quad (3.22)$$

onde Ω identifica o domínio euleriano. Substituindo-se a Eq. (3.21) em Eq. (3.22) tem-se

$$\frac{\partial\mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x}. \quad (3.23)$$

3.2.2 Regularização da Distribuição de Pontos Lagrangianos

Quando a interface se deforma e estira devido ao movimento do escoamento tanto interno e externo à interface, alguns segmentos da interface podem se tornar inadequados devido ao deslocamento dos pontos lagrangianos. Geralmente observa-se que em regiões de altas curvaturas os pontos lagrangianos tendem a se aglomerar, enquanto que nas

regiões de menores curvaturas os pontos lagrangianos tendem a se distanciarem uns dos outros.

Normalmente as tensões superficiais são modeladas pela imposição de um salto de pressão na interface, a qual é proporcional à curvatura (condição de Young-Laplace). Hou *et al.* (1994) demonstram que isto introduz dentro das equações do movimento para a interface, um grande número de derivadas espaciais. Se um método de integração explícito no tempo é usado, estes termos levam à uma rígida restrição no passo no tempo. Para um método explícito essa restrição tem a forma $\Delta t < C \cdot (\sigma h)^{3/2}$, i.e. $h\sigma \approx \Delta s$, onde Δs , onde h é o espaçamento da malha pertencente ao domínio euleriano e Δs é o espaçamento entre os pontos lagrangianos. Assim, à medida que os pontos tendem a se aglomerarem, menor será Δs , tornando impraticável o uso de métodos explícitos.

Um controle parcial na tentativa de manter a precisão consiste na redistribuição dos pontos lagrangianos através da deleção ou inserção de pontos, controlando assim, a distância entre os pontos lagrangianos. Este processo tem, entretanto, o inconveniente de introduzir suavizações artificiais como resultado de repetidas interpolações.

Baseados na proposta de Hou *et al.* (1994), Ceniceros e Roma (2004), apresentam como uma alternativa efetiva, usar uma velocidade tangencial apropriadamente escolhida para controlar a distribuição dos pontos da interface, de forma que o movimento dos pontos da interface ocorre somente devido a velocidade normal do fluido. Assim a Eq. (3.23) é substituída por

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x} + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t}, \quad (3.24)$$

onde $u_a(\mathbf{X}, t)$ é a velocidade auxiliar que mantém os pontos equidistribuídos, ou seja, se os pontos da interface estão inicialmente igualmente distribuídos, as seguintes escolhas de $u_a(\mathbf{X}, t)$ os mantêm igualmente distribuídos ao longo de todo o tempo. A velocidade auxiliar é então definida por

$$u_a(\mathbf{X}, t) = -u_t(\mathbf{X}, t) + \int_0^s [\sigma_s \kappa u_n - \langle \sigma_s \kappa u_n \rangle] ds', \quad (3.25)$$

onde $u_t = \mathbf{u} \cdot \mathbf{t}$, $u_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, $\sigma_s = \sqrt{X^2(s, t) + Y^2(s, t)}$ é o comprimento métrico do arco, κ é a curvatura média, \mathbf{n} é o vetor normal unitário, \mathbf{t} é o vetor tangente unitário e o operador $\langle \rangle$ define uma média espacial.

3.3 Acoplamento Euleriano-Lagrangiano

Na Seção 3.1, a função Delta de Dirac δ é mencionada como dispositivo de comunicação entre os domínios euleriano e lagrangiano. Assim, ela é responsável pela distribuição da densidade de força interfacial lagrangiana para os pontos eulerianos e pela interpolação das velocidades do domínio euleriano para os pontos pertencentes à interface lagrangiana. Tais operações são denominadas de *espalhamento* e *interpolação*, respectivamente. A formulação matemática é novamente aqui apresentada para os processos de espalhamento (Eq. 3.26) e interpolação (Eq. 3.27), assim tem-se

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega} \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x}, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x}. \quad (3.27)$$

Para a discretização da função Delta de Dirac, utiliza-se uma função distribuição com propriedades de uma função Gaussiana (mais detalhes sobre a discretização da função distribuição e suas propriedades são apresentados na Seção 4.6.1). Dependendo da função distribuição adotada, as operações de espalhamento e interpolação são realizadas em um suporte compacto de 3^2 ou 4^2 células por ponto lagrangiano. Dessa forma, o termo fonte de força é calculado apenas nas regiões vizinhas à interface e fora delas assume um valor nulo.

3.4 Turbulência

Os escoamentos na natureza ou mesmo em problemas de engenharia são, em grande parte, turbulentos e portanto requerem um tratamento diferenciado devido à complexidade do fenômeno. A turbulência apresenta algumas características peculiares, sendo as mais importantes destacadas por Silveira-Neto (2003): fenômeno altamente instável, multiplicidade de escalas, presença de estruturas tridimensionais coerentes.

Na tentativa de entender o comportamento de escoamentos turbulentos, diversas estratégias de modelagem numérica têm sido utilizadas. Uma delas consiste na Simulação de Grandes Escalas (LES), a qual é baseada no processo de filtragem das equações de Navier-Stokes (OLIVEIRA, 2006). Nesta modelagem, as maiores estruturas turbulentas são resolvidas diretamente pelas equações governantes filtradas até uma escala de corte,

determinada pelo tamanho da malha empregada no processo de discretização. O escoamento é então dividido em escalas resolvidas (grandes escalas) e não resolvidas (pequenas escalas).

Do ponto de vista de aplicações em engenharia, LES juntamente com DNS (Simulação Direta Numérica), têm mostrado resultados promissores na predição de escoamentos complexos onde modelos tradicionais não conseguem fornecer bons resultados. Souza (2003) utiliza a metodologia LES para estudo do escoamento em um hidrociclone. Os resultados numéricos, para os números de Reynolds investigados evidenciam as principais características físicas, bem como as instabilidades do escoamento. Padilha (2004) também utiliza a metodologia na simulação e análise do processo de transição à turbulência de escoamentos complexos com transferência de calor sobre corpos rotativos. Oliveira (2006) aplica LES na simulação de escoamentos a altos números de Reynolds sobre geometrias móveis ou deformáveis, no qual utiliza a metodologia da Fronteira Imersa para a simulação dos corpos. Seus resultados apresentam boa coerência com resultados numéricos e experimentais disponíveis na literatura.

3.4.1 Equações Filtradas de Navier-Stokes

LES impõe a necessidade de separar as escalas por intermédio de um processo de filtragem das equações de transporte. O método apresentado em detalhes por Silveira-Neto e Mansur (2003) é aqui utilizado.

As equações governantes para massa específica variável como apresentadas pelas Eqs. (3.10) e (3.11), são aqui reescritas na forma conservativa e em notação tensorial

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right\} + \rho g_i + f_i, \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_i} &= 0. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Para deduzir as equações filtradas para escoamentos turbulentos utiliza-se o operador filtragem de Favre (1965) “[]”, o qual é definido pela seguinte equação,

$$[f] = \frac{\int_{\mathbb{V}} G \rho f d\mathbb{V}}{\int_{\mathbb{V}} G \rho d\mathbb{V}}, \quad (3.29)$$

onde f é uma variável instantânea escalar ou vetorial e G é uma função filtro com o objetivo de eliminar as altas frequências do escoamento turbulento. Assim, a função f

filtrada é dada por

$$[f] = \frac{\overline{\rho f}}{\overline{\rho}}, \quad (3.30)$$

de onde tem-se que

$$\overline{\rho f} = \overline{\rho}[f], \quad (3.31)$$

sendo que o operador “-” identifica que a variável foi filtrada e o operador “[]” identifica que a variável foi filtrada com a massa específica agindo como uma função peso.

Aplicando a operação de filtragem de Favre às equações de Navier-Stokes, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial([\rho u_i])}{\partial t} + \frac{\partial([\rho u_i u_j])}{\partial x_j} &= -\frac{\partial[p]}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial[u_i]}{\partial x_j} + \frac{\partial[u_j]}{\partial x_i} \right) \right\} + [\rho g_i] + [f_i], \\ \frac{\partial[u_i]}{\partial x_i} &= 0. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Utilizando a Eq. (3.31), a Eq. (3.32) pode ser reescrita por

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\overline{\rho}[u_i])}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}[u_i u_j])}{\partial x_j} &= -\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial[u_i]}{\partial x_j} + \frac{\partial[u_j]}{\partial x_i} \right) \right\} + \overline{\rho} g_i + [f_i], \\ \frac{\partial[u_i]}{\partial x_i} &= 0. \end{aligned} \quad (3.33)$$

A equação filtrada para escoamentos incompressíveis, Eq. (3.33), se apresenta como uma equação de transporte para as variáveis filtradas ($[u_i]$). No entanto, no termo advectivo aparece o produto filtrado ($[u_i u_j]$). Busca-se então escrever essa equação de forma a obter o produto das variáveis dependentes filtradas ($[u_i][u_j]$), o qual é feito através da definição do tensor global de Germano $\tau_{ij} = [u_i u_j] - [u_i][u_j]$. Nota-se que essa definição leva ao aparecimento de um novo termo, o tensor τ_{ij} . Detalhes de como essa equação é obtida podem ser encontrados em Silva Freire *et al.* (2002). A expressão obtida após a substituição do tensor global de Germano é dada por

$$\overline{\rho} \frac{\partial[u_i]}{\partial t} + \overline{\rho} \frac{\partial([u_i][u_j])}{\partial x_j} = -\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial[u_i]}{\partial x_j} + \frac{\partial[u_j]}{\partial x_i} \right) - \tau_{ij} \right\} + \overline{\rho} g_i + [f_i]. \quad (3.34)$$

O tensor τ_{ij} , também conhecido como *tensor sub-malha global de Reynolds* foi proposto por Germano (1986). Para que se possa resolver as equações filtradas deve-se modelar o tensor τ_{ij} . Tal modelagem faz parte do denominado *problema de fechamento da turbulência* (LESIEUR, 1997). Vários métodos têm sido desenvolvidos propondo a modelagem de τ_{ij} . A modelagem do tensor de Reynolds proposta por Boussinesq supõe que as tensões

turbulentas de Reynolds sejam proporcionais às taxas de deformação geradas pelo campo de velocidade filtrado e pela energia cinética turbulenta k . Assim,

$$\tau_{ij} = -\mu_t \left(\frac{\partial [u_i]}{\partial x_j} + \frac{\partial [u_j]}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} k \delta_{ij}, \quad (3.35)$$

onde

$$k \equiv \frac{1}{2} ([u'_j u'_j]) = \frac{1}{2} ([u'^2] + [v'^2] + [w'^2]), \quad (3.36)$$

e $u'_i = u_i - [u_i]$, $i = 1, \dots, 3$.

O termo μ_t da Eq. (3.35) é denominado de viscosidade turbulenta e deve ser calculado utilizando-se algum dos modelos de turbulência existentes. Substituindo-se o modelo de Boussinesq, Eq.(3.35) em Eq. (3.34), consegue-se resolver o problema de fechamento usando a hipótese de viscosidade turbulenta. Observe que no lugar do termo de pressão original surge uma pressão modificada \tilde{p} , dando origem a equação

$$\frac{\partial(\bar{\rho}[u_i])}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}[u_i][u_j])}{\partial x_j} = -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ (\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial [u_i]}{\partial x_j} + \frac{\partial [u_j]}{\partial x_i} \right) \right\} + \bar{\rho} g_i + [f_i]. \quad (3.37)$$

O termo envolvendo a energia cinética turbulenta durante a substituição resulta em um gradiente de energia cinética turbulenta que é incorporado ao termo de pressão estática, originando a equação para a pressão modificada, $\tilde{p} = \bar{p} + \frac{2}{3} \rho k$, a qual pode ser escrita também na forma não conservativa,

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial [u_i]}{\partial t} + \bar{\rho} [u_i] \frac{\partial ([u_j])}{\partial x_j} &= -\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu_{ef} \left(\frac{\partial [u_i]}{\partial x_j} + \frac{\partial [u_j]}{\partial x_i} \right) \right\} + \bar{\rho} g_i + [f_i], \\ \frac{\partial [u_i]}{\partial x_i} &= 0. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Com as equações filtradas definidas acima, falta um modelo que permita avaliar a viscosidade turbulenta. No presente trabalho, a modelagem sub-malha de Smagorinsky é utilizada devido à eficiência e facilidade de sua implementação.

3.4.2 Modelo Sub-Malha de Smagorinsky

O Modelo Sub-malha de Smagorinsky para Simulação de Grandes Escalas, adotado no presente trabalho, permite verificar a capacidade da metodologia em trabalhar com viscosidade variável. Este modelo foi proposto por Smagorinsky (1963), tendo sido o primeiro modelo com o objetivo de se calcular a viscosidade turbulenta e modelar o tensor de Reynolds. É um modelo de simples implementação, porém exigente quanto ao

refinamento da malha uma vez que ele se presta à modelagem apenas das menores escalas da turbulência (OLIVEIRA, 2006).

Trata-se de um modelo sub-malha algébrico, baseado na hipótese de equilíbrio local para as pequenas escalas, ou seja, que a produção de tensões turbulentas sub-malha seja igual à taxa de dissipação da energia turbulenta. A viscosidade turbulenta μ_t é calculada em função da taxa de deformação S_{ij} e da escala de comprimento ℓ ,

$$\mu_t = (C_s \ell)^2 \sqrt{2S_{ij} S_{ij}}, \quad (3.39)$$

onde $\ell = \sqrt{\Delta x \Delta y}$ é o comprimento característico das escalas sub-malha e é uma função da malha de discretização. C_s é a constante de Smagorinsky relacionada à transferência de energia das grandes escalas para as pequenas escalas. Por fim, a taxa de deformação S_{ij} é calculada com base no campo de velocidades,

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (3.40)$$

Com o cálculo da viscosidade turbulenta é possível determinar a viscosidade efetiva μ_{ef} a qual é composta pela viscosidade molecular μ mais a viscosidade turbulenta μ_t , tal que

$$\mu_{ef} = \mu + \rho(C_s \ell)^2 \sqrt{2S_{ij} S_{ij}}. \quad (3.41)$$

Quanto à constante de Smagorinsky C_s , no presente trabalho foi utilizado o valor de 0,18, sendo no entanto, consenso que esta constante pode ser ajustada para cada tipo de escoamento ou código computacional.

Apesar de ser um modelo simples, o modelo de Smagorinsky possui pontos que justificam a sua utilização. Dentre eles podem-se citados:

- Modelo de fácil implementação computacional.
- Apesar da necessidade do ajuste de uma constante, o modelo ainda assim guarda um caráter mais universal com relação à modelagem da turbulência quando comparado com os modelos da família URANS (Unsteady Average Navier-Stokes Equations).
- O processo de transferência da energia cinética turbulenta entre as diferentes escalas é bem modelado para escoamentos completamente turbulentos.

O ajuste da constante C_s para cada tipo de programa e o fato de que a modelagem apresenta deficiência no cálculo da viscosidade junto às paredes apresenta-se como desvantagens para a modelagem de Smagorinsky. Apesar disto, esta modelagem é utilizada no presente trabalho.

3.5 Adimensionalização das Equações

A ascensão de uma bolha é governada por quatro parâmetros adimensionais, envolvendo as razões entre as massas específicas e viscosidades da fase contínua e da fase dispersa, isto é $\gamma = \rho_d/\rho_c$ e $\lambda = \mu_d/\mu_c$. Novamente, os subscritos “c” e “d” denotam as re-giões de fase contínua e de fase dispersa, respectivamente. Os outros dois parâmetros são definidos pela presença da aceleração da gravidade g , pelo diâmetro da bolha ou diâmetro da fase dispersa d_d , pelo coeficiente de tensão superficial $T[N/m]$, pela massa específica ρ_c e pela viscosidade do fluido μ_c . Assim, podem ser definidos

$$N = \frac{\rho_c^2 d_d^3 g}{\mu_c^2}, \quad (3.42)$$

$$Eo = \frac{\rho_c g d_d^2}{T}. \quad (3.43)$$

O primeiro número (3.42) é chamado de número de *Galileo* ou número de *Arquimedes*, o qual mede a importância relativa das forças de empuxo e das forças viscósas. O segundo é usualmente chamado de número de *Eötvös* e é a razão do empuxo pela tensão superficial. Na literatura de engenharia química, N é freqüentemente substituído pelo número de Morton,

$$M = \frac{g \mu_c^4}{\rho_c T^3} = \frac{Eo^3}{N^2}, \quad (3.44)$$

o qual é constante para um dado fluido se a aceleração gravitacional é constante.

Tais parâmetros adimensionais definem o comportamento da bolha. Assim, quando as bolhas são pequenas e a tensão superficial é alta, as bolhas permanecem esféricas e a dinâmica é independente da tensão superficial (ESMAEELI e TRYGGVASON, 1998), definindo um baixo número de Eötvös. Para baixos valores de Eo e N , as bolhas se mantêm esféricas. Para altos valores de N , elas se tornam elipsoidais. À medida que Eo aumenta, as bolhas eventualmente assumem a forma de “calotas esféricas”. Para N moderados, as bolhas apresentam um movimento na forma de um zigzag ou um caminho

helicoidal. Para altos valores de N , a ascenção de uma bolha é normalmente turbulenta. Para altos valores de Eo e N , as bolhas podem se deformar e até mesmo se fragmentar.

Um importante parâmetro a ser determinado consiste no número de Reynolds, o qual relaciona forças de inércia com forças viscosas. Em escoamentos multifásicos, só é possível determinar Re após o cálculo da velocidade terminal, ou seja, após determinar a velocidade para a qual a bolha apresenta aceleração nula ou se encontra em regime estacionário. Resultados experimentais apresentam o número de Reynolds para quando a bolha entra em regime. Por isso numericamente busca-se esse valor.

Para o cálculo da velocidade do centróide (centro de gravidade) das bolhas, apenas os pontos lagrangianos são utilizados a fim de se evitar oscilações devido ao processo de remalhagem da malha euleriana. Dessa forma a posição do centróide \mathbf{r}_b é dado em função da posição dos pontos lagrangianos \mathbf{X} e da área da bolha A_b . O método para o cálculo desse parâmetro é proposto por Bunner e Tryggvason (2002) e é dado por

$$A_b = \int_{A_b} dA = \frac{1}{2} \int_{A_b} \nabla \cdot \mathbf{X} dA = \frac{1}{2} \oint_{\Gamma} \mathbf{X} \cdot \mathbf{n} d\Gamma, \quad (3.45)$$

$$\mathbf{r}_b = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} \mathbf{X} dA = \frac{1}{2A_b} \int_{A_b} \nabla(\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}) dA = \frac{1}{2A_b} \int_{\Gamma} (\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}) \mathbf{n} d\Gamma. \quad (3.46)$$

A velocidade do centróide ou *velocidade terminal* da bolha, $\mathbf{v}_b = (u_b(s, t), v_b(s, t))$, pode ser obtida da mesma forma, dada por

$$\mathbf{v}_b = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} \mathbf{u}_{ib} dA = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} \nabla \cdot (\mathbf{X} \mathbf{u}_{ib}) dA = \frac{1}{A_b} \oint_{\Gamma} \mathbf{X} (\mathbf{u}_{ib} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma. \quad (3.47)$$

onde \mathbf{u}_{ib} é o vetor velocidade da interface.

O número de Reynolds é então definido por

$$Re = \frac{\rho_c d_d v_b}{\mu_c}. \quad (3.48)$$

Devido à tensão interfacial surge um salto de pressão entre as duas fases. Este salto de pressão pode ser calculado analiticamente para o caso de uma interface circular, o qual pode ser feito pela seguinte equação (WHITE, 1991):

$$p_d - p_c = \frac{2T}{d_d}. \quad (3.49)$$

Adimencionando a Eq. (3.49) e dividindo-a por $\rho_f g d_b$, tem-se

$$\frac{\Delta p}{\rho_c g d_d} = \frac{2T}{\rho_c g d_d^2}, \quad (3.50)$$

ou

$$\Delta p^* = \frac{2}{Eo}. \quad (3.51)$$

Esse tratamento analítico é também conhecido como a Lei de Young-Laplace. Esse resultado é utilizado como referência para os resultados numéricos com baixos valores de número de Eötvös.

Determinados os parâmetros adimensionais e sabendo-se que os escoamentos bifásicos gerados por gravidade não apresentam uma velocidade característica que possa ser a priori definida, as escalas de velocidade e tempo são então baseadas na gravidade e no diâmetro característico da bolha. Define-se então $U = \sqrt{d_d g}$ e $t = \sqrt{d_d/g}$. O diâmetro da bolha d_d , e as propriedades do fluido ρ_c e μ_c são também adotados como parâmetros característicos. A equação de movimento filtrada (Eq. 3.38) e adimensionalizada na forma tensorial é então dada por

$$\rho^* \left(\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + u_i^* \frac{\partial}{\partial x_i^*} u_j^* \right) = - \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left[\frac{1}{Re} (\mu^* + \mu_t^*) \left(\frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} + \frac{\partial u_j^*}{\partial x_i^*} \right) \right] + \frac{f_i^*}{Eo} + \rho^* g_i^*, \quad (3.52)$$

onde, $x_i^* = \frac{x_i}{d_d}$, $u_i^* = \frac{[u_i]}{U}$, $t^* = \frac{t}{d_d/U}$, $p^* = \frac{[p]}{\rho_c U^2}$, $g^* = \frac{g}{U^2/d_d}$, $f_i^* = \frac{[f_i]}{T/d_d^2}$, $\rho^* = \frac{\bar{\rho}}{\rho_c}$, $\mu_t^* = \frac{\mu_t}{\mu_c}$, e $\mu^* = \frac{\mu}{\mu_c}$.

Resumo do Modelo Matemático

As equações a serem resolvidas, descritas neste capítulo, são dadas na forma dimensional por

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = - \nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (3.53)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.54)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}) d\mathbf{x}, \quad (3.55)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \frac{\partial T}{\partial s} \mathbf{t} + T \parallel \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \parallel \kappa \mathbf{n}, \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x} + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t}, \quad (3.57)$$

e na forma adimensional por,

$$\rho^* \left(\frac{\partial u_i^*}{\partial t^*} + u_i^* \frac{\partial}{\partial x_i^*} u_j^* \right) = - \frac{\partial p^*}{\partial x_i^*} + \frac{\partial}{\partial x_j^*} \left[\frac{1}{Re} (\mu^* + \mu_t^*) \left(\frac{\partial u_i^*}{\partial x_j^*} + \frac{\partial u_j^*}{\partial x_i^*} \right) \right] + \frac{f_i^*}{Eo} + \rho^* g_i^*, \quad (3.58)$$

onde, $x_i^* = \frac{x_i}{d_d}$, $u_i^* = \frac{[u_i]}{U}$, $t^* = \frac{t}{d_d/U}$, $p^* = \frac{[p]}{\rho_c U^2}$, $g^* = \frac{g}{U^2/d_d}$, $f_i^* = \frac{[f_i]}{T/d_d^2}$, $\rho^* = \frac{\bar{\rho}}{\rho_c}$, $\mu_t^* = \frac{\mu_t}{\mu_c}$, e $\mu^* = \frac{\mu}{\mu_c}$.

As Equações (3.53)-(3.57) fornecem uma formulação mista lagrangiana-euleriana para escoamentos com a presença de interfaces fluido-fluido. As Eqs. (3.53) - (3.54) são as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis, às quais se incorporam os efeitos da presença das interfaces móveis. A presença da interface é modelada por intermédio da densidade de força, a qual atua somente ao longo da interface e é determinada pela tensão superficial existente entre os fluidos, no caso de haver apenas interface fluido-fluido.

As equações (3.55)-(3.57) descrevem a interação entre a fase contínua e a fase dispersa. Note que a função delta de Dirac permite mudar da formulação euleriana, fase contínua, para a formulação lagrangiana, fase dispersa. A Eq. (3.55) *espalha* as tensões superficiais da interface para o domínio euleriano. Por outro lado, a Eq. (3.57) *interpola* as velocidades do domínio euleriano para os pontos lagrangianos. As Eqs. (3.55) e (3.57) são denominadas espalhamento e interpolação respectivamente.

Capítulo 4

Metodologia Numérica

O enfoque deste capítulo é a discretização dos domínios euleriano e lagrangiano, bem como as discretizações espacial e temporal das equações de Navier-Stokes e as equações para o movimento da interface. A discretização numérica das equações de Navier-Stokes é feita numa malha euleriana, enquanto que as equações para o movimento da interface são discretizadas por uma malha lagrangiana móvel, independente da malha euleriana (Fig. 4.1). As duas malhas são tratadas separadamente e as informações são trocadas entre elas por meio de interpolações e espalhamento.

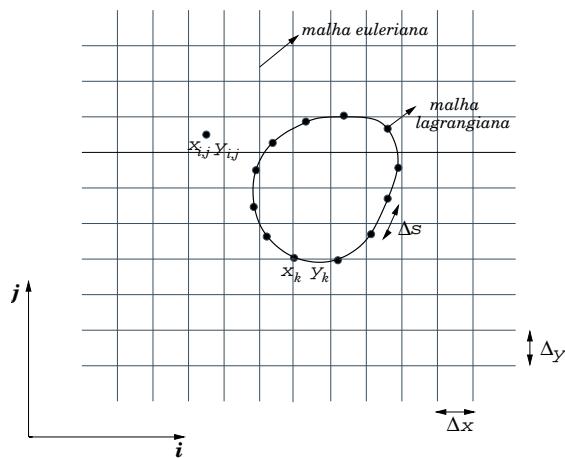


Figura 4.1: Representação esquemática da malha euleriana e da malha lagrangiana.

A solução das Eq. (3.10) e (3.11) é feita de forma segregada, o que leva à necessidade de tratar o acoplamento pressão-velocidade. Um método dos passos fracionados é

escolhido para tratar o acoplamento entre a pressão e a velocidade. Um método das diferenças finitas é utilizado aqui para a discretização espacial em malhas deslocadas. Quanto à discretização temporal, uma estratégia semi-implícita baseada no Método de Gear e no Método de Euler é adotada. Assim, as equações para as velocidades são discretizadas de forma semi-implícita. Os sistemas lineares gerados são resolvidos por intermédio do método multigrid-multilnível, o qual é detalhado no Capítulo 5. Tais discretizações ocorrem no domínio euleriano sendo apresentadas nas Seções 4.1, 4.2 e 4.3. A comunicação entre os domínios lagrangiano e euleriano é mostrada na forma discretizada na Seção 4.6.

As equações para o movimento da interface, bem como a discretização para o cálculo da força lagrangiana, são apresentadas na Seção 4.7. Por fim, a Seção 4.8 apresenta os critérios de estabilidade associados ao esquema numérico, necessários à escolha do passo de integração no tempo.

4.1 Discretização Temporal

Vários métodos numéricos têm sido propostos para resolver modelos dados por equações diferenciais parciais discretizadas no tempo e no espaço. Para este tipo de problema, métodos implícitos-explícitos (ou semi-implícitos) têm sido freqüentemente usados, especialmente em conjunto com métodos espectrais (KIM e LU, 2006). Em problemas de convecção-difusão, é comum verificar a aplicação de um método explícito para o termo advectivo e de um método implícito para o termo difusivo. Badalassi *et al.* (2003), utilizam o Método de Gear Modificado (*SBDF - Semi Backward Difference Formula*), também denominado Método de Gear Extrapolado para a discretização temporal. Neste método, a discretização é semi-implícita, sendo o termo difusivo tratado implicitamente e o termo advectivo tratado explicitamente.

Ascher *et al.* (1995) fazem uma análise sistemática da performance de esquemas temporais, dando particular atenção ao desempenho de tais esquemas quando usados simultaneamente com métodos multigrids e métodos espectrais, pois tais métodos asseguram uma forte amortização das altas freqüências do erro. Tal propriedade tem papel importante na dependência temporal dos métodos multigrid e espectral. Ascher *et al.* (1995) demonstram que para métodos multigrid os esquemas numéricos SBDF e MCNAB (*Modified Crank-Nicolson Adams-Bashforth*), requerem menos iterações por passo de tempo

que outros métodos semi-implícitos. Outra análise relevante do autor identifica qual é o método mais efetivo ao se utilizar diferenças finitas ou métodos espetrais. Para o caso de diferenças finitas, SBDF apresenta-se eficiente com largos passos de tempo a baixos Reynolds. Para Reynolds elevado, SBDF de terceira e quarta ordem são recomendados, assim como CNLF (Crank-Nicolson Leap-Frog). SBDF também é sugerido para métodos espetrais com Reynolds moderados sendo observada uma restrição severa ao CNLF.

Na estratégia semi-implícita, usa-se a estratégia a seguir válida para equações predominantemente difusivas, tais como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (\chi \nabla \phi), \quad \chi > 0. \quad (4.1)$$

A Eq. (4.1) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = C_\chi \nabla^2 \phi + f(\phi), \quad (4.2)$$

onde C_χ é uma constante no espaço e no tempo e

$$f(\phi) = \nabla \cdot (\chi \nabla \phi) - C_\chi \nabla^2 \phi. \quad (4.3)$$

Ao tratar na Eq. (4.2) o termo $C_\chi \nabla^2 \phi$ implicitamente e o termo $f(\phi)$ explicitamente, obtém-se uma discretização semi-implícita que pode ser facilmente solucionada. Pode-se verificar que a discretização por intermédio do Método de Euler é incondicionalmente estável se

$$C_\chi \geq \frac{1}{2} \max\{\chi\}. \quad (4.4)$$

Essa mesma idéia pode ser aplicada às equações de Navier-Stokes. Partindo-se do Método de Gear e para uma dada uma função ϕ , tem-se

$$\frac{\alpha_2 \phi^{n+1} + \alpha_1 \phi^n + \alpha_0 \phi^{n-1}}{\Delta t} = f(x^{n+1}, y^{n+1}), \quad (4.5)$$

onde o índice $n + 1$ define o passo de tempo atual e os índices $n - 1$ e n identificam os passos de tempo nos tempos precedentes.

Aplicando-se a idéia descrita na Eq. (4.2) e abrindo-se o termo advectivo, o termo forçante e o termo gravitacional explicitamente em dois passos de tempo precedentes (n e $n - 1$) e o termo difusivo no passo de tempo atual multiplicado por uma constante, tem-se

$$\frac{\alpha_2 \phi^{n+1} + \alpha_1 \phi^n + \alpha_0 \phi^{n-1}}{\Delta t} = \lambda \nabla^2 \phi^{n+1} + \beta_1 \mathbf{g}_1(\phi^n) + \beta_0 \mathbf{g}_0(\phi^{n-1}), \quad (4.6)$$

onde os índices 0, 1 e 2 são referentes aos tempos $n - 1$, n , $n + 1$, respectivamente. Os coeficientes α e β são dados por

$$\alpha_2 = \frac{\Delta t_0^2 + 2\Delta t_0\Delta t_1}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)}, \quad \Delta t_2 = \Delta t_1 + \Delta t_0, \quad (4.7)$$

$$\alpha_1 = -\frac{\Delta t_0^2 + 2\Delta t_0\Delta t_1 + \Delta t_1^2}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)}, \quad \beta_1 = \frac{\Delta t_2}{\Delta t_2 - \Delta t_1}, \quad (4.8)$$

$$\alpha_0 = \frac{\Delta t_1^2}{\Delta t_0(\Delta t_0 + \Delta t_1)}, \quad \beta_0 = -\frac{\Delta t_1}{\Delta t_2 - \Delta t_1}, \quad (4.9)$$

onde $\Delta t_1 = t^{n+1} - t^n$ e $\Delta t_0 = t^n - t^{n-1}$. Quando $\Delta t_1 = \Delta t_0$, ou seja quando o passo temporal é uniforme, obtém-se as seguintes constantes usualmente encontradas na literatura (GEAR, 1967, 1969, 1971) $\alpha_2 = \frac{3}{2}$, $\alpha_1 = -2$, $\alpha_0 = \frac{1}{2}$, $\beta_1 = 2$, e $\beta_0 = -1$.

Aplicando-se a mesma idéia da Eq. (4.6) em Eq. (3.10), tem-se a discretização temporal de segunda ordem para as equações de Navier-Stokes, tal que

$$\rho^n = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)\psi(\mathbf{X}(s, t))^n, \quad (4.10)$$

$$\mu_{ef}^{n+1} = \mu_t + \mu_c + (\mu_d - \mu_c)\psi(\mathbf{X}(s, t))^{n+1}, \quad (4.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\rho^n}{\Delta t}(\alpha_2\mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1\mathbf{u}^n + \alpha_0\mathbf{u}^{n-1}) &= \lambda\nabla^2\mathbf{u}^{n+1} + \beta_1\mathbf{g}_1(\mathbf{u}^n, \mu_{ef}^n) \\ &\quad + \beta_0\mathbf{g}_0(\mathbf{u}^{n-1}, \mu_{ef}^{n-1}) - \nabla p^{n+1} + \rho^n\mathbf{g}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (4.13)$$

onde

$$\mathbf{g} = -\lambda\nabla^2\mathbf{u} + \nabla \cdot [\mu_{ef}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)] - \mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (4.14)$$

$$\lambda = C_\lambda \parallel \mu_{ef} \parallel_\infty. \quad (4.15)$$

Dadas as condições iniciais para as velocidades e propriedades do fluido no primeiro passo de tempo, é necessário calcular esses valores para o segundo passo de tempo. Como Gear é um método de três passos no tempo, recorre-se ao Método de Euler para resolver as equações de Navier-Stokes no segundo passo de tempo. Para que isto seja possível, considera-se $\alpha_2 = 1$, $\alpha_1 = -1$, $\alpha_0 = 0$, $\beta_1 = 1$ e $\beta_0 = 0$. A partir do terceiro passo no tempo, o Método de Gear Extrapolado é aplicado normalmente. Para ambos os métodos no presente trabalho, adota-se $C_\lambda = 2$.

4.2 Acoplamento Pressão - Velocidade

A solução das Eqs. (3.10) e (3.11) é feita de forma segregada, o que leva à necessidade de tratar o acoplamento pressão-velocidade. Os métodos de projeção, ou métodos de passo fracionário, têm origem nas observações de Chorin (1968) sobre o papel da pressão em escoamentos incompressíveis. Chorin constata que a pressão não desempenha papel termodinâmico, mas força a condição de incompressibilidade, o que leva à uma discretização baseada na separação de operadores. Nessa estratégia, velocidade e pressão são determinadas em dois passos. No primeiro, um campo de velocidades auxiliar $\tilde{\mathbf{u}}$ é calculado com a equação de balanço da quantidade de movimento, desprezando-se a condição de incompressibilidade. No segundo, o campo de velocidades auxiliar $\tilde{\mathbf{u}}$ é projetado no espaço dos campos vetoriais com divergente nulo para calcular a pressão ou a correção de pressão. Esta possibilita a atualização do campo de velocidades. A projeção que define o segundo passo é fundamentada no teorema de Decomposição de Hodge. Assim, para uma região D no espaço com uma fronteira suave ∂D , qualquer campo vetorial \mathbf{w} em D pode ser decomposto de forma única em

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \nabla q, \quad (4.16)$$

onde \mathbf{u} tem divergente nulo e é paralelo à ∂D , isto é, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ em ∂D (CHORIN e MARSDEN, 1993). Há várias discretizações para o método de projeção, as quais diferem na forma de calcular o campo de velocidades auxiliar $\tilde{\mathbf{u}}$ e o passo de projeção. Adotamos uma estratégia semi-implícita proposta por Bell, Collela e Glaz (1989).

Num método dos passos fracionados, utilizam-se os campos de velocidade, pressão e força nos tempos precedentes para calcular uma estimativa para a velocidade no tempo atual, $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$. A Eq. (4.12) é reescrita com esse campo auxiliar $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$, ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\rho^n}{\Delta t}(\alpha_2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}) &= \lambda \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \beta_1 \mathbf{g}_1(\mathbf{u}^n, \mu_{ef}^n) \\ &\quad + \beta_0 \mathbf{g}_0(\mathbf{u}^{n-1}, \mu_{ef}^{n-1}) - \nabla p^n + \rho^n \mathbf{g}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

Subtraindo a Eq. (4.12) da Eq. (4.17), tem-se o campo de velocidade estimada $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}, \tilde{v})$ dado por

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^n}, \quad (4.18)$$

onde $q^{n+1} = p^{n+1} - p^n$ representa a correção de pressão. Substituindo (4.18) em (4.17),

encontra-se

$$\begin{aligned} \frac{\rho^{n+1}}{\Delta t}(\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}) &= \lambda \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} - \nabla q^{n+1} + \frac{\lambda \Delta t}{\alpha_2} \nabla^2 \left(\frac{1}{\rho^n} \nabla q^{n+1} \right) \\ &\quad + \beta_1 \mathbf{g}_1(\mathbf{u}^n, \mu_{ef}^n) + \beta_0 \mathbf{g}_0(\mathbf{u}^{n-1}, \mu_{ef}^{n-1}) \\ &\quad - \nabla p^n + \rho^n \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Subtraindo (4.19) de (4.12), tem-se

$$\nabla p^{n+1} = \nabla q^{n+1} + \nabla p^n - \nabla \left[\lambda \nabla \left(\frac{\Delta t}{\alpha_2 \rho^n} \nabla q^{n+1} \right) \right]. \quad (4.20)$$

Dessa forma, a solução da Eq. (4.20) garante segunda ordem para a pressão (BROWN *et al.*, 2001). Segundo este autor, se a massa específica é considerada constante a Eq. (4.20) se reduz a

$$p^{n+1} = q^{n+1} + p^n - \frac{\lambda \Delta t}{\alpha_2 \rho^n} \nabla^2 q^{n+1}. \quad (4.21)$$

No presente trabalho, como não se pretende resolver mais uma equação, a qual exigiria a solução de um sistema linear, para que se tenha segunda ordem de convergência para a pressão quando se tem massa específica variável, a atualização da pressão passa então a ser dada por

$$p^{n+1} = q^{n+1} + p^n. \quad (4.22)$$

Dessa forma no mínimo primeira ordem é assegurada para a pressão (BROWN *et al.*, 2001). A Eq. (4.21) não é considerada neste trabalho, pois a Eq. (4.22), apresentou maior estabilidade nos testes de convergência.

Para a solução da Eq. (4.12) falta ainda definir a equação para a correção da pressão q . Aplicando o operador divergente na Eq. (4.18), tem-se

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\alpha_2} \nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right]. \quad (4.23)$$

Considerando a condição de incompressibilidade ($\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$) e substituindo na Eq. (4.23), obtém-se a equação diferencial elíptica ou a equação para a correção da pressão, dada por

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}. \quad (4.24)$$

É importante destacar aqui que as condições de contorno empregadas para as velocidades devem ser periódicas ou condições de contorno de Dirichlet (BROWN *et al.*, 2001),

o qual impõe a condição de contorno física para o campo de velocidade estimada, ou seja,

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} |_{\delta\Omega} = \mathbf{u}^{n+1} |_{\delta\Omega}. \quad (4.25)$$

Se condições de contorno periódicas são usadas para as velocidades o mesmo tipo de condição deve ser aplicado à pressão e consequentemente ao cálculo da correção de pressão. O fato de se utilizar condições de contorno de Dirichlet (Eq. 4.25) para $\tilde{\mathbf{u}}$, implica no uso de condições de contorno do tipo Neumann homogêneo para a correção de pressão q . Isso decorre do fato de que a Eq. (4.18) é válida em todo domínio Ω . Logo a equação abaixo também é verdadeira.

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} |_{\delta\Omega} = \mathbf{u}^{n+1} |_{\delta\Omega} + \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^{n+1}} \Big|_{\delta\Omega}. \quad (4.26)$$

Sabendo que $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} |_{\delta\Omega} = \mathbf{u}^{n+1} |_{\delta\Omega}$, e substituindo na Eq. (4.26), tem-se

$$\nabla q^{n+1} |_{\partial\Omega} = 0, \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial q^{n+1}}{\partial n} \Big|_{\partial\Omega} = 0, \quad (4.28)$$

onde n é o vetor unitário normal à fronteira do domínio.

Deve-se observar que, na solução da equação diferencial elíptica (Eq. 4.24) com condições de contorno tipo Neumann homogêneo (Eq. 4.28), a condição de integrabilidade

$$\int_{\Omega} \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial q^{n+1}}{\partial n} ds = 0, \quad (4.29)$$

deve ser garantida (STRICKWERDA, 1989). A condição de integrabilidade acima afirma que a integral do lado direito da Eq. (4.24) deve ser nula, tal condição deve ser verificada numericamente a cada passo no tempo. Para tal, o seguinte procedimento é adotado:

- Calcular numericamente a integral do lado direito da Eq. (4.24), obtendo uma constante.
- Subtrair essa constante do termo direito, forçando que o seu valor seja nulo.

Se condições de contorno do tipo Dirichlet são utilizadas para a correção da pressão, Weinan e Liu (1995) afirmam que não somente a precisão da correção da pressão deteriora para ordem zero, como também as velocidades estimadas também se deterioraram para $\mathcal{O}(\Delta t^{1/2})$.

O método dos passos fracionados e o acoplamento entre os domínios lagragiano e euleriano pode ser resumido na seguinte seqüência de cálculo:

- Calcular a massa específica:

$$\rho^n = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)\psi(\mathbf{X}(s, t))^n,$$

- Estimar o campo de velocidade - Eq. (4.17);
- Com o campo de velocidade estimado, calcular a correção de pressão:

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1};$$

- Corrigir o campo de velocidades, utilizando-se:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^{n+1}};$$

- Corrigir o campo de pressão, utilizando-se:

$$p^{n+1} = p^n + q^{n+1};$$

- Calcular a viscosidade:

$$\mu_{ef}^{n+1} = \mu_t + \mu_c + (\mu_d - \mu_c)\psi(\mathbf{X}(s, t))^{n+1};$$

- Calcular a densidade de força euleriana:

$$\mathbf{F}^{n+1} = \frac{\partial T}{\partial s} \mathbf{t} + T \parallel \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \parallel \kappa \mathbf{n}; \quad (4.30)$$

- Realizar o espalhamento da força euleriana:

$$\mathbf{f} = \int \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}) d\mathbf{x};$$

- Realizar a interpolação das velocidades:

$$\mathbf{u} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x};$$

- Calcular a nova posição da interface:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x} + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t};$$

- Verificar a conservação da massa dentro da tolerância especificada;
- Avançar para o próximo passo no tempo.

4.3 Discretização do Domínio Espacial

O domínio computacional considerado no presente trabalho, a exemplo de outros autores, é o retângulo $[A_1, B_1] \times [A_2, B_2]$. Inicialmente este domínio é discretizado com uma malha regular com $M \times N$ células computacionais e espaçamentos $\Delta x = \frac{B_1 - A_1}{M}$ e $\Delta y = \frac{B_2 - A_2}{N}$ nas direções x e y , respectivamente.

Por definição, o centro de cada célula computacional é definido por

$$\mathbf{x}_{i,j} = (x_i, y_j) = [a_1 + (i - \frac{1}{2})\Delta x, a_2 + (j - \frac{1}{2})\Delta y], \quad (4.31)$$

para $1 \leq i \leq M$ e $1 \leq j \leq N$.

Para comportar as condições de contorno, emprega-se uma camada adicional de células ou mais ao redor de todo o domínio. Esse conjunto de células é denominado de células *fantasmas*, cujos centros são dados por $(x_0, y_j), (x_{M+1}, y_j)$, para $0 \leq j \leq N + 1$, $(x_i, y_0), (x_i, y_{N+1})$, para $0 \leq i \leq M + 1$. A Fig. 4.2 apresenta um domínio computacional retangular com uma camada de células fantasma.

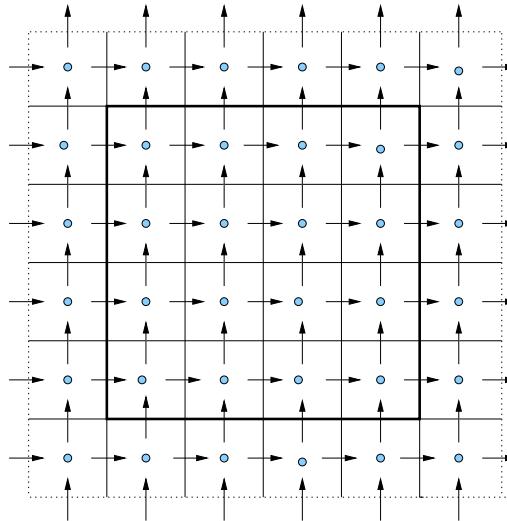


Figura 4.2: Esquema representativo de uma malha computacional retangular com uma camada de células fantasma (linhas pontilhadas) ao redor do domínio. As flechas indicam as posições das variáveis deslocadas i.e., u e v e os círculos as posições das variáveis centradas p , μ , ρ , g_y .

Uma vez que o domínio computacional com seu conjunto de células tenha sido estabelecido, falta decidir a locação das variáveis $\mathbf{u}, \mathbf{f}, p$ e as propriedades do fluido μ e

ρ . As células deslocadas do esquema MAC (*Marker and Cell*), introduzidas por Harlow e Welch (1965), são adotadas neste trabalho. Nesta discretização, as variáveis escalares (*e.g.*, pressão, divergente) são definidas para os centros das células e as variáveis vetoriais (*e.g.*, velocidades, termos forçantes, gradiente de pressão) tem suas componentes verticais definidas no meio das faces horizontais das células e as componentes horizontais definidas no meio das faces verticais das células (veja Fig. 4.3).

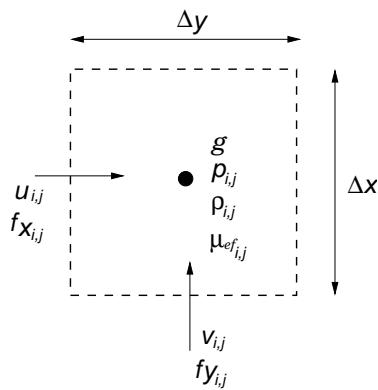


Figura 4.3: Localização das variáveis na célula de MAC.

A principal razão dessa escolha está no fato de que é possível definir convenientemente aproximações de segunda ordem para os operadores divergente e gradiente, de forma que a discretização da projeção apresente excelentes propriedades numéricas, permitindo uma fácil aplicação dos métodos multigrid na solução da equação de Poisson (ROMA, 1996).

No presente trabalho, as equações de Navier-Stokes e de movimento da interface são resolvidas em um domínio computacional bidimensional ($\Omega = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2]$), tanto em malhas cartesianas uniformes quanto em malhas cartesianas bloco-estruturada refinadas localmente. As últimas consistem em uma seqüência de malhas devidamente agrupadas e progressivamente refinadas nas regiões de interesse à uma razão de 2 ($r = 2$). Esta hierarquia de malhas é composta de níveis de refinamento gerados a partir de um nível base à um nível mais refinado, de forma que à medida que certas propriedades físicas de interesse do escoamento vão se alterando, as malhas tendem a acompanhar estas propriedades, definindo assim o caráter adaptativo.

Para as malhas pertencentes aos demais níveis de refinamento, o espaçamento é definido

por

$$\Delta x_{l+1} = \frac{\Delta x_l}{r}, \quad (4.32)$$

$$\Delta y_{l+1} = \frac{\Delta y_l}{r}, \quad (4.33)$$

onde l identifica os demais níveis hierárquicos que são progressivamente refinados e l_{base} representa o nível base, o qual é uma malha fixa que cobre todo o domínio, assim $l_{base} \leq l \leq l_{top}$.

4.3.1 Refinamento Local Adaptativo

Esta seção apresenta de forma detalhada o processo de geração das malhas bloco-estruturadas refinadas localmente ou, simplesmente, *malhas compostas*. A metodologia apresentada nas seções anteriores são extendidas sem qualquer restrição das malhas uniformes para as malhas refinadas localmente, tomando-se apenas o cuidado no processo de comunicação entre as malhas compostas, ou seja, no processo de geração das células fantasmas. Detalhes sobre este processo de formação das células fantasmas na malha composta são apresentados na Seção 4.4.

Em particular, a discretização de um domínio físico na malha uniforme Cartesiana (Ω) é substituída por uma hierarquia de malhas devidamente agrupadas com espaçamentos sucessivamente mais finos. Embora métodos de projeção para escoamentos incompressíveis têm sido desenvolvidos para malhas refinadas localmente que possuem um refinamento tanto no tempo como no espaço, no presente trabalho a solução numérica em todos os níveis é avançada ao mesmo tempo. Desse modo tanto a descrição do método adaptativo quanto sua implementação, são simplificadas. Como no método não-adaptativo, a malha lagrangiana no método adaptativo é livre para se mover pelo domínio físico, não sendo necessário coincidir com a malha euleriana. Em contraste, é necessário que a malha adaptativa envolva completamente a interface.

Desenvolvida inicialmente por Berger e Oliger (1984), a metodologia de malhas bloco-estruturadas refinadas localmente permite obter a solução de equações diferenciais parciais. Posteriormente esta aproximação se mostrou efetiva para a simulação de dinâmica de gases em duas dimensões (BERGER e COLLELA, 1989) e em três dimensões (BELL *et al.*, 1991). Howell e Bell (1997) aplicam o esse tipo de refinamento em escoamentos

incompressíveis recorrendo ao método de projeção de Bell, Collela e Glaz. Minion (1996), por sua vez aplica a metodologia de refinamento localizado considerando um método de projeção adaptativo para equações de Euler em um escoamento incompressível bidimensional utilizando a projeção MAC para assegurar uma restrição de segunda ordem do divergente. Escoamentos bidimensionais com densidade variável são apresentados por Almgren *et al.* (1993), os quais não incorporam o método de projeção MAC mas sim uma formulação onde o termo advectivo é tratado de forma não conservativa. Roma (1996) estende a metodologia de refinamento adaptativo para escoamentos ao redor de geometrias complexas, onde o problema é tratado empregando o Método da Fronteira Imersa.

Pelo fato das equações diferenciais parciais serem freqüentemente suaves sobre grande parte do domínio, mas contendo camadas limites ou regiões internas isoladas que apresentam elevados gradientes, shoques ou descontinuidades onde a solução é geralmente difícil de ser obtida, o refinamento local adaptativo se apresenta como uma alternativa eficiente e robusta capaz de captar fenômenos locais sem elevado custo computacional. Dinamicamente, malhas mais finas são então aplicadas na região de interesse, tendo como base uma malha grossa que cobre todo o domínio. Assim, a solução em cada malha pode então ser aproximada por diferenças finitas como feita na malha uniforme. Por se tratar de equações dependentes do tempo, as regiões de interesse variam com o tempo. Desta forma as malhas precisam se adaptar ao longo do tempo à região de interesse. Essa técnica denominada de adaptatividade ou dinamicidade é aqui implementada e realizada a medida que a interface se move ou são geradas novas regiões de alta vorticidade e/ou turbulência. A Fig. 4.4 apresenta de forma esquemática uma malha composta com três níveis de refinamento, onde Ω_1 é a malha base que cobre todo o domínio. As regiões Ω^2 e Ω^3 referem aos outros níveis de refinamento.

4.3.2 Geração de Malhas

Malhas adaptativas refinadas localmente são dadas pela união de blocos de malhas retangulares orientadas com espaçamentos seqüencialmente menores. Cada uma dessas malhas estão alinhadas com os eixos de coordenadas e são formadas basicamente por pontos onde o erro da solução da malha mais grossa é elevado devido a fenômenos localizados (e.g. alta turbulência, alta vorticidade, presença da interface).

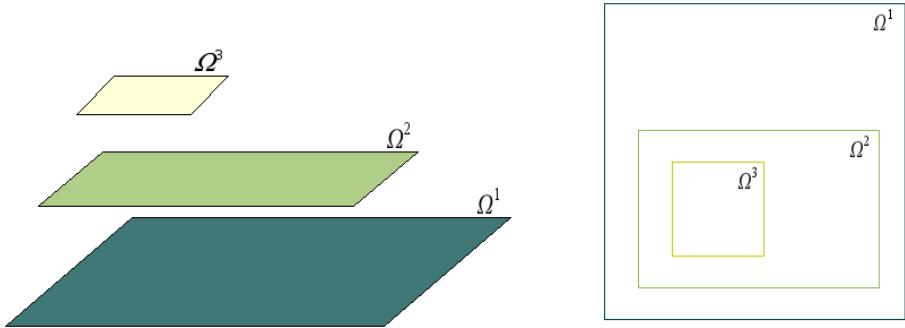


Figura 4.4: Exemplo de malha composta com três níveis de refinamento.

Antes de descrever o processo de seleção de pontos, é necessário definir algumas propriedades da malha composta que devem ser obedecidas a fim de permitir que a discretização e a solução do problema sejam não somente possível, mas também simples e eficiente. Tem-se que as malhas compostas são definidas por uma seqüência hierárquica de malhas agrupadas, progressivamente refinadas as quais formam níveis que vão de $l = l_{base} + 1, \dots, l_{top}$, onde l_{top} define o nível mais fino. Se $G_{l,k}$, $k = 1, 2, \dots, n_l$, é o conjunto de malhas retangulares com um mesmo espaçamento $(\Delta x, \Delta y)$, no qual os seus lados são orientados de acordo com os eixos de coordenadas, então o nível l é definido por

$$\{nível l\} = \bigcup_k G_{l,k}, \quad (4.34)$$

onde $G_{l,j} \cap G_{l,k} = \emptyset$, $j \neq k$, isto é, que duas malhas diferentes não se sobreponem. O espaçamento da malha em um dado nível não é arbitrário embora o espaçamento para o nível $l+1$ deve ser menor que o nível l , diferenciados por um fator inteiro $r > 1$, ou seja, $\Delta x_{l+1} = \frac{\Delta x_l}{r}$. Escolhas típicas para essa razão de refinamento são geralmente 2 ou 4. Como na malha uniforme, os centros das células nas malhas Cartesianas em um dado nível l são os pontos $\mathbf{x}_{i,j} = (A_1 + (i + \frac{1}{2})\Delta x_l, A_2 + (j + \frac{1}{2})\Delta y_l)$, entretanto é importante notar que somente no nível $l_{base} = 1$ o domínio é *completamente* recoberto por um conjunto de malhas ou blocos retangulares.

A Fig. 4.5 apresenta uma seqüência de malhas refinadas localmente à uma razão igual a 2. A malha é composta de três níveis de refinamento, onde o nível base G_1 (l_{base}) cobre todo o domínio. O segundo nível é formado por outras duas malhas - $G_{2,1}$ e $G_{2,2}$, e por fim um terceiro nível com outras duas malhas irmãs definidas por $G_{3,1}$ e $G_{3,2}$.

As malhas para diferentes níveis em uma hierarquia precisam estar “corretamente

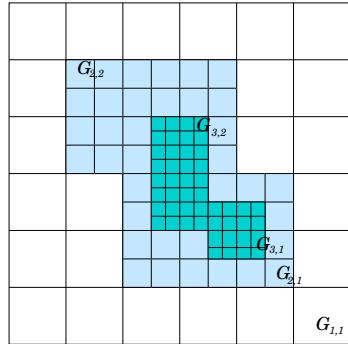


Figura 4.5: Malha composta corretamente agrupada.

agrupadas”, isto significa que as duas propriedades abaixo precisam ser satisfeitas:

1. Os cantos de uma malha mais fina coincidem com os cantos das células pertencentes a um nível imediatamente abaixo.
2. Malhas mais finas devem estar no interior da união das malhas do nível abaixo, exceto quando tocam as bordas do nível físico.

A Fig. 4.6 exemplifica duas malhas compostas ditas “não corretamente agrupadas”. Em cada um dos casos somente uma propriedade é violada. Para o primeiro caso (à esquerda), as extremidades das malhas do nível mais fino não tocam as extremidades das células do nível imediatamente abaixo. No segundo caso (à direita), o agrupamento é dito não apropriado pois as células pertencentes ao terceiro nível estão diretamente adjacentes às células pertencentes ao segundo nível. Vale observar que estas propriedades não estão restritas a apenas uma malha, ou seja, todas as malha em qualquer nível devem obedecer tais propriedades. A Fig. 4.5 apresenta um conjunto de malhas onde todas são consideradas corretamente agrupadas.

Para assegurar a propriedade 2, camadas de células devem ser adicionadas ao redor de cada malha. Desta forma é garantido que descontinuidades ou regiões com erros elevados não se propaguem da malha mais fina para uma mais grossa até que uma remalhagem seja requerida. Em muitos casos tem-se observado a aplicação dessas camadas com duas células. Para os casos em que há a presença da interface este número é bem maior, pois quanto menos remalhagem houver durante o processo de simulação, menos erros são inseridos na solução.

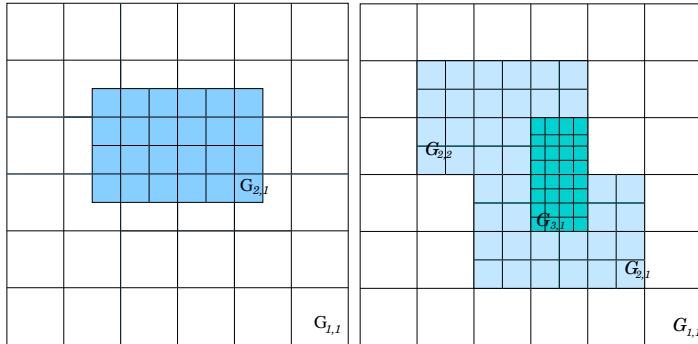


Figura 4.6: Malhas não corretamente agrupadas: propriedade 1 é violada (esquerda) e propriedade 2 é violada (direita).

No início do processo computacional, somente a malha base e o número máximo de níveis são especificados pelo usuário. O número de níveis passa então a ser limitado somente pela memória do computador que está sendo usado. Cada malha é armazenada independentemente das outras malhas, contendo seu próprio vetor de soluções. A malha base l_{base} sempre tem o número de células em cada dimensão igual a potência de 2 para facilitar a solução das equações para a velocidade e correção de pressão pelo Método Multigrid-Multinível.

O processo de geração de malhas consiste de passos básicos sendo que, para cada nível existente, o mesmo procedimento é aplicado para gerar o próximo nível:

1. selecionar os pontos onde o refinamento se faz necessário,
2. agrupar os pontos selecionados,
3. gerar as malhas para cada agrupamento,
4. avaliar a eficiência, repetir o processo caso a eficiência não seja atingida.

4.3.2.1 Seleção de pontos

Grande parte do sucesso do algoritmo de refinamento adaptativo consiste na geração eficiente de suas malhas, a qual é realizada a partir um processo inicial de seleção de pontos. Vários critérios para a seleção de pontos têm sido propostos. Berger e Oliger (1984), utilizam a extrapolação de Richardson para estimar o erro local da solução e selecionar os pontos onde o refinamento se faz necessário. Roma (1996), em contraste

com essa abordagem, e conhecendo o fato de que o gradiente da velocidade do fluido perto da interface é elevado, utiliza esse parâmetro para a seleção de pontos.

No presente trabalho, as células são selecionadas utilizando-se a vorticidade e a posição da interface (função indicadora), este último é válido somente para os casos de escoamentos com a presença da interface. Conhecendo-se a vorticidade em cada célula ($\omega_{i,j}$), as células são selecionadas quando

$$\frac{|\omega_{i,j}|}{|\omega|_{max}} \geq \varepsilon, \quad (4.35)$$

onde $|\omega|_{max}$ é a norma do máximo da vorticidade.

Sabendo que a função indicadora varia de 0 a 1, os pontos selecionados com a presença da interface são definidos por:

$$\begin{aligned} \psi_{med} &= \frac{0+1}{2}, \\ \varepsilon_1 &= \psi_{med} - \varepsilon\psi_{med}, \\ \varepsilon_2 &= \psi_{med} + \varepsilon\psi_{med}, \\ \varepsilon_1 \leq \psi_{i,j} &\leq \varepsilon_2, \end{aligned} \quad (4.36)$$

onde ε_1 é a tolerância mínima e ε_2 é a tolerância máxima. O valor de ε adotado para a presença da interface é igual a 99%. Assim todos os pontos próximos a interface são selecionados, tanto internamente quanto externamente.

Os níveis de refinamento em uma malha composta são gerados um de cada vez para um dado passo no tempo, inicializando pelo nível mais fino l_{top} e finalizando com o nível l_{base+1} . Os níveis de refinamento são gerados nesta ordem, em particular, porque desta forma é fácil assegurar que todas as malhas estejam corretamente aninhadas.

Geralmente um nível l é gerado pela seleção de células no nível $l-1$, garantindo que os cantos das células do nível $l+1$ coincidam com os cantos das células do nível l . No entanto, a propriedade 2 ainda pode estar sendo violada. Esta situação pode ser facilmente corrigida incluindo no conjunto de células selecionadas, todas as células do nível $l-1$ que intersectam o nível $l+1$ extendido em uma célula do nível l . De forma simplificada o algoritmo se reduz a: selecionar as células no nível $l-1$; conhecendo-se as propriedades, gerar o nível l com o nível $l+1$ previamente definido. Este processo é recursivo até o nível l_{base+1} . Se já existem vários níveis formados, a seleção de pontos é novamente avaliada em todos os níveis e o processo de geração de malhas é aplicado em cada nível a partir no nível mais fino para o nível mais grosso.

4.3.2.2 Agrupamento de Pontos

Como mencionado anteriormente, os níveis de refinamento da malha composta são gerados um de cada vez, inicializando pelo nível mais fino l_{top} e finalizando com o nível l_{base+1} . Após selecionar as células, as malhas as quais pertencerão a um dado nível l são geradas através da aplicação de um algoritmo de agrupamento desenvolvido por Berger e Rigoutsos (1991). Tal algoritmo tem como finalidade agrupar pontos de forma que uma larga região seja incluída em várias malhas, definindo melhor a região de interesse. A Fig. 4.7 ilustra esta situação. Se uma larga região for fixada em somente uma malha (representada por linhas tracejadas), uma grande área não aceitável de refinamento será definida, tornando o método dispendioso. Com a subdivisão das malhas somente a região de interesse é refinada.

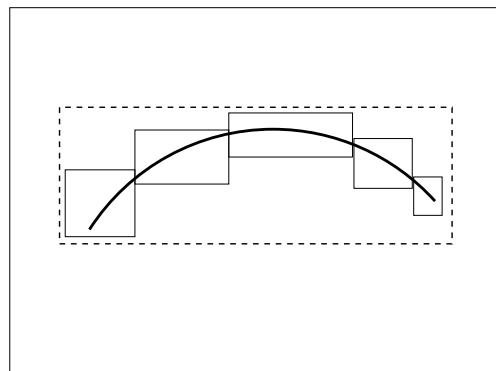


Figura 4.7: Agrupamento ao redor de uma interface.

Combinando elementos de visão computacional e teoria de reconhecimento de padrões, dado um conjunto de células selecionadas o algoritmo de Berger e Rigoutsos (1991) retorna um conjunto de blocos retangulares que não se sobrepõem, onde cada bloco satisfaz um dado critério de eficiência. Em termos gerais, este algoritmo detecta a transição entre uma região selecionada e uma região com células não selecionadas, detectando o melhor lugar para se aplicar a divisão das malhas.

Cria-se então o menor retângulo que contém os pontos selecionados ao redor das células que foram selecionadas (casco convexo retangular alinhado ao eixo cartesiano). Recorrendo-se a *técnica de assinatura* determina-se uma lista de pontos nas direções horizontal e vertical, onde uma matriz A de $M \times N$ pontos contém somente as entradas 0 e 1 (zero para os pontos não selecionados e 1 para os pontos selecionados). Assim, define-se

as seguintes equações para a direção horizontal Σ_i e vertical Σ_j ,

$$\Sigma_i = \sum_{i=1}^M A(i, j), \quad (4.37)$$

$$\Sigma_j = \sum_{j=1}^N A(i, j), \quad (4.38)$$

as quais determinam o número de entradas não-zero em uma linha ou coluna específica.

Baseando-se nesta idéia, a região mais proeminente de ocorrer a ruptura do retângulo será aquela que for responsável pelo ponto de inflexão na lista de *assinaturas*. De forma mais precisa, pode-se dizer que a região de transição é onde a segunda derivada da função assinatura apresenta um valor igual a zero. A segunda derivada é aproximada por

$$\Delta_i = \Sigma_{i+1} - 2\Sigma_i + \Sigma_{i-1}, \quad (4.39)$$

$$\Delta_j = \Sigma_{j+1} - 2\Sigma_j + \Sigma_{j-1}. \quad (4.40)$$

O ponto de inflexão é então determinado onde Δ muda de sinal ou atinge o valor de zero, dado pela equação

$$Z_{i+\frac{1}{2}} = \Delta_{i+1} - \Delta_i, \quad (4.41)$$

$$Z_{j+\frac{1}{2}} = \Delta_{j+1} - \Delta_j. \quad (4.42)$$

Este processo é recursivo e continua até que alguns critérios sejam satisfeitos, tais como:

- Uma eficiência mínima deve ser atingida, a qual é dada pela razão entre o número de células selecionadas e o número total de células na malha.
- Posteiros partições possam produzir pequenos retângulos.

A Figura 4.8 representa um exemplo de agrupamento, com os seguintes passos:

1. Pontos selecionados (indicados em negrito).
2. Um retângulo é criado ao redor de todos os pontos, e os valores das listas de assinatura nas direções horizontais e verticais são determinados (Eqs. (4.37) e (4.38)).
3. A segunda derivada é calculada. Para a região onde a lista de assinatura obteve valores iguais a zero determina-se o primeiro bloco (R_1). Para as regiões onde a segunda derivada muda de sinal determina-se o ponto de inflexão.

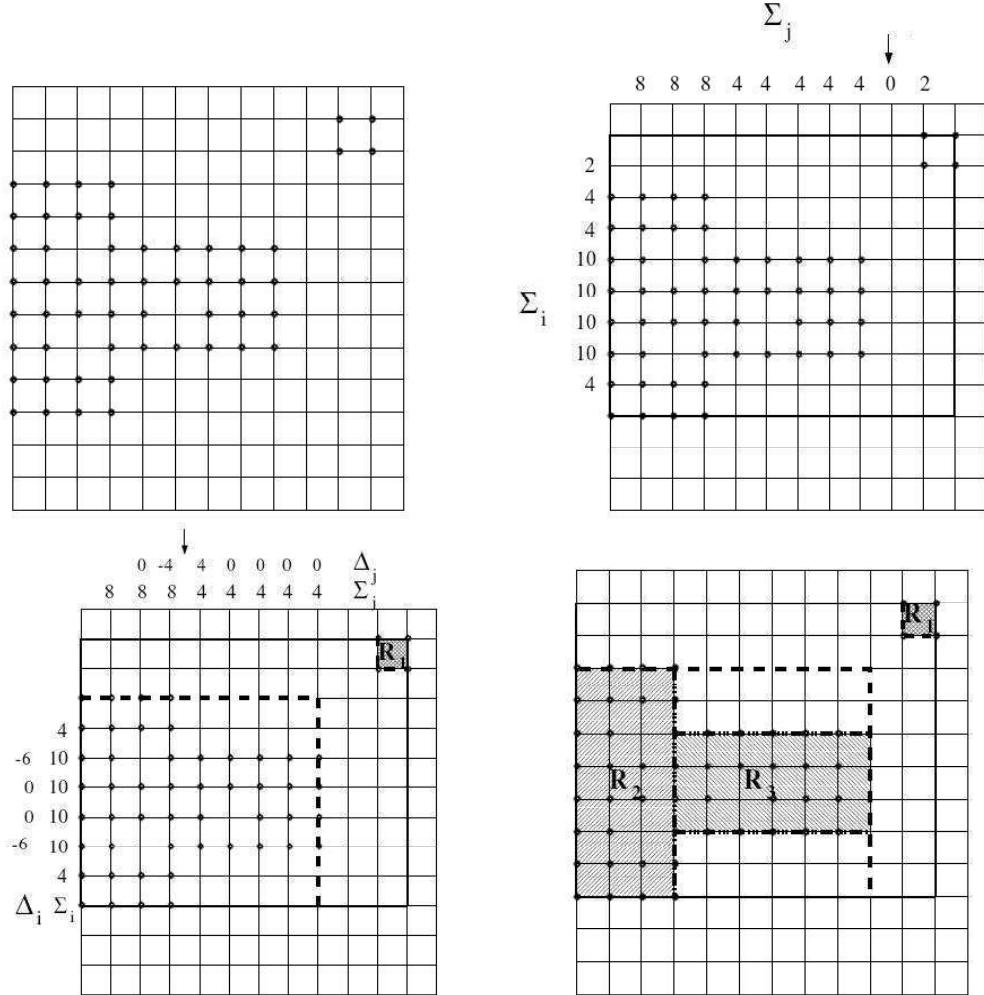


Figura 4.8: Exemplo de um processo de agrupamento com o cálculo utilizando a técnica de assinatura.

4. Defini-se os blocos R_2 e R_3 nos pontos de inflexão.

Neste exemplo, três blocos são criados: R_1 , R_2 e R_3 . Para R_1 , o algoritmo irá parar porque suas dimensões são mínimas. Para R_2 e R_3 , irá parar porque atinge uma boa eficiência ($\frac{22}{24}$ para R_2 e $\frac{27}{28}$ para R_3).

De forma resumida o processo de geração de malhas é definido nos seguintes passos:

- Selecionar cada célula do nível l correspondente ao nível $l - 1$. Isto mantém as malhas corretamente agrupadas, garantindo que as malhas finas estejam inseridas nas malhas grossas e que seus cantos coincidam.
- Adicionar uma região de segurança ao redor das células selecionadas. Esta região

garante que as descontinuidades não se propaguem para outras regiões até que a remalhagem seja acionada.

- Agrupar as malhas. Este procedimento permite definir de forma mais precisa o refinamento ao redor da região de interesse.
- Assegurar que as malhas estejam corretamente agrupadas. As novas malhas devem ser checadas para garantir que estejam corretamente agrupadas. Se isto não ocorre, o processo deve ser repetido até que os parâmetros de tolerância sejam atingidos.

4.3.3 Adaptatividade

Por se tratar de escoamentos transientes, fenômenos específicos tendem a se movimentar durante o cálculo computacional. Na tentativa de acompanhar tais fenômenos, o refinamento aqui aplicado passa a ser adaptativo ou dinâmico, no qual a malha base permanece fixa e as outras malhas acompanham o desenvolvimento do fenômeno em estudo ou o deslocamento e deformação da interface.

O processo de remalhagem aqui descrito se diferencia de outros métodos que adaptam a malha, movendo suas linhas dentro de uma dada região (Fig. 4.9). Tais métodos frequentemente apresentam dificuldades para manter a suavidade da malha. Assim, funções de penalidade são adicionadas reduzindo a simplicidade destes métodos. Por outro lado, o refinamento local adaptativo permite a adição ou a remoção de pontos quando se faz necessário recorrendo apenas a interpolações lineares para o transporte da solução entre as diferentes configurações de malhas.

Quando a solução avança no tempo, o algoritmo de remalhagem é chamado a cada ζ passos no tempo, para redefinir as malhas do nível l_{base+1} a l_{top} . Caso haja algum novo ponto a ser selecionado o algoritmo de geração de malhas é chamado e as novas malhas são criadas. Os dados desta nova malha são inicialmente interpolados da malha base e posteriormente cobertos pelos dados da malha composta antiga, somente nas regiões que apresentam intersecção. Este procedimento é feito nível por nível. Após a substituição a malha composta antiga é deletada e a solução é avançada no tempo. Para quando há a presença da interface um tratamento diferenciado deve ser aplicado para identificar quando deverá ocorrer a remalhagem, pois a medida que a interface se move, as células para o suporte da função Delta de Dirac devem continuamente pertencer ao nível mais

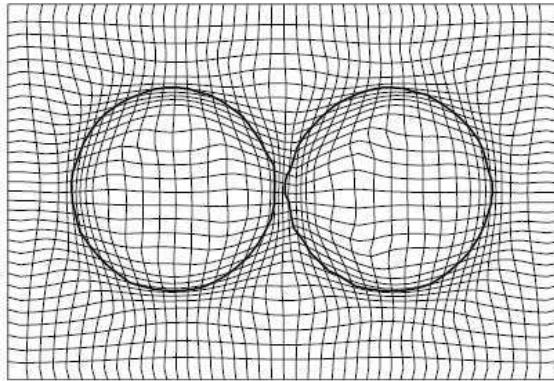


Figura 4.9: Processo de remalhagem - as linhas são movidas dentro de uma dada região (HAN *et al.*, 2003).

fino ao longo de todo o processo. Mais detalhes sobre o tratamento de remalhagem para a presença da interface e a estrutura de dados utilizada são apresentados nos Apêndice A e B, respectivamente.

4.4 Células Fantasmas

Por razões computacionais, é conveniente adicionar uma camada de células ao redor de cada malha gerada para todos os níveis, inclusive no nível base l_{base} . As células fantasmas permitem armazenar os valores para as condições de contorno, essas células são definidas de forma a evitar que os operadores diferenciais sejam redefinidos nas bordas das malhas. Em outras palavras, o mesmo estêncil usado no interior das células de uma malha pode também ser usado nas células pertencentes as bordas das malhas. O número de células fantasmas considerado depende do tamanho do estêncil, ou seja, se a discretização é de segunda ordem o estêncil para a discretização do laplaciano é de cinco células, o que gera a necessidade de uma camada de célula fantasma ao redor de cada malha.

As condições de contorno para as células fantasmas podem ser fornecidas de três diferentes formas, dependendo do “tipo” de célula fantasma que está sendo considerada. Na primeira forma, um procedimento de interpolação envolvendo valores da malha grossa e da malha fina são empregados para determinar os valores de células fantasmas que não pertencem a nenhuma outra malha do mesmo nível. Na segunda forma, células fantasmas pertencentes a uma malha irmã tem seu valores determinados através de “importações” dos

valores já previamente determinados na malha irmã, esse processo é conhecido como injeção. Finalmente, a terceira forma consiste em substituir os valores das células fantasmas que tocam o domínio por valores reais das condições de contorno. Estes procedimentos permitem evitar erros excessivos que advém dos processos de interpolação entre as interfaces fina/grossa ao longo do tempo.

Na prática, é mais fácil e mais eficiente simplesmente determinar os valores das células fantasmas por meio de interpolações e posteriormente sobrescrever esses valores para as células fantasmas que pertencem a malhas irmãs, finalizando com o preenchimento das condições reais de contorno. As células adjacentes ao nível base são determinadas apenas pelo cálculo das condições reais de contorno. No presente trabalho, somente uma camada de célula fantasma ao redor de cada de malha está sendo empregada.

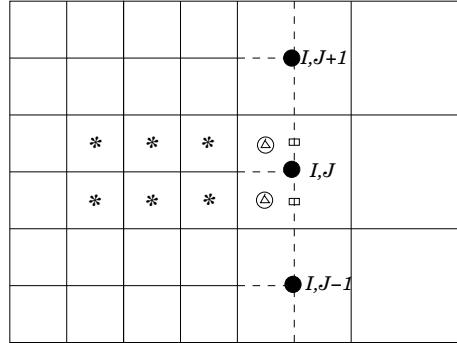
4.4.1 Células Fantasmas para Variáveis Centradas

Para determinar os valores para as células fantasmas com variáveis centradas, polinômios quadráticos são escolhidos para o processo de interpolação entre a interface fina/grossa. Minion (1996) discorre sobre o fato da dimensão da interface entre dois níveis de referência ser menor do que a dimensão do domínio é suficiente trabalhar com polinômios quadráticos ao longo e através da interface para obter segunda ordem de precisão global para a equação de Poisson.

A Fig. 4.10 mostra esquematicamente o processo de interpolação entre a interface fina/grossa para uma variável centrada (e.g. pressão). Observa-se que o valor da célula fantasma para a malha fina (\bigcirc) é dado pela extrapolação das células pertencentes ao nível mais fino (*), seguidas pela interpolação entre as células do nível grosso (\bullet). O resultado final surge após uma interpolação entre o valor extrapolado (\triangle), o valor da célula fina (*) e o valor interpolado da grossa (\square). No presente trabalho, os mesmos polinômios usados por Roma (1996) são também aqui aplicados.

4.4.2 Células Fantasmas para Variáveis Deslocadas

O preenchimento das células fantasmas considerando variáveis deslocadas (e.g velocidades) é similar ao procedimento adotado para variáveis centradas, ou seja, interpolações seguidas de injeção e recobrimento com as condições reais de contorno. A principal dife-



* valor na malha fina, • valor na malha grossa, \triangle valor extrapolado da malha fina,
 \square valor interpolado da malha grossa, \bigcirc valor final da célula fantasma.

Figura 4.10: Estêncil de interpolação usado para o cálculo da célula fantasma de uma variável centrada.

rença é a malha computacional envolvida.

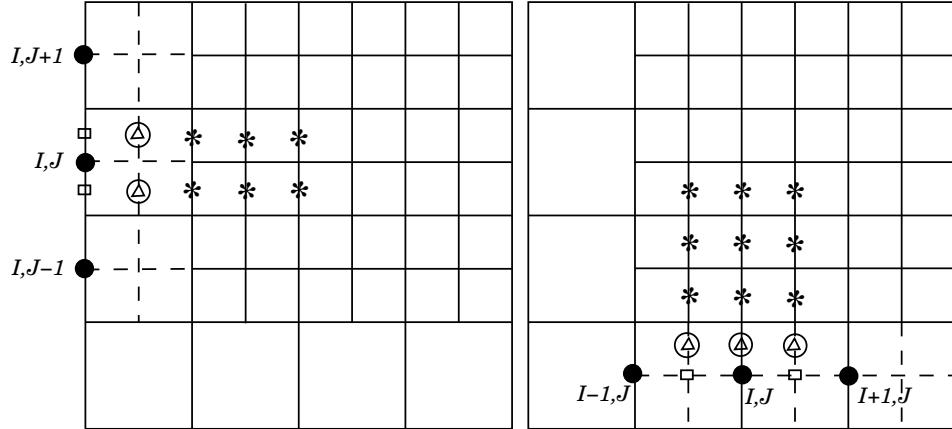
Se células de MAC são usadas, não se pode empregar para as componentes da velocidade os mesmos interpoladores usados na variáveis centradas, pois há diferença na forma de se tratar as bordas leste e oeste das bordas norte e sul, os quais geram coeficientes polinomiais distintos.

A Fig. 4.11 mostra o estêncil usado para a componente u da velocidade na borda oeste (esquerda) e borda sul (direita) de uma malha composta. Para estes casos, o valor da célula fantasma (\bigcirc) é obtido em termos dos valores das malhas grossa e fina que utilizam polinôminos quadráticos conforme apresentados por Roma (1996).

Os mesmos argumentos usados para células fantasmas com variáveis centradas são usados aqui, ou seja todas as interpolações usadas na interface fina/grossa são quadráticas e segunda ordem de precisão é assegurada para o termo viscoso nas equações de Navier-Stokes. A componente v da velocidade se comporta da mesma forma, onde os estêncils de interpolação sofrem uma rotação de 90 graus.

4.5 Discretização Espacial das Equações de Navier - Stokes

Como citado anteriormente, devido a presença de células fantasmas, os operadores diferenciais não precisam ser redefinidos nas interfaces fina/grossa. Assim, as discretizações



* valor na malha fina, ● valor na malha grossa, \triangle valor extrapolado da malha fina,
 \square valor interpolado da malha grossa, ○ valor final da célula fantasma.

Figura 4.11: Estêncil de interpolação usado para o cálculo da célula fantasma de uma variável de deslocada na borda oeste (esquerda) e borda sul (direita).

espaciais podem ser tratadas igualmente, tanto na malha uniforme quanto na malha composta. A seguir é apresentada a discretização espacial para as equações de Navier-Stokes. A discretização do termo temporal é também aqui apresentada, permitindo uma melhor compreensão da metodologia adotada.

Para a discretização espacial das equações do movimento no domínio euleriano é utilizado um esquema de segunda ordem - método das diferenças finitas centradas, em malhas deslocadas. Segue abaixo as equações de Navier-Stokes discretizadas para a componente x de cada um dos termos da equação de Navier-Stokes.

- Equação da continuidade:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0, \\ \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} &\cong 0. \end{aligned} \tag{4.43}$$

- Termo temporal:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t},$$

1. Euler

$$\frac{\rho_{i,j}^n + \rho_{i-1,j}^n}{2} \frac{\tilde{u}_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t}, \quad (4.44)$$

2. Gear Modificado

$$\frac{\rho_{i,j}^n + \rho_{i-1,j}^n}{2} \frac{\alpha_2 \tilde{u}_{i,j}^{n+1} + \alpha_1 u_{i,j}^n + \alpha_0 u_{i,j}^{n-1}}{\Delta t}. \quad (4.45)$$

- Termo advectivo:

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}), \\ & \rho \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} \right), \\ & \frac{\rho_{i,j}^n + \rho_{i-1,j}^n}{2} \left[u_{i,j} \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \right) + \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y} \right) \right. \\ & \left. \left(\frac{v_{i,j+1} + v_{i-1,j+1} + v_{i,j} + v_{i-1,j}}{4} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.46)$$

- Termo difusivo:

$$\begin{aligned} & \nabla \cdot [\mu_{ef} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)], \\ & \mu_{ef} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \mu_{ef} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial \mu_{ef}}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial \mu_{ef}}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \\ & \frac{\mu_{ef_{i,j}} + \mu_{ef_{i-1,j}}}{2} \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) + \\ & \frac{\mu_{ef_{i,j}} + \mu_{ef_{i-1,j}}}{2} \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta x \Delta y} - \frac{v_{i-1,j+1} - v_{i-1,j}}{\Delta x \Delta y} \right) + \\ & 2 \left(\frac{\mu_{ef_{i,j}} - \mu_{ef_{i-1,j}}}{\Delta x} \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \right) + \left(\frac{\mu_{ef_{i,j+1}} - \mu_{ef_{i,j-1}}}{4\Delta y} + \frac{\mu_{ef_{i-1,j+1}} - \mu_{ef_{i-1,j-1}}}{4\Delta y} \right) \\ & \left[\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta y} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i-1,j+1}}{2\Delta x} + \frac{v_{i,j} - v_{i-1,j}}{2\Delta x} \right]. \end{aligned} \quad (4.47)$$

- Termo fonte de força:

$$\mathbf{f},$$

$$f_x = f_{x_{i,j}}. \quad (4.48)$$

- Gradiente de pressão:

$$\begin{aligned} & \nabla p, \\ & \frac{\partial p}{\partial x}, \\ & \frac{p_{i,j}^n - p_{i-1,j}^n}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Vale destacar que os índices temporais não são aqui apresentados para os termos difusivo, advectivo e fonte de força pois, conforme às Eqs. (4.12) - (4.15), tais termos são discretizados no tempo n e $n - 1$. O termo de gradiente de pressão é discretizado apenas no tempo n e a presença do termo gravitacional ocorre somente na direção y onde g_y é a aceleração gravitacional na direção y , a qual é uma constante.

4.5.1 Discretização das Equações para o Cálculo das Estimativas das Velocidades

Com os termos da equação de Navier-Stokes discretizados pode-se representar a discretização das velocidades estimadas por

$$\begin{aligned} \frac{\rho^n}{\Delta t}(\alpha_2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}) &= \lambda \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} + \beta_1 g_1(\mathbf{u}^n, \mu_{ef}^n) \\ &\quad + \beta_0 g_0(\mathbf{u}^{n-1}, \mu_{ef}^{n-1}) - \nabla p^n + \rho^n \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Agrupando os termos das velocidades estimadas que estão no tempo $n + 1$

$$\begin{aligned} \frac{\rho^n}{\Delta t} \alpha_2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \lambda \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} &= \beta_1 g_1(\mathbf{u}^n, \mu_{ef}^n) + \beta_0 g_0(\mathbf{u}^{n-1}, \mu_{ef}^{n-1}) - \nabla p^n + \rho^n \mathbf{g} \\ &\quad - \frac{\rho^n}{\Delta t} \alpha_1 \mathbf{u}^n - \frac{\rho^n}{\Delta t} \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}, \end{aligned}$$

e definindo o lado direito desta equação por Ψ , tal que

$$\begin{aligned} \Psi &= \beta_1 g_1(\mathbf{u}^n, \mu_{ef}^n) + \beta_0 g_0(\mathbf{u}^{n-1}, \mu_{ef}^{n-1}) - \nabla p^n + \rho^n \mathbf{g} - \frac{\rho^n}{\Delta t} \alpha_1 \mathbf{u}^n - \frac{\rho^n}{\Delta t} \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}, \\ g &= -\lambda \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot [\mu_{ef} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{f} \end{aligned} \quad (4.51)$$

a seguinte equação é obtida, a qual leva à solução de um sistema linear, dado por

$$\begin{aligned} \frac{\rho^n}{\Delta t} \alpha_2 \tilde{u}_{i,j}^{n+1} - \lambda \left(\frac{\tilde{u}_{i+1,j}^{n+1} - 2\tilde{u}_{i,j}^{n+1} + \tilde{u}_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{\tilde{u}_{i,j+1}^{n+1} - 2\tilde{u}_{i,j}^{n+1} + \tilde{u}_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) &= \Psi_{i,j} \\ a_e \tilde{u}_{i+1,j} + a_w \tilde{u}_{i-1,j} + a_n \tilde{u}_{i,j+1} + a_s \tilde{u}_{i,j-1} + a_p \tilde{u}_{i,j} &= \Psi_{i,j}, \end{aligned} \quad (4.52)$$

onde,

$$\begin{aligned}
 a_e &= -\frac{\lambda}{\Delta x^2}, \\
 a_w &= -\frac{\lambda}{\Delta x^2}, \\
 a_n &= -\frac{\lambda}{\Delta y^2}, \\
 a_s &= -\frac{\lambda}{\Delta y^2}, \\
 a_p &= \rho_{i+\frac{1}{2},j} \frac{\alpha_2}{\Delta t} + 2\frac{\lambda}{\Delta x^2} + 2\frac{\lambda}{\Delta y^2}, \\
 \rho_{i+\frac{1}{2},j} &= \frac{\rho_{i+1,j} + \rho_{i,j}}{2}, \\
 \lambda &= 2\max\{\mu_{ef_{i,j}}\}.
 \end{aligned}$$

Para a solução dos sistema linear dado pela Eq. (4.52) utiliza-se o Método Multigrid-Multinível descrito no Capítulo 5. Para a discretização de Ψ basta substituir as Eqs.(4.46) - (4.48) na Eq. (4.51), tendo o cuidado de interpolar as propriedades do fluido na direção aqui escolhida (x).

4.5.2 Discretização da Equação para a Correção de Pressão

A discretização da Eq. (4.24) é apresentada abaixo, sendo que todos os termos para a correção da pressão estão no mesmo de tempo ($n + 1$) exeto a massa específica que é avaliada no tempo n . A Fig. 4.12, permite visualizar a localização da correção de pressão e da massa específica em uma malha euleriana.

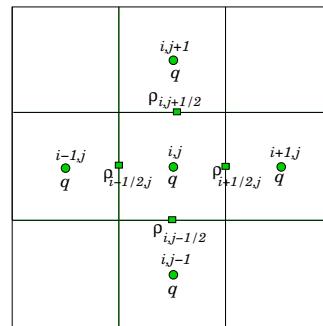


Figura 4.12: Representação esquemática da malha euleriana com a localização das variáveis de correção de pressão e massa específica.

Pelo fato de todos os termos estarem no mesmo passo de tempo $n + 1$, exeto a massa específica, considera-se que estes termos estão acoplados dando origem a um sistema

linear, que pode ser representado por

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^n} \nabla q^{n+1} \right] &= \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial q}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial q}{\partial y} \right) &= \frac{\alpha_2}{\Delta t} \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right) \\ \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}^n} \left(\frac{q_{i+1,j} - q_{i,j}}{\Delta x^2} \right) - \frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}^n} \left(\frac{q_{i,j} - q_{i-1,j}}{\Delta x^2} \right) + \frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}^n} \left(\frac{q_{i,j+1} - q_{i,j}}{\Delta y^2} \right) - \frac{1}{\rho_{i,j-\frac{1}{2}}^n} \left(\frac{q_{i,j} - q_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) &= \\ \frac{\alpha_2}{\Delta t} \left(\frac{\tilde{u}_{i+1,j} - \tilde{u}_{i,j}}{\Delta x} + \frac{\tilde{v}_{i,j+1} - \tilde{v}_{i,j}}{\Delta y} \right). \end{aligned} \quad (4.53)$$

Denominando o lado direito da Eq. (4.53) de $\Theta_{i,j}$, o sistema linear para a correção de pressão a ser resolvido pode ser representado por

$$a_n q_{i,j+1} + a_s q_{i,j-1} + a_e q_{i+1,j} + a_w q_{i-1,j} + a_p q_{i,j} = \Theta_{i,j}, \quad (4.54)$$

onde,

$$\begin{aligned} a_e &= \frac{\rho_e}{\Delta x^2}, \quad \rho_e = \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}^n} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{i+1,j}} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \right), \\ a_w &= \frac{\rho_w}{\Delta x^2}, \quad \rho_w = \frac{1}{\rho_{i-\frac{1}{2},j}^n} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{i-1,j}} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \right), \\ a_n &= \frac{\rho_n}{\Delta y^2}, \quad \rho_n = \frac{1}{\rho_{i,j+\frac{1}{2}}^n} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{i,j+1}} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \right), \\ a_s &= \frac{\rho_s}{\Delta y^2}, \quad \rho_s = \frac{1}{\rho_{i,j-\frac{1}{2}}^n} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_{i,j-1}} + \frac{1}{\rho_{i,j}} \right), \\ a_p &= -(a_e + a_w + a_n + a_s). \end{aligned}$$

Para a solução dos sistema linear dado pela Eq. (4.54), utiliza-se o Método Multigrid-Multinível descrito no Capítulo 5.

4.5.3 Discretização das Equações para as Velocidades Corrigidas

A atualização ou correção das velocidades são dadas pela seguinte discretização, apresentada aqui na direção x

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{n+1} &= \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^n}, \\ u_{i,j}^{n+1} &= \tilde{u}_{i,j}^{n+1} - \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{1}{\rho_{i+\frac{1}{2},j}^n} \left(\frac{q_{i,j}^{n+1} - q_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} \right). \end{aligned} \quad (4.55)$$

4.5.4 Discretização do Modelo Sub-Malha de Smagorinsky

A discretização espacial para a viscosidade turbulenta do modelo sub-malha de Smagorinsky (Eq. 3.39) é apresentada abaixo, a qual é proporcional à norma do tensor das taxas de deformação:

$$\begin{aligned}
 \mu_t &= (C_s \ell)^2 \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \\
 \mu_t &= C_s^2 \Delta x \Delta y \sqrt{2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 \right]}, \\
 u_{n_{i,j}} &= \frac{1}{4} (u_{i,j} + u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1} + u_{i+1,j}), \\
 u_{s_{i,j}} &= \frac{1}{4} (u_{i,j} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i+1,j-1}), \\
 v_{w_{i,j}} &= \frac{1}{4} (v_{i,j} + v_{i-1,j} + v_{i-1,j+1} + v_{i,j+1}), \\
 v_{e_{i,j}} &= \frac{1}{4} (v_{i,j} + v_{i+1,j} + v_{i,j-1} + v_{i+1,j-1}), \\
 \mu_t &= C_s^2 \Delta x \Delta y \sqrt{2 \left[\left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{u_{n_{i,j}} - u_{s_{i,j}}}{\Delta y} + \frac{v_{e_{i,j}} - v_{w_{i,j}}}{\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} \right)^2 \right]}.
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

4.6 Discretização Espacial para o Acoplamento Lagrangeano - Euleriano

As Eqs. (3.26) e (3.27) são responsáveis pelo acoplamento entre os domínios lagrangeano e euleriano. Para que isso seja possível, deve-se obter uma forma discreta para os processos de espalhamento e interpolação, os quais envolvem o processo de espalhamento da densidade de força interfacial lagrangiana para a malha euleriana e o processo de interpolação das velocidades da malha euleriana para a malha lagrangiana. Dessa forma, nesta seção são apresentadas a discretização da função distribuição, a qual atua como dispositivo para o processo de espalhamento e interpolação e a discretização da função indicadora.

4.6.1 Função Distribuição

A função Delta de Dirac é aproximada por uma função, proposta inicialmente por Peskin (1977). A aproximação bidimensional para a função delta é dada pelo produto

$$\delta^2(\mathbf{x} - \mathbf{X}) = \delta_x(x - X)\delta_y(y - Y). \quad (4.57)$$

Os pontos lagrangianos não coincidem com os pontos pertencentes ao domínio euleriano, em geral isso faz com que a implementação computacional da função Delta de Dirac seja inapropriada, uma vez que poderá levar à formação de um campo de forças descontínuo sobre a interface. Para contornar esse problema, deve-se substituir a função δ por uma aproximação também discreta que permite uma distribuição suave da força lagrangiana sobre o domínio euleriano. A função D_{ij} é então definida pela equação a seguir

$$D_{ij}(\mathbf{X}) = \prod_{m=1}^n \frac{[\phi(\mathbf{X} - \mathbf{x})]/\Delta}{\Delta}, \quad (4.58)$$

onde Δ é o espaçamento devido a discretização do domínio euleriano e n identifica o domínio bidimensional ou tridimensional. Se $n = 2$, a Eq. (4.58) é reescrita da seguinte forma

$$D_{ij}(\mathbf{X}) = \left[\frac{1}{\Delta x} \phi\left(\frac{x - X}{\Delta x}\right) \right] \left[\frac{1}{\Delta y} \phi\left(\frac{y - Y}{\Delta y}\right) \right]. \quad (4.59)$$

A função D_{ij} age como uma função peso tendo um comportamento semelhante a uma função Gaussiana. Desta forma a função distribuição guarda a propriedade de integral unitária no intervalo $[-\infty, +\infty]$, garantindo a conservação da quantidade distribuída. Na Fig. 4.13, pode-se observar a função distribuição, onde apenas os pontos dentro de uma faixa de 4Δ do ponto de interesse contribuem para o processo de distribuição.

A função ϕ acima não é escolhida arbitrariamente. Geralmente, ela é determinada de forma que um dado conjunto de propriedades seja satisfeito pela versão discretizada da função delta de Dirac. Em particular, as propriedades usadas para determinar esta aproximação são:

1. $\phi(r)$ é continua para todo número real r ;
2. $\phi(r) = 0$, $|r| \geq 2h_i$;

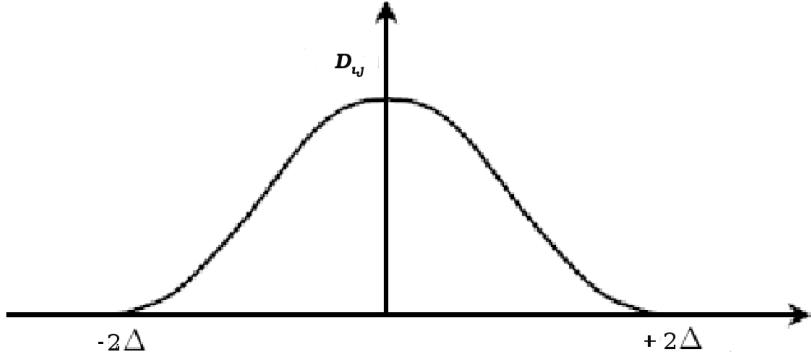


Figura 4.13: Função distribuição D_{ij} do tipo Gaussiana, aplicada em um domínio bidimensional ($n = 2$).

3. $\sum_i \phi(r - i) = 1, \forall r;$
4. $\sum_i (r - i)\phi(r - i) = 0, \forall r,$ e
5. $\sum_i [\phi(r - i)]^2 = \frac{1}{2}, \forall r,$

onde todas as somas são realizadas para inteiros i , tal que $-\infty < i < +\infty$ (ROMA, 1996).

Devido à propriedade 1, a forma discreta de $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X})$, o qual conecta um ponto qualquer do domínio euleriano \mathbf{x} a um ponto do domínio lagrangiano \mathbf{X} , varia continuamente quando um ponto da interface se move. Assim não há descontinuidades nos processos de espalhamento e interpolações.

A propriedade 2 garante que a função discreta de delta tenha um suporte finito, neste caso o suporte consiste em quatro células geradas a partir da discretização do domínio euleriano. Este suporte é escolhido por apresentar maior suavidade na função distribuição. Núcleos de Dirac que possuem suporte com apenas 2Δ foram testados apresentando grandes instabilidades durante o processo de cálculo.

Quando combinadas, as propriedades 3 e 4 garantem que as interpolações das funções lineares sejam exatas. Assim, se funções suaves estão sendo interpoladas, resultados com precisão de segunda ordem são obtidos. Finalmente a propriedade 5 é definida a partir da análise de como a força devida a um ponto da interface influencia o movimento deste mesmo ponto. Mais detalhes são apresentados por Peskin e McQueen (1994).

Adotando-se o processo de espalhamento como exemplo para a aplicação da função distribuição discretizada, o termo fonte de força dado pela Eq. (3.3) discretizado é apre-

sentado por

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \sum_k D_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{X}) \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \Delta s(\mathbf{X}), \quad (4.60)$$

onde $\Delta s(\mathbf{X})$ é o volume de controle por unidade de profundidade, centrado em cada ponto lagrangiano, D_{ij} é a função de interpolação/espalhamento, com propriedades de uma função Gaussiana, a qual determina que fração de uma quantidade de interface deve ir para cada célula vizinha. Esta equação é válida para escoamentos bidimensionais.

Para definir a função ϕ , uma função trigonométrica é escolhida (PESKIN, 1977), tal que

$$\phi(r) = \begin{cases} (1/4\Delta)(1 + \cos(\pi r/2\Delta)), & |r| < 2\Delta \\ 0, & |r| \geq 2\Delta \end{cases} \quad (4.61)$$

onde r é o raio de influência da função distribuição, podendo ser $(X_k - x_i)/\Delta$ ou $(Y_k - y_j)/\Delta$, dependendo da direção para a qual a propriedade é distribuída, sendo Δ o tamanho da malha euleriana na direção calculada, ou seja, $\Delta = (\Delta x, \Delta y)$. x_i e y_j são as coordenadas de um ponto \mathbf{x} do domínio euleriano e X_k e Y_k são as coordenadas para um dado ponto k pertencente a interface.

4.6.2 Função Indicadora

Um problema importante na simulação numérica de escoamentos multifásicos é como atualizar as propriedades físicas dos materiais, os quais podem apresentar um grande salto de descontinuidade através das interfaces entre os diferentes fluidos. Considerando que as propriedades dos materiais são constantes para cada fase e que o movimento da interface é limitado pela condição de CFL de forma que este movimento seja menor que o espaçamento da malha euleriana, é computacionalmente atraente atualizar essas quantidades somente na vizinhança da interface.

Várias aproximações têm sido propostas na literatura dirigidos a este tipo de problema. Unverdi e Tryggvason (1992) propõem uma função indicadora a qual é habilmente construída a partir da solução de uma equação de Poisson. Esta equação incorpora as propriedades globais da interface e pode ser eficientemente resolvida para domínios retangulares. Entretanto, ela precisa ser resolvida em todo o domínio computacional e não leva em consideração a vantagem do fato de que as propriedades físicas se alteram somente na

vizinhança da interface. Outra desvantagem, como citado por Tryggvason *et al.* (2001), é que este procedimento produz oscilações próximas à interface e imprecisões distante dela.

Empregando idéias da *Geometria Computacional*, Ceniceros e Roma (2005) propõem uma função indicadora com pequeno custo computacional, uma vez que não existe a necessidade de um *solver* para a solução de sistemas lineares. Essa aproximação é robusta e assegura precisão para as regiões com elevadas curvaturas.

Para uma dada interface Γ representada por segmentos de reta, define-se ψ como a função indicadora somente em T_γ , a qual é um banda estreita centrada em Γ de largura $2\gamma > 0$. Fora dessa banda ψ é continuamente definida para que tenha os valores de $\pm\gamma$, tal que

$$\psi(r) = \begin{cases} -\gamma & \text{se } d(\mathbf{x}) < -\gamma, \\ d(\mathbf{x}) & \text{se } |d(\mathbf{x})| \leq +\gamma, \\ +\gamma & \text{se } d(\mathbf{x}) > +\gamma, \end{cases} \quad (4.62)$$

onde $d(\mathbf{x})$ é a distância euclidiana de um dado ponto \mathbf{x} até a interface Γ , para a qual o sinal é escolhido de acordo com a direção da normal. Para determinar a função indicadora ao longo do tempo um algoritmo CPT (Closest Point Transform), recentemente desenvolvido na geometria computacional é utilizado de forma a determinar a menor distância euclidiana dos pontos da malha euleriana em relação a interface Γ (MAUCH, 2003). O algoritmo CPT encontra o ponto mais próximo de Γ e determina a distância Euclidiana de todos os pontos da malha euleriana que se encontram em uma dada faixa. Duas faixas são então definidas: uma para a região de “vértices” e outra para as “bordas”, conforme apresentado pela Fig. 4.14. Este processo é executado a cada passo no tempo, após a posição da interface ter sido atualizada. Nota-se que para $t = 0$ é necessário ter uma função indicadora ψ satisfazendo a Eq. (4.62) tal que, consequentemente, somente uma correção local é necessária. Para mais detalhes veja Ceniceros e Roma (2005).

4.7 Discretização do Domínio Lagrangiano

A discretização espacial das equações que governam o movimento da interface é realizada sobre a malha lagrangiana. Pode-se dizer que a malha lagrangiana é a interface definida por n_l pontos (Ver Fig. 4.15), tal que n_l é de certa forma dependente da malha euleriana. Assim, a quantidade de pontos da malha lagrangiana depende das dimensões

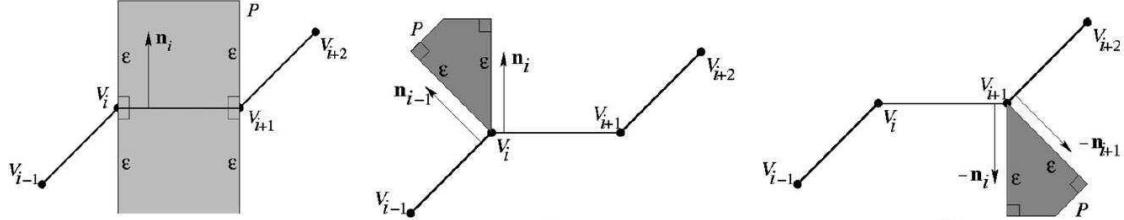


Figura 4.14: Conjunto de pontos dentro de uma distância ξ a Γ , para o qual o ponto mais próximo está definido em bordas ou vértices.

do espaçamento adotado na malha euleriana. Lima e Silva (2002) utiliza um critério de estabilidade baseado no tamanho da malha euleriana, onde a densidade da malha lagrangiana é definida por: $0,9 \leq \frac{\Delta s}{\Delta x} \leq 1,1$.

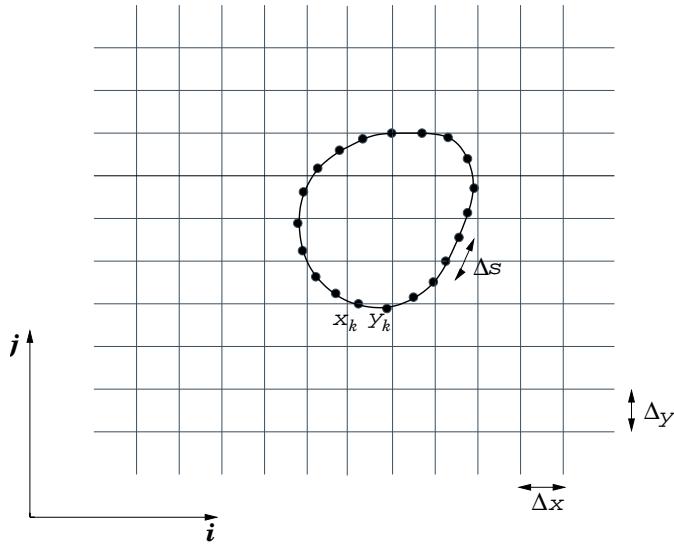


Figura 4.15: Representação esquemática da malha lagrangiana, com uma densidade de 2 pontos lagrangianos por cada célula da malha euleriana.

No presente trabalho, adota-se uma densidade de dois pontos lagrangianos por célula da malha euleriana, logo define-se:

$$\Delta s = \min\left(\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2}\right), \quad (4.63)$$

$$n_l = \frac{L_c}{\Delta s}, \quad (4.64)$$

onde, L_c é o perímetro da interface e Δs é definido como o espaçamento da malha lagrangiana.

Por se trabalhar aqui com refinamento adaptativo, vale ressaltar que todas equações são resolvidas no nível de refinamento mais fino, e os valores da densidade de força lagrangiana após serem calculados são interpolados por funções de interpolações lineares para os níveis inferiores.

4.7.1 Discretização Espacial da Força Lagrangiana

Como visto na Seção 3.2, a densidade de força lagrangiana é calculada em função da curvatura da interface, do vetor tangente unitário e do vetor normal unitário. As discretizações para o vetor tangente unitário (\mathbf{t}), vetor normal unitário (\mathbf{n}) e para a curvatura (κ) são discretizadas recorrendo-se aos polinômios de Lagrange.

Sabendo que a interface pode ser modelada através de uma equação vetorial paramétrica do tipo

$$\mathbf{R} = g(p)\mathbf{i} + h(p)\mathbf{j}, \quad (4.65)$$

onde p é um parâmetro dado. A partir da Eq. (4.65), os seguintes parâmetros geométricos são definidos:

$$\mathbf{n}(\mathbf{x}_k, t) = \frac{-h'\mathbf{i} + g'\mathbf{j}}{\sqrt{(h')^2 + (g')^2}}, \quad (4.66)$$

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}_k, t) = \frac{g'\mathbf{i} + h'\mathbf{j}}{\sqrt{(h')^2 + (g')^2}}, \quad (4.67)$$

$$\kappa(\mathbf{x}_k, t) = \frac{g'h'' - g''h'}{[(h')^2 + (g')^2]^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.68)$$

$$s(\mathbf{x}_k) = \frac{1}{4} \left[\sqrt{g'^2(\mathbf{x}_{k-1}) + h'^2(\mathbf{x}_{k-1})} + 2\sqrt{g'^2(\mathbf{x}_k) + h'^2(\mathbf{x}_k)} + \sqrt{g'^2(\mathbf{x}_{k+1}) + h'^2(\mathbf{x}_{k+1})} \right], \quad (4.69)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal unitário, \mathbf{t} é o vetor tangente unitário, κ é a curvatura, s é o espaçamento da interface e $(')$ é a derivada em relação ao parâmetro p .

Como os pontos sobre a interface são conhecidos, desenvolve-se então as fórmulas para as componentes $g(p)$ e $h(p)$ através de um polinômio de Lagrange de grau n , ajustado sobre

um conjunto de $n_l + 1$ pontos sobre a interface. Os seguintes polinômios são definidos:

$$g_n = \sum_{k=1}^{n_l} L_k(p) x_k(p_k), \quad (4.70)$$

$$h_n = \sum_{k=1}^{n_l} L_k(p) y_k(p_k), \quad (4.71)$$

$$L_k(p) = \prod_{j \neq k, j=1}^{n_l} \frac{p - p_j}{p_k - p_j}, \quad (4.72)$$

onde $x_k(p_k)$ e $y_k(p_k)$ são os pontos discretos sobre a interface. A seqüência destes pontos são definidas por:

$$\{x_k(p_k), y_k(p_k)\} \quad k = 1, \dots, n_l, \quad (4.73)$$

tal que,

$$p_k = k, \quad k = 1, \dots, n_l.$$

A seqüência dada pela Eq. (4.73) deve ser escolhida no sentido trigonométrico de maneira a conservar a convenção de sinal: a normal é positiva para o interior de uma interface, a curvatura é positiva se o centro de curvatura está voltado para o interior da interface.

Na forma discretizada, os polinômios de Lagrange de grau 4 são dados por

$$g'_k = \frac{x_{k-2} - 8x_{k-1} + 8x_{k+1} - x_{k+2}}{12}, \quad (4.74)$$

$$h'_k = \frac{y_{k-2} - 8y_{k-1} + 8y_{k+1} - y_{k+2}}{12}, \quad (4.75)$$

$$g''_k = \frac{-x_{k-2} + 16x_{k-1} - 30x_k + 16x_{k+1} - x_{k+2}}{12}, \quad (4.76)$$

$$h''_k = \frac{-y_{k-2} + 16y_{k-1} - 30y_k + 16y_{k+1} - y_{k+2}}{12}. \quad (4.77)$$

As componentes discretizadas dos vetores tangente e normal, assim como a curvatura

são então dadas por:

$$n_{x_k} = \frac{-h'_k}{\sqrt{(h'_k)^2 + (g'_k)^2}}, \quad (4.78)$$

$$n_{y_k} = \frac{g'_k}{\sqrt{(h'_k)^2 + (g'_k)^2}}, \quad (4.79)$$

$$t_{x_k} = \frac{g'_k}{\sqrt{(h'_k)^2 + (g'_k)^2}}, \quad (4.80)$$

$$t_{y_k} = \frac{h'_k}{\sqrt{(h'_k)^2 + (g'_k)^2}}, \quad (4.81)$$

$$\kappa_k = \frac{g'_k h''_k - g''_k h'_k}{[(h'_k)^2 + (g'_k)^2]^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.82)$$

onde, $\{t_{x_k}, t_{y_k}\}$ e $\{n_{x_k}, n_{y_k}\}$ são respectivamente as componentes horizontais e verticais do vetor tangente unitário e do vetor normal unitário.

Outra forma de se calcular o vetor tangente unitário, o vetor normal unitário e a curvatura discretizados, se faz através do método de diferenças finitas centradas. Assim, tem-se:

$$\mathbf{t} = \frac{\partial \mathbf{x}_k}{\partial s} / \left\| \frac{\partial \mathbf{x}_k}{\partial s} \right\|,$$

$$\begin{aligned} \tau_{x_k} &= \frac{x_{k+1} - x_{k-1}}{2\Delta s}, \\ \tau_{y_k} &= \frac{y_{k+1} - y_{k-1}}{2\Delta s}, \\ t_{x_k} &= \frac{\tau_{x_k}}{\sqrt{\tau_{x_k}^2 + \tau_{y_k}^2}}, \quad t_{y_k} = \frac{\tau_{y_k}}{\sqrt{\tau_{x_k}^2 + \tau_{y_k}^2}}, \end{aligned} \quad (4.83)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} / \left\| \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \right\|,$$

$$\begin{aligned} \eta_{x_k} &= \frac{t_{x_{k+1}} - t_{x_{k-1}}}{2\Delta s}, \\ \eta_{y_k} &= \frac{t_{y_{k+1}} - t_{y_{k-1}}}{2\Delta s}, \\ n_{x_k} &= \frac{\eta_{x_k}}{\sqrt{\eta_{x_k}^2 + \eta_{y_k}^2}}, \quad n_{y_k} = \frac{\eta_{y_k}}{\sqrt{\eta_{x_k}^2 + \eta_{y_k}^2}} \end{aligned} \quad (4.84)$$

$$\kappa = \left\| \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \right\| / \left\| \frac{\partial \mathbf{x}_k}{\partial s} \right\|,$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{\eta_{x_k}^2 + \eta_{y_k}^2}}{\sqrt{\tau_{x_k}^2 + \tau_{y_k}^2}}, \quad (4.85)$$

onde, $\{t_{x_k}, t_{y_k}\}$ e $\{n_{x_k}, n_{y_k}\}$ são respectivamente as componentes horizontais e verticais do vetor tangente unitário e do vetor normal unitário.

A discretização espacial para a densidade de força lagrangiana considerando a ação variável da tensão interfacial e aplicando a discretização dos parâmetros geométricos por diferenças finitas, é dada por

$$\mathbf{F} = \frac{\partial T}{\partial s} \mathbf{t} + T \left\| \frac{\partial \mathbf{x}_k}{\partial s} \right\| \kappa \mathbf{n},$$

$$F_x = \frac{T_{k+1} - T_{k-1}}{2\Delta s} t_{x_k} + T_k \sqrt{t_{x_k}^2 + t_{y_k}^2} \kappa n_{x_k}, \quad (4.86)$$

$$F_y = \frac{T_{k+1} - T_{k-1}}{2\Delta s} t_{y_k} + T_k \sqrt{t_{x_k}^2 + t_{y_k}^2} \kappa n_{y_k}. \quad (4.87)$$

Para coeficientes de tensão interfacial constante, as Eqs. (4.86) e (4.87), se reduzem a:

$$F_x = T_k \kappa n_{x_k}, \quad (4.88)$$

$$F_y = T_k \kappa n_{y_k}, \quad (4.89)$$

onde, F_x e F_y são respectivamente as componentes horizontais e verticais da densidade de força lagrangiana. Para a discretização da força lagrangiana, os polinômios de Lagrange são utilizados, pois para os testes feitos durante o cálculo da velocidade do centróide essa discretização apresentou maior precisão.

4.7.2 Discretização Espacial da Equação do Movimento da Interface

À medida que a interface se deforma, os pontos lagrangianos tendem a se aglomerar principalmente em regiões de elevadas curvaturas e a se distanciarem em regiões de curvaturas suaves. Se uma velocidade tangencial é apropriadamente escolhida, os pontos

lagrangianos permanecerão equidistribuídos ao longo de todo a interface. No entanto, em determinado momento o comprimento dos segmentos podem assumir valores inadequados, ou seja, $\Delta s > \min(\Delta x, \Delta y)$ ou $\Delta s < \min(\frac{\Delta x}{4}, \frac{\Delta y}{4})$. Quando isto ocorre a quantidade de pontos lagrangianos deve ser dobrada se $\Delta s > \min(\Delta x, \Delta y)$, ou reduzida pela metade se $\Delta s < \min(\frac{\Delta x}{4}, \frac{\Delta y}{4})$. Interpolações lineares são utilizadas para tais procedimentos.

Considerando que a equidistribuição dos pontos lagrangianos é feita juntamente com o cálculo do movimento da interface, no qual uma velocidade auxiliar tangencial (u_a) é adicionada às velocidades da interface, de forma que estas são tratadas aqui nas direções tangenciais e verticais, o seguinte conjunto de equações discretizadas para as Eqs. (4.90) e (4.91) são apresentadas por

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x} + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t} \quad (4.90)$$

$$u_a(\mathbf{X}, t) = -u_t(\mathbf{X}, t) + \int_0^s [\sigma_s \kappa u_n - \langle \sigma_s \kappa u_n \rangle] ds'. \quad (4.91)$$

Aplicando-se a função distribuição sobre as velocidades eulerianas, determinam-se as velocidades lagrangianas (u_{ib} , v_{ib}). Para o cálculo da velocidade auxiliar, no entanto, é necessário determinar as velocidades tangenciais e normais, as quais são dadas por:

$$\begin{aligned} u_t &= \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} = ut_x + vt_y, \\ u_{t_k}^{n-1} &= t_{x_k}^{n-1} u_{ib_k}^{n-1} + t_{y_k}^{n-1} v_{ib_k}^{n-1}, \\ u_{t_k}^n &= t_{x_k}^n u_{ib_k}^n + t_{y_k}^n v_{ib_k}^n, \end{aligned} \quad (4.92)$$

$$\begin{aligned} u_n &= \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = u(-t_y) + vt_x, \\ u_{n_k}^{n-1} &= -t_{y_k}^{n-1} u_{ib_k}^{n-1} + t_{x_k}^{n-1} v_{ib_k}^{n-1}, \\ u_{n_k}^n &= -t_{y_k}^n u_{ib_k}^n + t_{x_k}^n v_{ib_k}^n, \end{aligned} \quad (4.93)$$

onde, u_t é a velocidade tangencial e u_n é a velocidade normal para cada ponto (k) pertencente à interface. t_x e t_y , são as componentes do vetor tangente unitário definidos na seção anterior e σ_s é definido por:

$$\sigma_{s_k} = \sqrt{\tau_{x_k}^2 + \tau_{y_k}^2}, \quad (4.94)$$

onde τ_{x_k} e τ_{y_k} são definidos pela Eq. (4.83). É importante observar, que as discretizações dos parâmetros geométricos utilizados aqui são dadas pelo método de diferenças finitas e não por Lagrange.

Com os termos, σ_{s_k} e κ discretizados na seção anterior, e u_n é possível calcular o valor de $\int_0^s [\sigma_s \kappa u_n - \langle \sigma_s \kappa u_n \rangle] ds'$ pela Regra do Trapézio. Subtraindo o valor da velocidade tangencial tem-se o valor de u_a em cada ponto da malha lagrangiana. Por fim, os valores da velocidade auxiliar u_a , devem ser adicionados à velocidade tangencial pois o conjunto de equações aqui descritas são trabalhadas nas direções normais e tangenciais.

Para a discretização final da Eq. (4.90), utiliza-se novamente o método de Gear Extrapolado, lembrando que as velocidades devem retornar ao sistema cartesiano, para isso vale notar que:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= (u, v) = u_t \mathbf{t} + u_n \mathbf{n}, \\ &= u_t(t_x, t_y) + u_n(-t_y, t_x), \\ &= (u_t t_x - u_n t_y, u_t t_y + u_n t_x). \end{aligned} \quad (4.95)$$

Aplicando o Método de Gear Extrapolado à Eq. (4.90) e a discretização apresentada na Eq. (4.95), a Eq. (4.90) na sua forma discretizada é apresentada por

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{X}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{X}^n + \alpha_0 \mathbf{X}^{n-1}}{\Delta t} = \beta_0 \mathbf{u}^{n-1} + \beta_1 \mathbf{u}^n, \quad (4.96)$$

tal que,

$$\begin{aligned} X_k^{n+1} &= \frac{\Delta t}{\alpha_2} \left[\beta_0 (-t_{y_k}^{n-1} u_{n_k}^{n-1} + t_{x_k}^{n-1} u_{t_k}^{n-1}) + \beta_1 (-t_{y_k}^n u_{n_k}^n + t_{x_k}^n u_{t_k}^n) \right] \\ &\quad - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} X_k^n - \frac{\alpha_0}{\alpha_2} X_k^{n-1}, \end{aligned} \quad (4.97)$$

$$\begin{aligned} Y_k^{n+1} &= \frac{\Delta t}{\alpha_2} \left[\beta_0 (t_{x_k}^{n-1} u_{n_k}^{n-1} + t_{y_k}^{n-1} u_{t_k}^{n-1}) + \beta_1 (t_{x_k}^n u_{n_k}^n + t_{y_k}^n u_{t_k}^n) \right] \\ &\quad - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} Y_k^n - \frac{\alpha_0}{\alpha_2} Y_k^{n-1}. \end{aligned} \quad (4.98)$$

4.8 Estabilidade

Em estudos que envolvem simulações numéricas de escoamentos bifásicos ou escoamentos ao redor de corpos sólidos onde as estruturas turbinholares são captadas recorrendo a simulação de Grandes Escalas (LES), passos de tempo extremamente pequenos são utilizados devido a discretização explícita aplicada aos termos advectivo e difusivo e, consequentemente, a modelagem da viscosidade turbulenta. Trabalhos como os de Yang e Balaras (2006), Balaras (2004) e Oliveira (2006) utilizam LES para simular escoamentos turbulentos ao redor de fronteiras móveis. O presente trabalho visa contribuir com uma

metodologia a qual remove a restrição temporal da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ devido ao uso de métodos explícitos, porém permitindo o tratamento explícito na modelagem da viscosidade turbulenta, utilizando uma restrição temporal da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x)$. Essa contribuição é observada ao aplicar o Método de Gear Extrapolado na discretização temporal. A análise de estabilidade para tal metodologia é aqui discutida.

Pode-se dizer que um método numérico é instável quando quaisquer erros ou perturbações na solução são amplificadas sem limites. Essas amplificações fazem com que o módulo dos valores na solução numérica cresça a cada etapa do cálculo. Essas aproximações se apresentam na forma de condições de contorno ou iniciais aproximadas de forma incorreta, e acúmulo dos erros de arredondamento. O acúmulo de tais erros podem ser evitados, se os critérios de estabilidade para cada método numérico são satisfeitos.

Devido à diversidade e complexidade das EDPs (*Equações Diferenciais Parciais*) que descrevem os fenômenos físicos, nem sempre é possível a determinação exata de critérios de estabilidade. Recorre-se então, a experimentos numéricos e a comparações com o comportamento de equações mais simples, mas que descrevam fenômenos similares (FORTUNA, 2000).

Quando se fala separadamente de métodos explícitos e implícitos, verifica-se que a grande vantagem dos métodos implícitos sobre os métodos explícitos é justamente a maior estabilidade sobre os primeiros. Por isso, apesar das formulações explícitas fornecerem equações lineares simples de serem calculadas, ao contrário daquelas fornecidas pelas discretizações implícitas, a possibilidade de utilizarmos um valor de Δt maior nos métodos implícitos os tornam mais atrativos. Porém, este valor de Δt não pode ser escolhido arbitrariamente, pois quando se resolve mais de uma equação o problema de acoplamento pode limitar severamente Δt (MALISKA, 1995).

Ao se verificar a estabilidade dos métodos explícitos realizando-se a análise de *von Neumann* sobre as equações bidimensionais da difusão e da convecção, determinam-se respectivamente os seguintes critérios de estabilidade:

$$\Delta t_d \leq \frac{1}{2\alpha} \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2}, \quad (4.99)$$

$$\Delta t_c \leq \min\left(\frac{\Delta x}{|u|_{\max}}, \frac{\Delta y}{|v|_{\max}}\right), \quad (4.100)$$

onde α é o coeficiente de difusidade térmica, Δx e Δy são respectivamente os espaçamentos da malha euleriana na direção x e y . Os síndices c e d identificam os passos de tempo dos

termos convectivo e difusivo, respectivamente.

Para a equação de Navier-Stokes discretizada explicitamente, onde ocorre a presença dos termos difusivo e advectivo, o critério de estabilidade é dado por:

$$\Delta t = C \min(\Delta t_d, \Delta t_c), \quad (4.101)$$

onde o coeficiente de difusidade térmica é substituído pela viscosidade cinemática $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ e C é um fator de segurança entre 0 e 1.

Pode-se então afirmar que o critério de estabilidade para métodos explícitos é da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. Em métodos implícitos, no termo difusivo têm-se condições de estabilidade mais favoráveis, da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x)$; no entanto, as equações resultantes são acopladas, o que exige a resolução de um sistema de equações a cada passo de integração no tempo, o que pode tornar os métodos lentos e de difícil paralelização.

Quando se trata de métodos semi-implícitos, segundo Badalassi (2003), é difícil estabelecer uma análise de estabilidade rigorosa para o esquema numérico semi-implícito, porém também é possível obter informações valiosas sobre a robustez e estabilidade do método através de testes numéricos. Como o termo difusivo é tratado implicitamente a restrição temporal da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ é removida, permanecendo a restrição dada pela Eq. (4.100) para o termo advectivo, já que este é tratado explicitamente. Com base em testes numéricos e conhecendo-se, as restrições temporais para as equações difusivas e convectivas, a seguinte restrição temporal é adotada para a discretização semi-implícita dada por Gear Extrapolado:

$$\Delta t = C \min(\Delta t_1, \Delta t_2, \Delta t_3), \quad (4.102)$$

onde,

$$\Delta t_1 = \min(\Delta x, \Delta y), \quad (4.103)$$

$$\Delta t_2 = \left(\frac{|u|_{\max}}{\Delta x}, \frac{|v|_{\max}}{\Delta y} \right), \quad (4.104)$$

$$\Delta t_3 = \frac{\min\left\{ \frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2} \right\}}{|v_{ib}|_{\max}}, \quad (4.105)$$

e C é um fator de segurança, cujo valor está no intervalo $[0,2 : 0,6]$, $|u|_{\max}$ e $|v|_{\max}$ são os valores da norma do máximo das componentes $|u|$ e $|v|$, respectivamente. Δx e Δy são os espaçamentos da malha eulerina nas direções horizontais e verticais, respectivamente.

Quando se trata de malha refinada localmente, estes espaçamentos são tomados em relação ao nível mais fino. A restrição dada pela Eq. (4.103) é devida ao tratamento implícito do termo difusivo, enquanto que a restrição apresentada pela Eq. (4.104) é devida ao tratamento explícito do termo advectivo. Finalmente, a Eq. (4.105) é a restrição temporal devido ao movimento da interface, que não deve ser maior que a metade do espaçamento da malha euleriana, onde v_{ib} é a velocidade da interface na direção vertical.

Capítulo 5

Método Multigrid-Multinível

A resolução de problemas de mecânica dos fluidos e transferência de calor através de métodos numéricos acarreta um custo computacional elevado e muitas vezes proibitivo devido ao grande número de equações a serem resolvidas.

Uma alternativa para melhorar a velocidade de convergência destes problemas seria o uso de Métodos Multigrid (MG), que aceleram consideravelmente a resolução dos sistemas lineares envolvidos na solução numérica dos problemas (MALISKA, 2004) uma vez que é um método baseado em correções aditivas. Em geral o MG é um método iterativo de resolução de sistemas lineares, sendo fortemente dependente da estimativa inicial atribuída às incógnitas do problema. Assim, a metodologia multigrid pode ser considerada como um dos algoritmos mais rápidos e eficientes para a solução de sistemas lineares (ZHANG, 1996). Esta metodologia oferece uma taxa de convergência independente das dimensões da malha (GUPTA *et al.*, 1995).

O Método Multigrid (MG) tem sido aplicado para a solução de equações diferenciais parciais (elípticas e hiperbólicas) nas últimas décadas (BRANDT, 1977, BAKHALOV, 1966). No entanto, somente nos últimos anos tem se tornado popular e aplicável a uma grande variedade de sistemas complexos. Provavelmente, a situação mais comum onde o MG é empregado é na solução linear da equação de Poisson (Eq. 4.24). A equação discretizada para um dado ponto nodal no centro da célula é dada pela Eq. (4.53), mas aqui ela é reescrita na forma

$$a_p\phi_{i,j} + a_w\phi_{i-1,j} + a_e\phi_{i+1,j} + a_s\phi_{i,j-1} + a_n\phi_{i,j+1} = b_{i,j}, \quad (5.1)$$

onde os índices i e j localizam na malha o ponto nodal nas direções x e y respectivamente.

Promovendo a varredura de todos os índices i e j , as Eqs (5.1) resultantes formam um sistema de equações algébricas expresso na forma matricial

$$A\phi = B, \quad (5.2)$$

onde A é a matriz de coeficientes, ϕ é o vetor das incógnitas e B é a matriz que acomoda os termos fontes.

A solução desse sistema (Eq. 5.2) pode se dar através da aplicação de algum método iterativo. Em métodos clássicos como o de Jacobi, o de Gauss-Seidel ou o TDMA - *TriDiagonal Matrix Algorithm*, a velocidade de convergência da solução numérica é elevada no ínicio dos cálculos, decaindo sensivelmente à medida que o processo iterativo evolui. Tal comportamento é explicado através de uma análise espectral (ou de Fourier).

Mostra-se, com base em taxas de convergência, que os métodos iterativos clássicos são eficientes somente na suavização (ou relaxação), isto é, na remoção de componentes de Fourier do erro de altas frequências. O mesmo não ocorre para o espectro de baixas frequências (BRANDT, 1977, HACKBUSH, 1985).

Conclui-se que as componentes do erro de baixas frequências são as responsáveis pela lenta convergência demonstrada pelos processos iterativos que usam um único nível de malha. Como as componentes de altas frequências são aquelas cujos comprimentos de onda são menores que ou comparáveis ao espaçamento da malha computacional, a taxa de convergência cai conforme a malha se torna mais refinada (RABI, 1998).

A filosofia do Método Multigrid baseia-se na premissa de que cada faixa de frequência do erro deve ser suavizada no espaçamento mais adequado para tal. Para que as componentes do erro de longos comprimentos de onda possam ser eliminados com eficiência, o Método Multigrid procura trabalhar não com uma única malha, mas com uma seqüência de malhas cada vez mais grossas. Assim comprimentos de onda que são longos em malhas finas, são transformados em curtos em malhas grossas, onde o erro pode ser rapidamente suavizado (MCCORMICK, 1987). A Fig. 5.1 apresenta uma seqüência de três níveis de malhas seqüencialmente mais grossas, onde em cada nível de malha l , as componentes do erro correspondentes são eficientemente reduzidas, acelerando o processo de convergência. Para um dado nível de malha l , os níveis de malha $l-1, l-2, \dots, 1$, denotam os níveis com espaçamentos seqüencialmente mais grossos a uma razão igual a 2. Da mesma forma,

$l+1, l+2, \dots, l_{top}$ denotam os níveis seqüencialmente mais finos, no qual a razão de espaçamentos entre os níveis é igual a 2. Se $l \geq l_{base}, \dots, l_{top}$ está sendo usado, então malhas refinadas localmente estão sendo aplicadas.

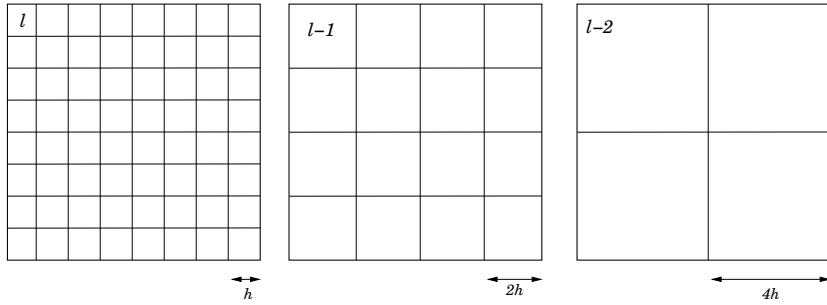


Figura 5.1: Exemplo de seqüência de malhas onde as componentes do erro são reduzidas pelo Método Multigrid.

Dependendo de como o sistema de equações algébricas é operado nas malhas mais grossas, há dois modos de se construir o algoritmo multigrid: na formulação *correction storage* (CS) e na formulação *full approximation storage* (FAS). Para problemas lineares, recomenda-se o uso do CS, enquanto que o FAS é mais adequado para situações não lineares. A vantagem do algoritmo multigrid CS frente ao FAS é que, quando da passagem de uma malha fina para uma malha mais grossa, requer-se apenas a manipulação dos resíduos das equações na malha fina, não se requerendo também a manipulação das grandezas. Computacionalmente, a restrição dos resíduos é bem mais simples do que a restrição das grandezas e o algoritmo então torna-se de fácil implementação (RABI, 1998). No presente trabalho o modo CS é adotado.

Muito próximo ao Método Multigrid estão os Métodos Multigrid-Multiníveis, os quais estendem a metodologia multigrid para malhas refinadas localmente, podendo atuar tanto em malhas estruturadas como em malhas não-estruturadas. Considerando que malhas estruturadas refinadas localmente são utilizadas neste trabalho, a escolha do Método Multigrid se ajusta extremamente bem dentro do contexto de malhas compostas. No entanto, verifica-se um tratamento diferenciado na implementação do MG nas malhas compostas. Neste capítulo, o MG é apresentado com mais detalhes na malha uniforme, conforme descrito na Seção 5.1 e as modificações para se adequar a malha composta são descritas na Seção 5.2.

5.1 Método Multigrid na Malha Uniforme

Como citado acima, o método multigrid para malhas uniformes não é novo e uma extensa literatura discorre sobre esta metodologia (e.g. BRIGGS, 1987). Ao considerar que $\bar{\phi}$ é uma aproximação da solução exata ϕ e que $e = \phi - \bar{\phi}$, é o desvio da aproximação $\bar{\phi}$ em relação à solução exata ϕ , pode-se escrever a seguinte equação

$$A(e + \bar{\phi}) = B. \quad (5.3)$$

Evidentemente o valor exato do erro é tão inacessível quanto valor exato da solução, levando à necessidade de se determinar uma estimativa do erro, no caso, o resíduo R , ou seja,

$$R = B - A\bar{\phi}, \quad (5.4)$$

pode ser calculado indicando quanto a aproximação $\bar{\phi}$ deixa de satisfazer a Eq. 5.2. Se a norma do resíduo é calculada e este valor é igual a zero, verifica-se que a solução exata do problema foi encontrada, isto é, $\phi \equiv \bar{\phi}$, o que torna o erro igualmente nulo. Na prática, num processo iterativo, não se chega a um resíduo $R = 0$, mas interrompe-se o processo quando o mesmo for suficientemente pequeno, da ordem de $0,5 * \min(\Delta x^2, \Delta y^2)$ por exemplo.

Reorganizando a Eq. (5.4) tem-se,

$$A\bar{\phi} = B - R, \quad (5.5)$$

e efetuando-se a subtração entre as Eqs.(5.2) e (5.5) tem-se,

$$A(\phi - \bar{\phi}) = R, \quad (5.6)$$

que, com a inserção da relação $e = \phi - \bar{\phi}$ fica,

$$Ae = R. \quad (5.7)$$

A Equação (5.7) é denominada equação residual, indicando que o erro e satisfaz o mesmo conjunto de equações que a solução ϕ quando B é substituído por R , ou seja, resolver o sistema da Eq. (5.7) é análogo a resolver o sistema da Eq. (5.2). Com a definição da equação residual busca-se obter a solução na malha fina, empregando-se os demais níveis apenas como esquemas de correção, não havendo necessidade de resolver

de forma *exata* as respectivas equações resíduais nestas malhas. No nível mais grosso $l = 1$ recomenda-se que a Eq. (5.7) seja resolvida exatamente ou que nela seja aplicado um número bem maior de iterações. Por envolver um número expressivamente menor de células e, portanto, corresponder ao menor sistema de equações, tal procedimento não compromete muito o esforço computacional (LEBRÓN, 2001). É importante observar, que pelo fato de se usar termos como “malhas finas” e “malhas grossas” não significa que malhas compostas estejam sendo usadas, ou seja, tais malhas são pertencentes apenas aos níveis do método multigrid, também aqui denominado de níveis “virtuais”.

5.1.1 Processo Iterativo

Por ser um método iterativo que trabalha em diferentes níveis de refinamento, o MG necessita de operadores para a comunicação entre os diferentes níveis tanto no processo de transferência de informações da malha fina para a grossa quanto no sentido inverso. Esses processos são definidos respectivamente de restrição \mathcal{R} e pronlogamento \mathcal{P} . Posteriormente, esses operadores serão definidos com maiores detalhes. Considerando a Fig. 5.2 com 2 níveis de espaçamentos h e $2h$, os quais definem os níveis l e $l - 1$, o MG de forma geral segue o seguinte processo iterativo:

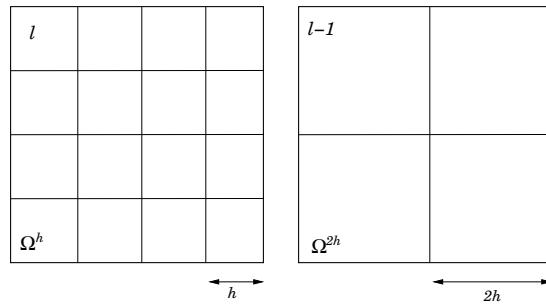


Figura 5.2: Exemplo de seqüência de malhas para aplicação de um processo iterativo do Método Multigrid.

1. relaxar η vezes $A^l \bar{\phi}^l = B^l$ (Eq. 5.2) na malha Ω^h (Fig. 5.2), partindo-se de um valor inicial $\bar{\phi}_0$ e obtendo-se uma estimativa $\bar{\phi}_\eta^l$, a qual será utilizada para avaliar o resíduo,
2. calcular o resíduo $R^l = B^l - A^l \bar{\phi}^l$ (Eq. 5.4),

3. transferir (restringir) os valores deste resíduo R^l para a malha pertencente ao nível imediatamente abaixo (Ω^{2h}), com o auxílio de funções interpoladoras, obtendo-se R^{l-1} ,
4. relaxar algumas vezes (no presente trabalho adota-se 3η) a equação residual $A^{l-1}e^{l-1} = R^{l-1}$ (Eq. 5.7), com valor inicial $e^{l-1} = 0$ na malha Ω^{2h} , obtendo-se os valores para e^{l-1} . Observa-se que o termo B não é conhecido para as malhas $l \leq l_{base}$,
5. transferir os valores deste erro e^{l-1} para uma malha mais fina Ω^l , com o auxílio de funções interpoladoras obtendo-se e^l ,
6. corrigir a aproximação da malha fina com $\bar{\phi}^l \rightarrow \bar{\phi}^l + e^l$.

5.1.2 Operador de Transferência entre as Malhas

Elementos essenciais do método multigrid são os operadores de transferência, ou seja, os operadores de restrição \mathcal{R} e prolongamento \mathcal{P} . Quando a transferência é no sentido “fina-grossa” ($l \rightarrow l-1$) utiliza-se o operador de restrição \mathcal{R} . Quando a transferência se dá no sentido oposto ($l \leftarrow l-1$) o operador empregado é o prolongamento \mathcal{P} . Normalmente, médias simples e polinômios bilineares para casos bi-dimensionais ou polinômios trilineares para casos tridimensionais são aplicados, para as operações de restrição e prolongamento, respectivamente. No entanto, nada impede que polinômios de ordem superior sejam usados.

5.1.2.1 Operador para o Processo de Restrição

A prática tem demonstrado que o mecanismo de transferência de informações da malha fina para a malha grossa pode ser realizado linearmente, com bons resultados. Tomando-se como exemplo a pressão que é uma variável centrada e considerando $\Delta x = \Delta y = h$, uma operação de restrição é então ilustrada na Fig. 5.3. Para tal procedimento, matematicamente a operação é definida por

$$p_{i,j}^{l-1} = \mathcal{R}_{l-1}^l(p_{2i-1,2j-1}^l, p_{2i,2j-1}^l, p_{2i,2j}^l, p_{2i-1,2j}^l), \quad (5.8)$$

$$p_{i,j}^{l-1} = \frac{p_{2i-1,2j-1}^l + p_{2i,2j-1}^l + p_{2i,2j}^l + p_{2i-1,2j}^l}{4}, \quad (5.9)$$

onde i e j são os índices da malha grossa e $2i$ e $2j$ são relativos à malha fina.

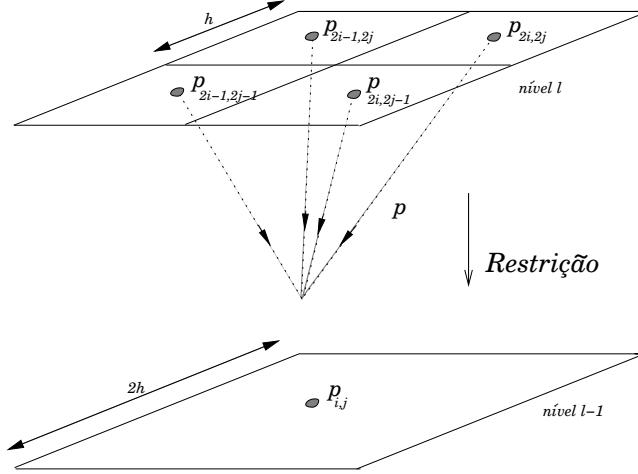


Figura 5.3: Operação linear de restrição do nível l para o nível $l - 1$.

5.1.2.2 Operador para o Processo de Prolongamento

Utilizando-se polinômios bilineares, matematicamente a operação de prolongamento da malha grossa para a malha fina, onde $2h$ é o espaçamento da malha grossa, é definida por

$$p_{2i,2j}^l = \frac{9p_{i,j}^{l-1} + 3p_{i+1,j}^{l-1} + 3p_{i,j+1}^{l-1} + p_{i+1,j+1}^{l-1}}{16}, \quad (5.10)$$

$$p_{2i,2j-1}^l = \frac{9p_{i,j}^{l-1} + 3p_{i+1,j}^{l-1} + 3p_{i,j-1}^{l-1} + p_{i+1,j-1}^{l-1}}{16}, \quad (5.11)$$

$$p_{2i-1,2j}^l = \frac{9p_{i,j}^{l-1} + 3p_{i,j+1}^{l-1} + 3p_{i-1,j}^{l-1} + p_{i-1,j+1}^{l-1}}{16}, \quad (5.12)$$

$$p_{2i-1,2j-1}^l = \frac{9p_{i,j}^{l-1} + 3p_{i,j-1}^{l-1} + 3p_{i-1,j}^{l-1} + p_{i-1,j-1}^{l-1}}{16}, \quad (5.13)$$

onde novamente i e j definem os índices na malha grossa.

A Figura 5.4 permite visualizar os pontos da malha grossa (nível $l - 1$) que influenciam nos valores da célula $2i, 2j$ pertencente à malha fina (nível l). Consequentemente o mesmo se aplica para as outras células. Os procedimentos de restrição e prolongamento se estendem facilmente para variáveis deslocadas tomando-se cuidado com os coeficientes polinomiais. A Fig. 5.5 ilustra o processo de prolongamento para uma variável deslocada u localizada na célula $2i - 1, 2j$. Os polinômios de prolongamento para a variável u são dados por

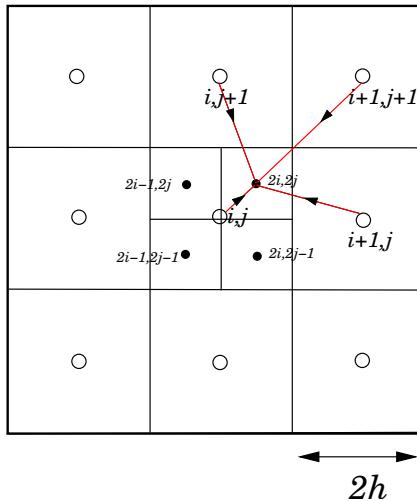


Figura 5.4: Operação de prolongamento do nível $l - 1$ para o nível l para uma variável centrada.

$$u_{2i-1,2j} = \frac{3}{4}u_{i,j} + \frac{1}{4}u_{i,j+1}, \quad (5.14)$$

$$u_{2i-1,2j-1} = \frac{3}{4}u_{i,j} + \frac{1}{4}u_{i,j-1}, \quad (5.15)$$

$$u_{2i,2j-1} = \frac{3}{8}u_{i,j} + \frac{3}{8}u_{i+1,j} + \frac{1}{8}u_{i,j-1} + \frac{1}{8}u_{i+1,j-1}, \quad (5.16)$$

$$u_{2i,2j} = \frac{3}{8}u_{i,j} + \frac{3}{8}u_{i+1,j} + \frac{1}{8}u_{i,j+1} + \frac{1}{8}u_{i+1,j+1}. \quad (5.17)$$

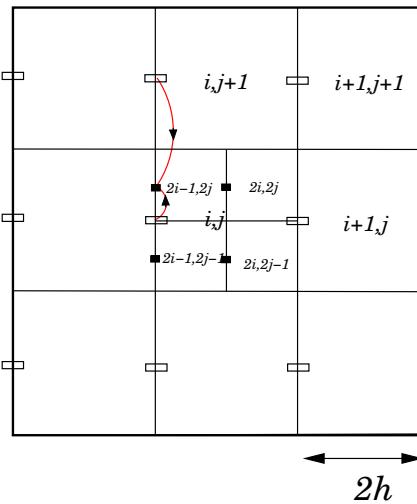


Figura 5.5: Operação de prolongamento do nível $l - 1$ para o nível l para uma variável deslocada u .

5.1.3 Estratégias de Mudança de Nível de Malha

Durante o algoritmo multigrid, diferentes níveis de malha são visitados, nos quais as componentes do erro com comprimentos de onda comparáveis ao espaçamento da malha correspondente são eficientemente suavizadas. A seqüência de como os procedimentos são concatenados entre níveis consecutivos de malha caracteriza os chamados *Ciclo-V* e *Ciclo-W*. A Fig. 5.6 mostra a seqüência de operações em cada ciclo durante uma iteração *multigrid* completa. As operações são de relaxação (r_l), restrição (\mathcal{R}), relaxação no nível $l = 1$ (r_1), prolongamento (\mathcal{P}) e atualização. Geralmente, nas técnicas de mudança de nível de malhas se faz o uso de operações de pós-relaxações, ou seja, relaxações realizadas após o prolongamento. Neste processo, a equação residual $Ae = R$ é relaxada novamente na busca de melhorar os valores para o processo de atualização. O processo de relaxação usado durante a “descida” do *Ciclo-V* por exemplo é denominado de pré-relaxação.

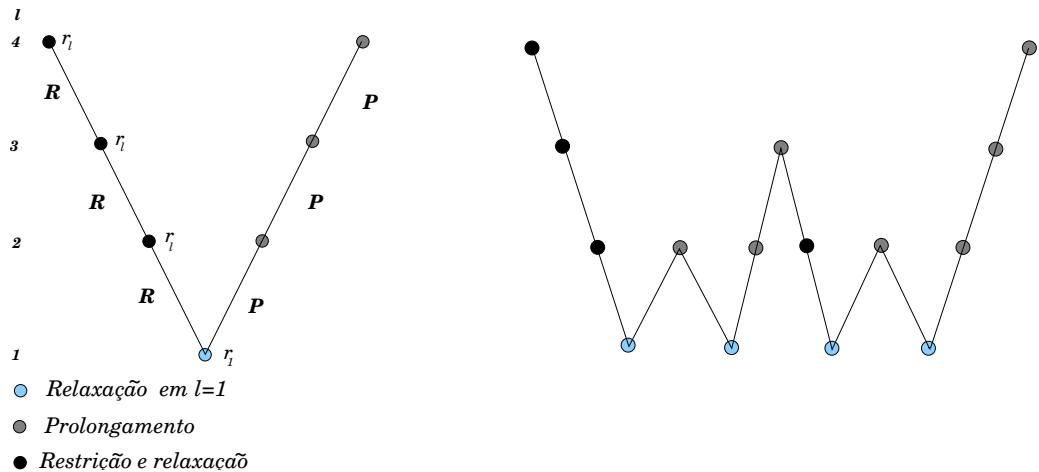


Figura 5.6: Esquema representativo dos Ciclos V (esquerda) e W (direita) em malha uniforme com 4 níveis seqüencialmente mais grossos.

Duas estratégias distintas podem ser adotadas para se determinar o momento de se mudar de malha. Uma delas consiste em monitorar a taxa de convergência da solução numérica, a qual pode ser determinada pela razão das normas dos resíduos de duas relaxações sucessivas. Quando o problema em questão envolve a solução de uma única grandeza do escoamento, a aplicação deste tipo de estratégia não traz dificuldades pois há apenas uma única taxa de convergência a ser monitorada (RABI, 1998).

Um procedimento alternativo adotado consiste em especificar a estratégia de ciclos, isto é, especificar o número de relaxações em cada nível l . Hortmann *et al.* (1990) citam

que esta prática em certos casos é mais eficiente que monitorar a taxa de convergência da solução numérica. Este é o critério adotado no presente trabalho.

Apresenta-se agora um *Ciclo-V* com todo o processo iterativo envolvendo um número de níveis de malhas seqüencialmente mais grossas superior a 2. Este processo é dado pelo Algoritmo 5.1 descrito abaixo. Neste algoritmo MG é discretizado em malhas Ω^{mh} onde $m = 1, 2, 4, 8, \dots, 2^q$, determina uma série de malhas progressivamente mais grossas com espaçamento mh . É importante observar que para níveis de malhas superior a 2 tem-se que a equação residual tem também o seu próprio resíduo. Dessa forma, o que é restringido para $l = l-2, l-3, \dots, 1$, tal que $l = l_{base}$, é o resíduo proveniente da equação residual, ou seja, $R^{l-2} \leftarrow \mathcal{R}_{l-2}^{l-1}(R^{l-1} - A^{l-1}e^{l-1})$.

5.1: Ciclo V para a malha uniforme

- Relaxar $A^l \bar{\phi}^l = B^l$, η vezes, com um valor inicial $\bar{\phi}_0^l$,
 - Calcular e restringir o resíduo: $R^{l-1} \leftarrow \mathcal{R}_{l-1}^l(B^l - A^l \bar{\phi}^l)$,
 - Relaxar $A^{l-1}e^{l-1} = R^{l-1}$, com um valor inicial $e^{l-1} = 0$,
 - Calcular e restringir o resíduo: $R^{l-2} \leftarrow \mathcal{R}_{l-2}^{l-1}(R^{l-1} - A^{l-1}e^{l-1})$,
 - \vdots
 - Calcular $A^1e^1 = R^1$,
 - \vdots
 - Corrigir $e^{l-2} \leftarrow e^{l-2} + \mathcal{P}_{l-3}^{l-2}(e^{l-3})$,
 - Relaxar $A^{l-2}e^{l-2} = R^{l-2}$, η vezes com aproximação inicial e^{l-2}
 - Corrigir $e^{l-1} \leftarrow e^{l-1} + \mathcal{P}_{l-2}^{l-1}(e^{l-2})$,
 - Relaxar $A^{l-1}e^{l-1} = R^{l-1}$, η vezes com aproximação inicial e^{l-1}
 - Corrigir $e^l \leftarrow e^l + \mathcal{P}_{l-1}^l(e^l)$,
 - Relaxe $A^l \bar{\phi} = B^l$, η vezes com aproximação inicial $\bar{\phi}^l \leftarrow \bar{\phi}^l + e^l$
-

5.2 Método Muligrid na Malha Composta

Quando se trata de malhas refinadas localmente, o Método Multigrid aqui aplicado é denominado de Método Multigrid-Multinível, pois a metodologia multigrid não atua

apenas nas malhas seqüencialmente mais grossas (níveis virtuais) mas também passa a atuar no níveis “físicos” de refinamento, ou seja, nos níveis seqüencialmente mais finos a partir da malha base. A Fig. 5.7 ilustra de forma esquemática os níveis físicos e virtuais definidos para à aplicação do Método Multigrid-Multinível. Observa-se que $l \geq 3$ definem os níveis físicos, onde a equação residual, os processos de prolongamento e restrição também são aplicados nestes níveis.

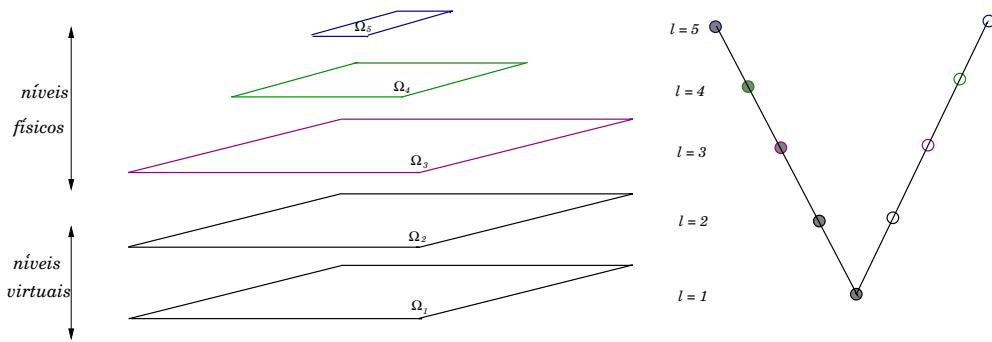


Figura 5.7: Representação esquemática dos níveis físicos e virtuais para uma malha refinada localmente.

Se malhas refinadas localmente são utilizadas, espera-se que a solução nestas malhas finas apresente maior precisão que nas malhas grossas. Isto leva ao conceito de duas regiões: uma região *válida*, a qual *não* está coberta por malhas mais finas e uma região *composta*, a qual está coberta por malhas mais finas. No entanto, durante o processo computacional, cada malha é tratada separadamente como se fosse uma única malha. Dessa forma obtém-se uma solução para todas as células. Ao final do processo se uma determinada célula pertence a uma região composta então ela é recoberta pelos valores da malha fina através de média simples (MARTIN, 1998).

5.2.1 Equação Elíptica na Malha Composta

Para discretizações advindas de equações elípticas ou hiperbólicas onde variáveis centradas são utilizadas, alguns cuidados precisam ser tomados nas regiões que contém as interfaces entre as malhas finas e grossas de forma a se obter a precisão desejada.

Para uma melhor compreensão do que ocorre na interface fina/grossa Martin e Cartwright (1996) propuseram o seguinte teste: obter a solução de $\nabla^2\phi^l = B^l$, onde B^l é a média de B^{l+1} . Com a solução em Ω^l obtida, interpola-se os valores provenientes de Ω^l

para preencher somente as bordas de Ω^{l+1} de forma a se obter as condições de contorno na malha fina. Após isso, se a solução de $\nabla^2\phi^{l+1} = B^{l+1}$ é obtida, verifica-se a mesma precisão que foi anteriormente observada no nível l , o qual não é o esperado pois a precisão da malha foi aumentada. Os autores afirmam que apesar de ϕ ser contínua para a interface entre os dois domínios Ω^l e Ω^{l+1} , $\frac{\partial\phi}{\partial n}$ não é contínua para a interface. Assim, esta aproximação transfere informações apenas da malha grossa para a malha fina e não da malha fina para a malha grossa. Em outras palavras, a malha grossa não “sente” os efeitos da malha fina.

Para melhor compreender a descontinuidade de $\frac{\partial\phi}{\partial n}$ na interface fina/grossa, traça-se um volume de controle ao redor de uma região que contenha células da malha grossa e da malha fina. O operador divergente deve satisfazer a seguinte identidade, advinda do teorema da divergência (STRIKWERDA, 1989)

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{f} = \int_{\delta\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{n}, \quad (5.18)$$

$$h_l^2 \sum_{i,j} (D \cdot \mathbf{f})_{ij} = h_l \sum_m (\mathbf{f} \cdot \mathbf{n})_m, \quad (5.19)$$

onde D é o operador divergente discretizado, h é o espaçamento da malha, tal que $h = \Delta x = \Delta y$ e o índice l denota o nível em análise. $\mathbf{f} = (f_x, f_y)$ é o fluxo a partir de uma variável centrada (e.g. ϕ), os índices i e j denotam as células pertencentes ao domínio Ω e o índice m denotam as células que estão no contorno do volume de controle. Analisando esta discretização sobre a Fig. 5.8, tem-se

$$\begin{aligned} \sum (D \cdot \mathbf{f}) h_l^2 &= \frac{f_{x_{I+\frac{1}{2},j}} - f_{x_{I-\frac{1}{2},j}}}{h_l} h_l^2 + \frac{f_{y_{I,j+\frac{1}{2}}} - f_{y_{I,j-\frac{1}{2}}}}{h_l} h_l^2 + \\ &\quad \frac{f_{x_{i+\frac{1}{2},j}} - f_{x_{i-\frac{1}{2},j}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2 + \frac{f_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} - f_{y_{i,j-\frac{1}{2}}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2 + \\ &\quad \frac{f_{x_{i+\frac{1}{2},j+1}} - f_{x_{i-\frac{1}{2},j+1}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2 + \frac{f_{y_{i,j+\frac{3}{2}}} - f_{y_{i,j+\frac{1}{2}}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2 + \\ &\quad \frac{f_{x_{i+\frac{3}{2},j+1}} - f_{x_{i+\frac{1}{2},j+1}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2 + \frac{f_{y_{i+1,j+\frac{3}{2}}} - f_{y_{i+1,j+\frac{1}{2}}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2 + \\ &\quad \frac{f_{x_{i+\frac{3}{2},j}} - f_{x_{i+\frac{1}{2},j}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2 + \frac{f_{y_{i+1,j+\frac{1}{2}}} - f_{y_{i+1,j-\frac{1}{2}}}}{h_{l+1}} h_{l+1}^2, \end{aligned} \quad (5.20)$$

Fazendo as devidas simplificações na Eq. (5.20) e considerando que $h_l = 2h_{l+1}$, resulta

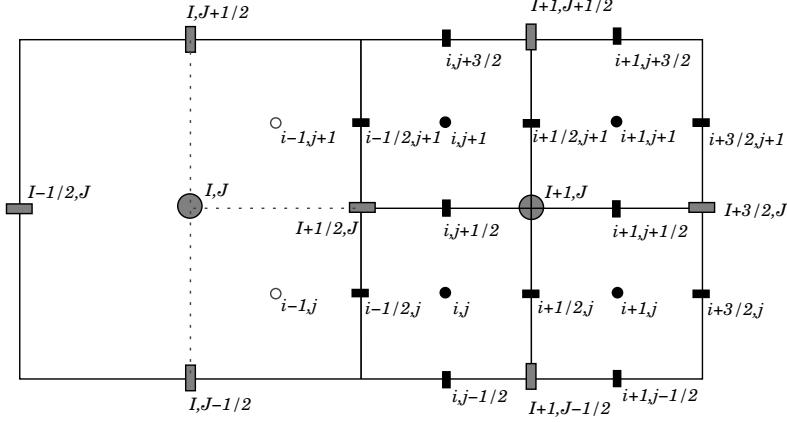


Figura 5.8: Exemplo de uma parte da malha composta contendo um interface fina/grossa.

em

$$\sum(D \cdot \mathbf{f})h_l^2 = \left[\left(\frac{f_{y_{i,j+\frac{3}{2}}} + f_{y_{i+1,j+\frac{3}{2}}}}{2} \right) - \left(\frac{f_{y_{i,j-\frac{1}{2}}} + f_{y_{i+1,j-\frac{1}{2}}}}{2} \right) + \left(\frac{f_{x_{i+\frac{3}{2},j+1}} + f_{x_{i+\frac{3}{2},j}}}{2} \right) - f_{x_{I-\frac{1}{2},J}} + f_{y_{I,J+\frac{1}{2}}} - f_{y_{I,J-\frac{1}{2}}} \right] h_l, \quad (5.21)$$

de onde observa-se que o “fechamento” do balanço dos fluxos no contorno só é possível, ou seja, a Eq. (5.19) só é verdadeira, se

$$f_{x_{I+\frac{1}{2},J}} = \frac{f_{x_{i-\frac{1}{2},j}} + f_{x_{i-\frac{1}{2},j+1}}}{2}. \quad (5.22)$$

Devido a este comportamento do fluxo na interface fina/grossa é necessário redefinir o operador Laplaciano $L(\phi)$ nas interfaces da malha composta. Para regiões fora desta interface o operador Laplaciano se comporta da mesma forma como discretizado na malha uniforme. Assim tem-se

$$(\nabla^2\phi)_{I,J}^l = \frac{\phi_{I+1,J}^l + \phi_{I-1,J}^l - 4\phi_{I,J}^l + \phi_{I,J+1}^l + \phi_{I,J-1}^l}{h_l^2}, \quad em \quad \Omega^l \quad (5.23)$$

$$(\nabla^2\phi)_{i,j}^{l+1} = \frac{\phi_{i+1,j}^{l+1} + \phi_{i-1,j}^{l+1} - 4\phi_{i,j}^{l+1} + \phi_{i,j+1}^{l+1} + \phi_{i,j-1}^{l+1}}{h_{l+1}^2}, \quad em \quad \Omega^{l+1} \quad (5.24)$$

onde Ω^l indentifica o domínio da malha grossa e Ω^{l+1} o domínio da malha fina.

Para definir o operador Laplaciano na malha composta, principalmente na interface fina/grossa, é necessário defini-lo em função da diferença de fluxos, utilizando um volume de controle ao redor de cada célula. O operador Laplaciano pode então ser escrito em função da diferença de fluxos para uma variável centrada como $\nabla^2\phi = \nabla \cdot \mathbf{f}$, tal que

$\mathbf{f} = \nabla\phi$. Na forma discretizada, o Laplaciano passa então a ser dado, em qualquer nível de refinamento por

$$\begin{aligned} (\nabla^2\phi)_{i,j} &= (\nabla \cdot \mathbf{f})_{ij}, \\ &= \frac{f_{x_{i+\frac{1}{2},j}} - f_{x_{i-\frac{1}{2},j}} + f_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} - f_{y_{i,j-\frac{1}{2}}}}{h}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{f} &= \nabla\phi, \\ f_{x_{i+\frac{1}{2},j}} &= \frac{1}{h}(\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}), \\ f_{x_{i-\frac{1}{2},j}} &= \frac{1}{h}(\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}), \\ f_{y_{i,j+\frac{1}{2}}} &= \frac{1}{h}(\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}), \\ f_{y_{i,j-\frac{1}{2}}} &= \frac{1}{h}(\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}), \end{aligned} \quad (5.26)$$

tal que i e j representam qualquer domínio.

Tomando-se novamente um volume de controle ao redor de uma célula pertencente a malha grossa adjacente a uma interface fina/grossa e somando-se os fluxos que cruzam esta interface, tem-se a seguinte discretização para a região da interface fina/grossa referente a Fig. 5.8

$$\nabla^2\phi_{I,J} = \frac{f_{x_{I+\frac{1}{2},J}}^{*l} - f_{x_{I-\frac{1}{2},J}}^l + f_{y_{I,J+\frac{1}{2}}}^l - f_{y_{I,J-\frac{1}{2}}}^l}{h_l}, \quad (5.27)$$

tal que,

$$f_{x_{I+\frac{1}{2},J}}^{*l} = \frac{1}{2}(f_{x_{i-\frac{1}{2},j+1}}^{l+1} + f_{x_{i-\frac{1}{2},j}}^{l+1}), \quad (5.28)$$

e

$$f_{x_{i-\frac{1}{2},j+1}}^{l+1} = \frac{\phi_{i-1,j+1}^{l+1} - \phi_{i,j+1}^{l+1}}{h_{l+1}}, \quad (5.29)$$

$$f_{x_{i-\frac{1}{2},j}}^{l+1} = \frac{\phi_{i-1,j}^{l+1} - \phi_{i,j}^{l+1}}{h_{l+1}}, \quad (5.30)$$

onde os índices I e J identificam as células pertencentes a malha grossa, i e j são os índices das células localizadas na malha fina. É importante observar que para as Eqs. (5.29) e (5.30), os valores de $\phi_{i-1,j=1}$ e $\phi_{i-1,j}$ são células fantasma, ou seja, são valores provenientes de interpolações quadráticas entre as malhas grossa e fina conforme visto na Secção 4.4.2.

5.2.2 Processo Iterativo no Método Multigrid-Multinível

Tendo definido o tratamento dos fluxos nas interfaces para uma malha composta, um algoritmo para a malha composta utilizando o *Ciclo – V* pode ser introduzido. O algoritmo descrito aqui é uma extensão lógica do algoritmo multigrid descrito na Seção 5.1.3. O algoritmo usado aqui é o mesmo apresentado por Mantin (1998) e Roma (1996) e descreve de forma simplificada a aplicação do Método Multigrid-Multinível para uma variável centrada, considerando escoamentos incompressíveis. Algoritmos similares também tem sido usado para escoamentos compressíveis (DUDEK, 1996).

Como já citado anteriormente a equação que se deseja resolver é

$$A\phi = B, \quad (5.31)$$

ou referindo-se as discretizações apresentadas acima

$$L(\phi) = B, \quad (5.32)$$

onde $L(\phi)$ é o operador Laplaciano.

Para cada nível de refinamento $l = 1$ a $l = l_{top}$, os valores de ϕ^l , B^l são armazenados em cada nível, sendo que B^l é definido somente em $\Omega^l - \Omega^{l-1}$, ou seja, apenas na região em que a malha grossa *não* está coberta pela malha fina. Considerando que a formulação de equação residual está sendo usada, para cada nível é necessário definir o resíduo R^l e a correção e^l em todo domínio, inclusive na região coberta pela malha fina, ou seja, na região *composta*.

Como citado na seção anterior, o operador Laplaciano na malha composta é definido na região distante da interface Ω^l , tratado da mesma forma que na malha uniforme e na região ao longo da interface fina/grossa $\delta\Omega^l$, o qual é definido em função da diferença de fluxo. Vale ressaltar, que as células fantasma ao redor da interface fina/grossa é obtida por meio de interpolações quadráticas entre as malhas grossa e fina.

Da mesma forma que na malha uniforme, é necessário também um operador de relaxação o qual realiza η relaxações na equação de Poisson. Assim define-se $GSRB(e^l, R^l, h^l)$ em Ω^l , o qual realiza η relaxações com o método *Gauss-Seidel Red-Black* em um dado nível l . Este operador não tem informação nenhuma sobre o outro nível ou sobre outra malha do mesmo nível, entretanto deve-se utilizar os operadores e as condições de contorno apropriadas para realizar a relaxação em cada nível.

Para cada nível, o resíduo possui duas componentes. Primeiro, como na malha uniforme, o resíduo no nível l que advém de um resíduo do nível mais fino por meio do processo de restrição. Assim, este resíduo é definido apenas na região do nível l que está coberto pelo nível $l+1$, ou seja, em $P(\Omega_l^{l+1})$ o qual define a região de projeção do nível $l+1$ em l . Em adição a este resíduo, há o resíduo definido na região que não está coberta pela malha do nível mais fino, ou seja, em $\Omega^l - \Omega^{l+1}$. Baseando-se nisto, tem-se os seguintes cálculos de resíduos:

- No nível mais fino, para $l = l_{top}$

$$R^{l_{top}} \leftarrow B^{l_{top}} - L^{l_{top}}(\bar{\phi}^{l_{top}}). \quad (5.33)$$

- Na região do nível l coberto pelo nível $l+1$

$$R^l \leftarrow \mathcal{R}_l^{l+1}(R^{l+1} - L^{l+1}(e^{l+1})). \quad em \quad P(\Omega_l^{l+1}), \quad (5.34)$$

- Na região do nível l que não está coberto pelo nível $l+1$

$$R^l \leftarrow B^{l-1} - L^l(\bar{\phi}^l), \quad em \quad \Omega^l - \Omega^{l+1}. \quad (5.35)$$

O Algoritmo 5.2, o qual apresenta o Método Multigrid-Multinível para uma quantidade máxima de níveis igual a l_{top} , é estruturado da mesma forma que o Algoritmo 5.1 para malha uniforme, onde o processo se inicia no nível mais fino $l = l_{top}$. Nas malhas progressivamente mais grossas realiza-se a relaxação, resolve-se a equação residual até o nível $l = 1$ e finalmente em sentido contrário interpola e relaxa novamente. A diferença é que para este caso, a forma como os operadores são aplicados não é a mesma para todo o nível l . Os processos de interpolação e atualização da correção também são idênticos ao aplicado na malha uniforme.

Quando se considera variáveis deslocadas, não mais faz sentido em se falar em fluxos nas interfaces fina/grossa. Assim, nenhum tratamento diferenciado é aplicado para o Laplaciano na interface fina/grossa e a mesma estrutura apresentada no Algoritmo 5.2 é aplicada para malhas com refinamento localizado utilizando variáveis deslocadas.

 5.2: Multigrid-Multinível para o Ciclo- V

```

for  $l = l_{top}$  a 1 do
  if  $l = l_{top}$  then
     $e^{l_{top}} = 0$ 
    Calcule  $L(\bar{\phi})$ , em  $\Omega^{l_{top}}$ 
     $R^{l_{top}} \leftarrow B^{l_{top}} - L(\bar{\phi})^{l_{top}}$  em  $\Omega^{l_{top}}$ 
     $e^{l_{top}} \leftarrow RBGS(A^{l_{top}}, e^{l_{top}}, R^{l_{top}})$  em  $\Omega^{l_{top}}$ 
  else
     $e_l = 0$ 
    Calcule  $L(\bar{\phi})^l$ , em  $\Omega^l$ 
    Calcule  $L(e)^l$ , em  $\delta\Omega^{l+1}$ 
     $R^l \leftarrow B^l - L(\bar{\phi})^l$ , em  $\Omega^l - \Omega^{l+1}$ 
     $R^l \leftarrow \mathcal{R}_l^{l+1}(R^l - L(e^l))$ , em  $P(\Omega_l^{l+1})$ 
     $e^l \leftarrow RBGS(A^l, e^l, R^l)$  em  $\Omega^l$ 
  end if
end for
for  $l = 2$  a  $l_{top}$  do
   $e^l \leftarrow e^l + \mathcal{P}_l^{l-1}(e_{l-1})$ 
   $e^l \leftarrow RBGS(A^l, e^l, R^l)$ 
   $\bar{\phi}^l \leftarrow \bar{\phi}^l + e^l$ 
end for

```

Capítulo 6

Resultados e Discussão

Neste capítulo, são apresentados os resultados de validação das implementações e de estudos de comportamento físico de escoamentos, utilizando-se modelagem matemática e simulação numérica. A solução do modelo matemático foi feita utilizando-se malhas uniformes e malhas adaptativas bloco-estruturadas, refinadas localmente, aplicadas à simulação de escoamentos incompressíveis transientes. Escoamentos bifásicos são também simulados via um Método Híbrido *Front-Tracking/Front-Capturing*.

A primeira seção destaca os elementos matemáticos usados para avaliar o comportamento da metodologia em termos quantitativos. Nela a ordem de convergência do método empregado é analizada. No intuito de validar as soluções das equações de Navier-Stokes com a metodologia descrita nos capítulos anteriores, simulações numéricas são realizadas para uma cavidade, de forma que, a partir do regime permanente, os resultados são comparados com resultados numéricos encontrados na literatura, os quais são apresentados na Seção 6.2. Na Seção 6.3, uma primeira análise é feita sobre a regularização dos pontos lagrangianos, que compõem uma fronteira imersa. Resultados qualitativos são então apresentados para interfaces submetidas a elevadas deformações.

Resultados numéricos são obtidos para bolhas ascendentes e comparados com o diagrama de Clift *et al.* (1978), sendo apresentados na Seção 6.4. Essa seção termina com os resultados obtidos para um caso de múltiplas bolhas.

6.1 Normas e Estudo de Convergência

No presente trabalho, são apresentadas simulações bidimensionais em um domínio rectangular $\Omega = [a, b] \times [c, d] \subset R^2$. Malhas estruturadas regulares, tanto uniformes como compostas são aplicadas e as variáveis do fluido são discretizadas numa célula MAC (FORTUNA, 2000). Nesta discretização, as variáveis que descrevem os campos escalares estão localizadas nos centros das células computacionais, enquanto que as componentes dos campos vetoriais estão localizadas nas suas faces.

Antes da apresentação dos resultados, é necessário descrever como a norma é calculada em uma malha uniforme e em uma malha composta e como o estudo de convergência é realizado.

Em uma malha MAC, três conjuntos de pontos podem ser diferenciados: o conjunto de pontos onde as variáveis escalares do fluido são calculadas, Ω_p^h ; o conjunto de pontos onde a primeira componente das variáveis vetoriais do fluido são calculados, Ω_u^h e o conjunto de pontos onde a segunda componente das variáveis vetoriais são calculados, Ω_v^h .

As normas euclidiana $\|\cdot\|_2$ e infinito $\|\cdot\|_\infty$ para as variáveis escalares ϕ podem ser definidas em Ω_p^h por

$$\|\phi\|_2 = \left(\sum_{k \in \Omega_p^h} |\phi_k|^q \Delta x \Delta y \right)^{1/2}, \quad (6.1)$$

$$\|\phi\|_\infty = \max_{k \in \Omega_p^h} |\phi_k|, \quad (6.2)$$

onde ϕ_k é avaliado no centro da célula k , cujas dimensões são Δy e Δx .

Para as componentes de uma variável vetorial definida numa malha composta, e.g. a componente u do vetor velocidade em Ω_u^h , as normas euclidiana e infinito são obtidas em função de “pesos específicos” a_i , dependentes da localização da variável na malha composta. Essas expressões são dadas por

$$\|u\|_2 = \left(\sum_{i \in \Omega_u^h} |u_i|^2 a_i \right), \quad (6.3)$$

$$\|u\|_\infty = \max_{i \in \Omega_u^h} \{|u_i|\}, \quad (6.4)$$

onde,

$$a_i = \begin{cases} \Delta x \Delta y, & \text{na malha grossa } l, \\ \frac{\Delta x \Delta y}{r^2}, & \text{na malha fina } l + 1, \\ \frac{(2r+1)\Delta x \Delta y}{r^2}, & \text{nas interfaces fina/grossa,} \end{cases} \quad (6.5)$$

sendo $r = 2$ a razão de refinamento entre os níveis l e $l + 1$. As normas euclidiana e infinito para a componente v são definidas de forma análoga à Eq. (6.3) e Eq. (6.4).

Para analisar numericamente a convergência do método, é suposto que a solução fornecida por ele tenha expansão assintótica nas potências do espaçamento da malha. Nas malhas uniformes empregadas, por exemplo, com $h = \Delta x = \Delta y$, a função escalar ϕ tem solução numérica $\phi(\mathbf{x}, t, h)$ a qual, por hipótese, pode ser escrita na forma assintótica

$$\phi(\mathbf{x}, t, h) = \phi_e(\mathbf{x}, t) + E_q(\mathbf{x}, t)h^q + E_{q+1}(\mathbf{x}, t)h^{q+1} + \dots$$

para h suficientemente pequeno, onde $\phi_e(\mathbf{x}, t)$ é a solução exata e os coeficientes $E_i(\mathbf{x}, t)$, $i = q, q + 1, \dots$, são independentes de h .

Se a solução exata é conhecida, após ter sido encontrada a solução aproximada $\phi(\mathbf{x}, t, h)$ para algum h , calcula-se para o mesmo ponto (\mathbf{x}, t) a aproximação $\phi(\mathbf{x}, t, h/2)$. Assim obtém-se, em primeira aproximação,

$$\phi(\mathbf{x}, t, h) \approx \phi_e(\mathbf{x}, t) + E_q(\mathbf{x}, t)h^q, \quad (6.6)$$

$$\phi(\mathbf{x}, t, h/2) \approx \phi_e(\mathbf{x}, t) + E_q(\mathbf{x}, t)\frac{h^q}{2^q}. \quad (6.7)$$

Das duas aproximações anteriores, os erros entre a solução exata e as aproximadas para malhas de espaçamentos h e $h/2$, satisfazem a razão

$$r_e = \frac{\|\phi(\mathbf{x}, t, h) - \phi_e(\mathbf{x}, t)\|}{\|\phi(\mathbf{x}, t, h/2) - \phi_e(\mathbf{x}, t)\|} \approx 2^q, \quad (6.8)$$

com $\|\cdot\|$ representando a norma dada por (6.1) ou (6.2). Para obter a ordem de convergência q em (6.8), basta tomar

$$\log_2 r_e \approx q. \quad (6.9)$$

Fazendo-se o uso de (6.8), tem-se que a razão entre os erros, nas malhas de espaçamentos h e $h/2$, para métodos de ordem $q = 1, 2$ e 3 , devem ser aproximadamente $2, 4$ e 8 , respectivamente.

Esta estimativa é usada nos testes apresentados a seguir para determinar a ordem de convergência das variáveis discretas que compõem o modelo matemático.

6.1.1 Validação da Metodologia por Ordem de Convergência

A análise de convergência permite verificar comportamento de convergência do código implementado. Dessa forma, as equações parabólica e elíptica passam por esta análise.

Nesta seção, são apresentadas as análises de convergência para as equações de Navier-Stokes e equação elíptica com três possíveis condições de contorno: periódicas, Dirichlet e Neumann, considerando as propriedades do fluido (massa específica e viscosidade) variáveis ou não. A condição de contorno de Dirichlet consiste na aplicação direta do valor da variável no bordo do domínio. Neumann por sua vez, é a derivada da variável na direção normal à parede na qual está sendo aplicada a condição de contorno. As condições são tratadas para estes casos de forma pura, ou seja, uma mesma condição de contorno (e.g periódica) é aplicada em todas as direções.

Os resultados de convergência são então apresentados para uma malha uniforme na qual o nível base é dividido em três blocos, permitindo que se verifique a comunicação entre as malhas. A malha composta é definida com apenas 2 níveis de refinamento. Vale ressaltar que a análise de convergência é feita reduzindo-se o espaçamento da malha à metade o que, consequentemente, eleva ao dobro o número de células. A Fig. 6.1 permite visualizar a malha uniforme adotada a qual contém apenas um nível, l_{base} . A malha composta com dois níveis de refinamento é apresentada na Fig. 6.2, a qual tem duas malhas independentes, 28×24 e 20×16 .

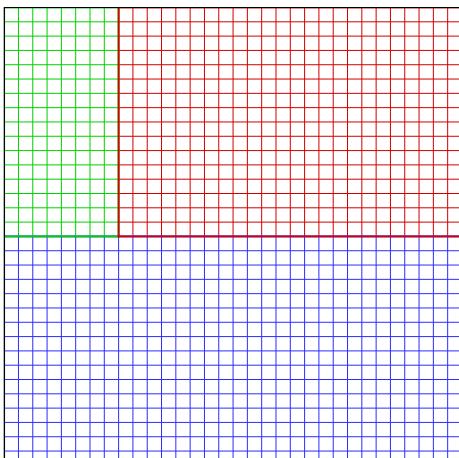


Figura 6.1: Malha uniforme com o nível base dividido em 3 blocos, 32×16 , 8×16 , 24×16 .

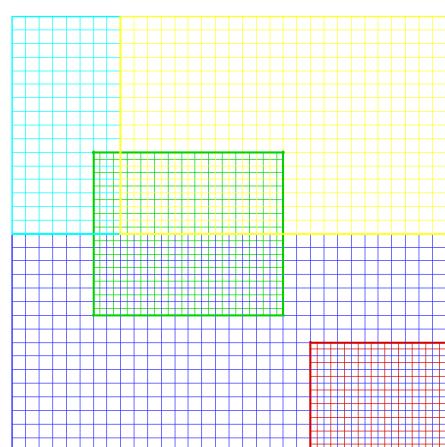


Figura 6.2: Malha composta com dois níveis de refinamento, 32×16 , 8×16 , 24×16 L2.

6.1.1.1 Equação Elíptica para Correção de Pressão

Devido ao tratamento diferenciado que é dado na implementação da equação elíptica pelo método multigrid-multinível, os resultados de análise de convergência para essa equação são aqui apresentados.

Considera-se que as funções são conhecidas para as variáveis ϕ e ρ . Assim, denota-se por ϕ_e e ρ_e as variáveis exatas, ou funções previamente conhecidas. Reescrevendo a equação elíptica apresentada pela Eq. (4.24), tem-se

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla \phi \right) = f, \quad (6.10)$$

onde ϕ é a solução numérica e f é termo direito desta equação, o qual é conhecido como termo forçante, pois ele “força” a solução da Eq. 6.10 em direção à solução conhecida, ρ_e e ϕ_e . Conhecendo-se as funções exatas empregadas para ϕ e ρ , o termo forçante é dado por:

$$f = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \phi_e}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \phi_e}{\partial y} \right). \quad (6.11)$$

Os testes a seguir são aplicados para condições de contorno periódicas, de Neumann e de Dirichlet. A análise de convergência para massa específica variável é aqui realizada utilizando-se condições de contorno periódicas. Para as demais, a massa específica é considerada constante e igual a 1,0.

- Soluções utilizadas para os casos de condições de contorno tipo Neumann e periódicas em todas as direções.

$$\phi_e = \frac{\cos(2\pi x) \cdot \sin(2\pi y)}{2\pi}, \quad (6.12)$$

$$\rho_e = 1.0 + k [\sin(2\pi x) \cdot \sin(2\pi y)]^2, \quad (6.13)$$

onde k é uma constante. Para massa específica constante $k = 0$ e para massa específica variável é igual a 1.

O termo forçante da Eq. (6.11) é dado por

$$f = 4 \frac{(\sin(2\pi x))^2 (\sin(2\pi y))^3 k \cos(2\pi x) \pi}{(1 + k (\sin(2\pi x))^2 (\sin(2\pi y))^2)^2} - 4 \frac{\cos(2\pi x) \pi \sin(2\pi y)}{1 + k (\sin(2\pi x))^2 (\sin(2\pi y))^2} \\ - 4 \frac{\cos(2\pi x) \pi \sin(2\pi y) (\cos(2\pi y))^2 k (\sin(2\pi x))^2}{(1 + k (\sin(2\pi x))^2 (\sin(2\pi y))^2)^2}. \quad (6.14)$$

É importante notar, uma vez que f é determinada, a EDP é resolvida numericamente para ϕ e seu resultado é comparado com a solução exata ϕ_e .

- Equações utilizadas para os casos onde as condições de contorno são do tipo Dirichlet em todas as direções.

$$\phi_e = 2x^3 - 3y^3, \quad (6.15)$$

$$\rho_e = 1.0, \quad (6.16)$$

$$f = 12x - 18y. \quad (6.17)$$

A Tabela 6.1 mostra os resultados de convergência nas malhas uniforme e composta em um domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$, ilustrados nas Figs. 6.1 e 6.2, utilizando-se condições de contorno de Neumann com $\rho_e = 1$. A análise de erro começa em uma malha 16×8 , 4×8 e 12×8 formando um conjunto de 16×16 células. O refinamento é duplicado para posteriores análises, finalizando com malhas contendo 256×128 , 64×128 , e 192×128 as quais formam um conjunto de 256×256 células. O mesmo raciocínio é aplicado à malha composta. A segunda coluna desta tabela apresenta a quantidade de ciclos V (NC) empregados no cálculo. A razão r_e entre os erros calculados na segunda coluna, é dada pela norma euclidiana, tal que ϕ identifica a solução numérica e ϕ_e a solução exata. O resíduo do método multigridding-multinível é mostrado na última coluna.

Resultados para condições de contorno periódicas e de Dirichlet com massa específica constante são mostrados nas Tabelas 6.2 e 6.3, respectivamente. O número de ciclos V , o erro encontrado pela diferença entre a solução numérica e a solução exata, a razão entre os erros e o resíduo do multigrid podem ser verificados. A Tabela 6.4 mostra os testes de convergência para condições de contorno periódicas e massa específica variável, com o valor de k (Eq. 6.13) igual a 1,0. Ambos os testes apresentaram segunda ordem de convergência, tanto para massa específica variável como para a massa específica constante. Uma restrição deve ser aqui observada quanto a variação do valor de k na Eq. (6.13), pois para valores maiores que 5 não foi possível verificar a estabilidade no método multigridding-multinível.

Malha uniforme					Malha composta				
Malha t_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo	Malha t_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo
16×16	15	0.122e-02	-	0.666e-08	16×16	15	0.362e-04	-	0.696e-08
32×32	15	0.302e-03	4.03	0.330e-08	32×32	15	0.899e-05	4.02	0.868e-08
64×64	17	0.755e-04	4.00	0.812e-08	64×64	17	0.224e-05	4.00	0.409e-08
128×128	19	0.188e-04	4.00	0.404e-08	128×128	19	0.560e-06	4.00	0.537e-08
256×256	20	0.471e-05	4.00	0.540e-08	256×256	21	0.140e-06	4.00	0.264e-08

Tabela 6.1: Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno de Neumann e massa específica constante.

Malha uniforme					Malha composta				
Malha t_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo	Malha t_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo
16×16	12	0.103e-02	-	0.196e-08	16×16	12	0.875e-04	-	0.713e-08
32×32	12	0.256e-03	4.02	0.634e-08	32×32	13	0.235e-04	3.71	0.346e-08
64×64	12	0.639e-04	4.00	0.837e-08	64×64	13	0.589e-05	3.99	0.427e-08
128×128	12	0.159e-04	4.00	0.936e-08	128×128	13	0.147e-05	3.98	0.456e-08
256×256	12	0.399e-05	4.00	0.983e-08	256×256	13	0.370e-06	3.99	0.462e-08

Tabela 6.2: Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno periódicas e massa específica constante.

Malha uniforme					Malha composta				
Malha t_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo	Malha t_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo
16×16	13	0.312e-02	-	0.191e-08	16×16	13	0.299e-02	-	0.191e-08
32×32	13	0.789e-03	3.95	0.783e-08	32×32	13	0.757e-03	3.95	0.168e-08
64×64	14	0.198e-03	3.98	0.394e-08	64×64	14	0.190e-03	3.98	0.821e-08
128×128	15	0.495e-04	3.99	0.197e-08	128×128	15	0.475e-04	3.99	0.486e-08
256×256	15	0.123e-04	3.99	0.791e-08	256×256	16	0.118e-04	3.99	0.291e-08

Tabela 6.3: Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno de Drichlet em todas as direções e massa específica constante.

Malha uniforme					Malha composta				
Malha ι_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo	Malha ι_{base}	NC	$\ \phi - \phi_e\ _2$	r_e	resíduo
16×16	13	0.812e-03	-	0.668e-08	16×16	13	0.872e-04	-	0.359e-08
32×32	13	0.198e-03	4.08	0.460e-08	32×32	14	0.223e-04	3.89	0.196e-08
64×64	13	0.494e-04	4.02	0.758e-08	64×64	14	0.562e-05	3.98	0.319e-08
128×128	13	0.123e-04	4.00	0.910e-08	128×128	14	0.141e-05	3.98	0.358e-08
256×256	13	0.308e-05	4.00	0.964e-08	256×256	14	0.353e-06	3.99	0.367e-08

Tabela 6.4: Teste de convergência na malha uniforme (esquerda) e na malha composta (direita), usando condições de contorno periódicas e massa específica variável.

6.1.1.2 Equações de Navier-Stokes

Os testes aqui apresentados consideram as equações de Navier-Stokes, nas quais o termo gravitacional é desprezado, não permitindo a ação de qualquer outra força de corpo a não ser o termo forçante. As equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis são então dadas por

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{f}. \quad (6.18)$$

O termo forçante $\mathbf{f} = (f_x, f_y)$ é definido em função de soluções exatas previamente conhecidas para as variáveis u , v , ρ e μ , dadas por: u_e , v_e , ρ_e e μ_e . Assim o termo forçante é dado por

$$f_x = \rho_e \left[\frac{\partial u_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial u_e}{\partial x} + v_e \frac{\partial u_e}{\partial y} \right] + \frac{\partial p}{\partial x} - \left[\mu_e \left(\frac{\partial^2 u_e}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_e}{\partial y^2} \right) + \mu_e \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_e}{\partial x} + \frac{\partial v_e}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial \mu_e}{\partial x} \frac{\partial u_e}{\partial x} + \frac{\partial \mu_e}{\partial y} \left(\frac{\partial u_e}{\partial x} + \frac{\partial v_e}{\partial y} \right) \right], \quad (6.19)$$

$$f_y = \rho_e \left[\frac{\partial v_e}{\partial t} + u_e \frac{\partial v_e}{\partial x} + v_e \frac{\partial v_e}{\partial y} \right] + \frac{\partial p}{\partial y} - \left[\mu_e \left(\frac{\partial^2 v_e}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_e}{\partial y^2} \right) + \mu_e \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_e}{\partial x} + \frac{\partial v_e}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial \mu_e}{\partial y} \frac{\partial v_e}{\partial y} + \frac{\partial \mu_e}{\partial x} \left(\frac{\partial u_e}{\partial y} + \frac{\partial v_e}{\partial x} \right) \right]. \quad (6.20)$$

Uma seqüência de testes são realizados na malha composta e na malha uniforme. As Figs. 6.3 e 6.4 exemplificam os tipos de malhas usadas para análise de convergência. A malha uniforme é formada por 3 blocos, contendo inicialmente 32^2 células. Nos testes, ela é refinada progressivamente (64×64 , 128×128 , 256×256 e 512×512 células).

A malha composta se diferencia do exemplo anterior pela presença de malhas irmãs no nível mais refinado, as quais permitem verificar com maior detalhes a implementação dos procedimentos de comunicação entre as malhas.

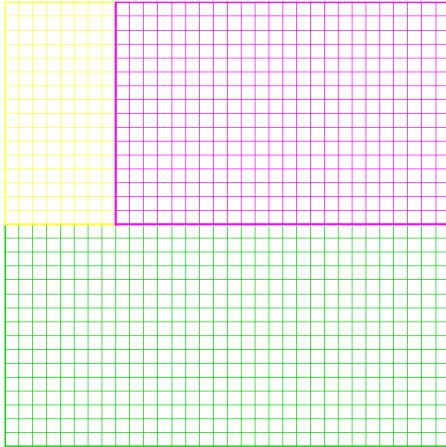


Figura 6.3: Malha uniforme com o nível base dividido em 3 blocos, 32×16 , 8×16 , 24×16 .

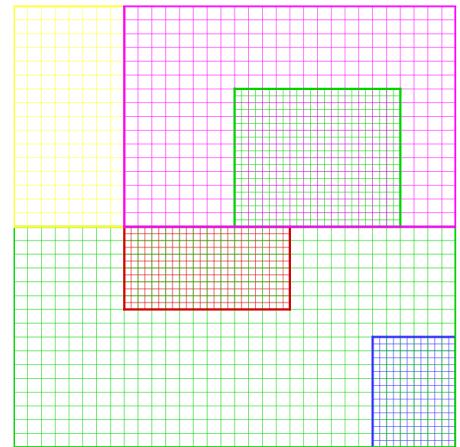


Figura 6.4: Malha composta com dois níveis de refinamento, 32×16 , 8×16 , 24×16 L2.

Os testes a seguir são definidos para analisar a convergência utilizando a Eq. (6.18). O primeiro exemplo permite utilizar condições de contorno puras e mistas para a velocidade e consequentemente para a correção de pressão. Assim tem-se:

- Nesse caso duas situações foram simuladas: para a primeira, condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e não homogêneas para Neumann são utilizadas para a pressão. Para a segunda, condições de contorno mistas, periódica na direção x e Dirichlet na direção y para as velocidades, periódica na direção x e Neumann na direção y para a pressão foram utilizadas. As soluções exatas são:

$$p_e = -\frac{w'(t)}{2\pi} \sin(2\pi(x - w(t)))(\sin(2\pi y) - 2\pi y + \pi) - \\ \mu_e = \cos(2\pi(x - w(t)))(-2 \sin(2\pi y) + 2\pi y - \pi), \quad (6.21)$$

$$u_e = \cos(2\pi(x - w(t)))(3y^2 - 2y), \quad (6.22)$$

$$v_e = 2\pi \sin(2\pi(x - w(t)))y^2(y - 1), \quad (6.23)$$

onde $w(t) = 1 + \sin(2\pi t^2)$ em $\Omega = [-1, 0; 0.8] \times [-1, 0; 0, 8]$. Para os casos em que as propriedades físicas do fluido são consideradas constantes, os valores da massa

específica e da viscosidade efetiva, ρ_e e μ_e , são iguais a 1,0. Para as propriedades físicas variáveis, as seguintes funções são aplicadas

$$\rho_e = 1 + [\sin(2\pi x) \sin(2\pi y)]^2 e^{-t}, \quad (6.24)$$

$$\mu_e = \mu_o + \rho_e C_s^2 \Delta x \Delta y \sqrt{2 \left[\left(\frac{\partial u_e}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_e}{\partial y} + \frac{\partial v_e}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_e}{\partial y} \right)^2 \right]}, \quad (6.25)$$

onde $\mu_o = 1$, $C_s = 0,1$ e Δx e Δy são os espaçamentos da malha euleriana nas direções x e y , respectivamente. Se malhas compostas são utilizadas, Δx e Δy correspondem ao nível mais fino.

Substituindo as funções (6.22) e (6.23) em (6.25), tem-se

$$\begin{aligned} \mu_e = \mu + \rho C_s \Delta x \Delta y & \left[8 (\sin(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2))))^2 \pi^2 (3y^2 - 2y)^2 + \right. \\ & 1.0 (\cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2))))(6y - 2) + 4\pi^2 \cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))y^2(y - 1)^2 + 2(4\pi \sin(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))y(y - 1) + \\ & \left. 2\pi \sin(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))y^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (6.26)$$

O termo forçante, usando as (6.21) - (6.23) e considerando as propriedades do fluido constantes, $\rho_e = 1$ e $\mu_e = 1$, é dado por

$$\begin{aligned} f_x = \rho_e & (8 \sin(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))\pi^2 \cos(2\pi t^2)t(3y^2 - 2y) - 2 \cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))(3y^2 - 2y)^2 \sin(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))\pi + 2\pi \sin(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))y^2(y - 1)\cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))(6y - 2) - 4\cos(2\pi t^2)t \\ & \cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))\pi(\sin(2\pi y) - 2\pi y + \pi) + 2\mu_e \sin(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))\pi - \mu_e(-4\cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))\pi^2(3y^2 - 2y) + 6\cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2))) - \mu_e(-4\cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))\pi^2(3y^2 - 2y) + 8\pi^2 \\ & \cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))y(y - 1) + 4\pi^2 \cos(2\pi(x - 1 - \sin(2\pi t^2)))y^2), \end{aligned} \quad (6.27)$$

$$\begin{aligned}
f_y = & \rho_e (-16 \pi^3 \cos(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) \cos(2 \pi t^2) t y^2 (y - 1) + 4 (\cos(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2)))^2 (3 y^2 - 2 y) \pi^2 y^2 (y - 1) + 2 \pi \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) y^2 (y - 1) \\
& (4 \pi \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) y (y - 1) + 2 \pi \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) y^2)) - \\
& 2 \cos(2 \pi t^2) t \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) (2 \cos(2 \pi y) \pi - 2 \pi) - \mu_e (-8 \pi^3 \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) y^2 (y - 1) + 4 \pi \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) (y - 1) + 8 \pi \\
& \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) y) - \mu_e (-2 \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) \pi (6 y - 2) + \\
& 4 \pi \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) (y - 1) + 8 \pi \sin(2 \pi (x - 1 - \sin(2 \pi t^2))) y)).
\end{aligned} \tag{6.28}$$

O segundo teste é analisado para condições periódicas, admitindo as propriedades do fluido constantes ou não. A função utilizada para a viscosidade variável é baseada na Eq. (3.41),

- Nesse casos de condições de contorno periódicas em todas as direções, com propriedades físicas do fluido constantes, $\rho_e = 1$ e $\mu_e = 1$, ou variáveis segundo as expressões. (6.24) e (6.25), são analisadas:

$$u_e = C 2 \pi \left[k_1 \sin(2 \pi k_2 x - 2 \pi k_1 y) - k_2 \sin(2 \pi k_1 x + 2 \pi k_2 y) \right] e^{-t}, \tag{6.29}$$

$$v_e = C 2 \pi \left[k_2 \sin(2 \pi k_2 x - 2 \pi k_1 y) + k_1 \sin(2 \pi k_1 x + 2 \pi k_2 y) \right] e^{-t}, \tag{6.30}$$

$$p_e = \frac{\cos(2 \pi x) \cos(2 \pi y)}{2 \pi} e^{-t}, \tag{6.31}$$

onde $C = 1/2 \pi (k_1^2 + k_2^2)^{1/2}$, $k_1 = 3$ e $k_2 = 4$.

Substituindo (6.29) - (6.31) em (6.25), tem-se

$$\begin{aligned}
\mu_e = & \mu_0 + \rho C_s \Delta x \Delta y \left[8 C^2 \pi^2 (2 k_1 \cos(2 \pi k_2 x - 2 \pi k_1 y) \pi k_2 \right. \\
& - 2 k_2 \cos(2 \pi k_1 x + 2 \pi k_2 y) \pi k_1)^2 (e^{-t})^2 + 1,0 (2 C \pi (-2 k_1^2 \cos(2 \pi k_2 x \\
& - 2 \pi k_1 y) \pi - 2 k_2^2 \cos(2 \pi k_1 x + 2 \pi k_2 y) \pi) e^{-t} + 2 C \pi (2 k_2^2 \cos(2 \pi k_2 x \\
& - 2 \pi k_1 y) \pi + 2 k_1^2 \cos(2 \pi k_1 x + 2 \pi k_2 y) \pi) e^{-t})^2 + 8 C^2 \pi^2 (-2 k_1 \\
& \left. \cos(2 \pi k_2 x - 2 \pi k_1 y) \pi k_2 + 2 k_2 \cos(2 \pi k_1 x + 2 \pi k_2 y) \pi k_1 \right)^2 (e^{-t})^2 \right]^{\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{6.32}$$

Os termos forçantes para as equações acima são aqui escritos para as propriedades

do fluido constantes. Esses termos são dados por

$$\begin{aligned}
f_x = & \rho_e (-2C\pi(k_1 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y) - k_2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y))e^{-t} + 4C^2\pi^2 \\
& (k_1 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y) - k_2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y))(e^{-t})^2(2k_1 \cos(2\pi k_2 x \\
& - 2\pi k_1 y)\pi k_2 - 2k_2 \cos(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi k_1) + 4C^2\pi^2(k_2 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y) \\
& + k_1 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y))(e^{-t})^2(-2k_1^2 \cos(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y)\pi - 2k_2^2 \cos(2\pi k_1 x \\
& + 2\pi k_2 y)\pi) - \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)e^{-t} - \mu_e (2C\pi(-4k_1 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y)\pi^2 k_2^2 \\
& + 4k_2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2 k_1^2)e^{-t} + 2C\pi(-4k_1^3 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y)\pi^2 \\
& + 4k_2^3 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2)e^{-t}) - \mu_e (2C\pi(-4k_1 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y)\pi^2 k_2^2 \\
& + 4k_2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2 k_1^2)e^{-t} + 2C\pi(4k_1 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y)\pi^2 k_2^2 \\
& - 4k_2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2 k_1^2)e^{-t}),
\end{aligned} \tag{6.33}$$

$$\begin{aligned}
f_y = & \rho_e (-2C\pi(k_2 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y) + k_1 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y))e^{-t} + 4C^2\pi^2 \\
& (k_1 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y) - k_2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y))(e^{-t})^2(2k_2^2 \cos(2\pi k_2 x \\
& - 2\pi k_1 y)\pi + 2k_1^2 \cos(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi) + 4C^2\pi^2(k_2 \sin(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y) + \\
& k_1 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y))(e^{-t})^2(-2k_1 \cos(2\pi k_2 x - 2\pi k_1 y)\pi k_2 + 2k_2 \\
& \cos(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi k_1)) + \cos(2\pi x)\cos(2\pi y)e^{-t} - \mu_e (2C\pi(-4k_2^3 \sin(2\pi k_2 x \\
& - 2\pi k_1 y)\pi^2 - 4k_1^3 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2)e^{-t} + 2C\pi(-4k_1^2 \sin(2\pi k_2 x \\
& - 2\pi k_1 y)\pi^2 k_2 - 4k_2^2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2 k_1)e^{-t}) - \mu_e (2C\pi(4k_1^2 \sin(2\pi k_2 x - \\
& 2\pi k_1 y)\pi^2 k_2 + 4k_2^2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2 k_1)e^{-t} + 2C\pi(-4k_1^2 \sin(2\pi k_2 x - \\
& 2\pi k_1 y)\pi^2 k_2 - 4k_2^2 \sin(2\pi k_1 x + 2\pi k_2 y)\pi^2 k_1)e^{-t}).
\end{aligned} \tag{6.34}$$

Os resultados para o primeiro teste, considerando condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão em todas as direções, são apresentados nas Tabelas 6.5 a 6.8. As Tabelas 6.5 e 6.6 mostram os testes de convergência considerando as propriedades do fluido constantes. Para propriedades variáveis do fluido dadas por (6.24) e (6.25), os resultados para a malha uniforme são apresentados na Tabela 6.7 e para a malha composta na Tabela 6.8. Em ambas as tabelas, verifica-se segunda ordem de convergência para as velocidades e, no mínimo, primeira ordem de convergência para a pressão. A razão de convergência também é verificada para o divergente da velocidade

$(\nabla \cdot \mathbf{u})$ na malha composta, o qual também assegura segunda ordem. Para a malha uniforme esse valor não é analisado devido a sua ordem de grandeza, o qual apresenta valores extremamente pequenos, atingindo muitas vezes a precisão da máquina (10^{-16}).

Para condições de contorno mistas, os resultados são apresentados na Tabela 6.9, empregando malha uniforme e na Tabela 6.10, empregando malha composta, considerando as propriedades do fluido constantes. Para tal, considera-se condições periódicas na direção horizontal x e de Dirichlet na direção vertical y para as velocidades. Conseqüentemente, para a pressão tem-se periódica na direção horizontal e Neumann na direção vertical. A convergência de segunda ordem é assegurada para as velocidades e para o divergente em ambas as malhas e, no mínimo, primeira ordem de convergência para a pressão.

Testes de convergência para condições de contorno periódicas são observados nas Tabelas 6.11 - 6.14 utilizando o norma Euclidiana. As Tabelas 6.11 e 6.12 consideram as propriedades do fluido constantes, enquanto que as Tabelas 6.13 e 6.14 admitem propriedades físicas variáveis, analisadas em malhas uniformes e compostas, respectivamente. Ao se considerar condições de contorno periódicas puras verifica-se que a ordem de convergência para a pressão na malha uniforme é de segunda ordem, enquanto que na malha composta no mínimo primeira ordem de convergência é assegurada. Para ambos os casos segunda ordem de convergência é assegurada para as velocidades e seus divergentes e no mínimo primeira ordem de convergência é assegurada para a pressão.

Malha uniforme							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ u - u_e\ _2$	4.2145e-03	3.78	1.1142e-03	3.87	2.8757e-04	3.96	7.2607e-05
$\ v - v_e\ _2$	4.5268e-03	3.82	1.1845e-03	3.90	3.0397e-04	3.96	7.6836e-05
$\ p - p_e\ _2$	1.5454e-01	3.13	4.9349e-02	3.57	1.3825e-02	3.48	3.9741e-03

Tabela 6.5: Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas constantes.

Malha composta							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ \nabla \cdot \mathbf{u}\ _2$	9.6413e-06	4.0	2.4101e-06	4.0	6.0250e-07	4.0	1.5065e-07
$\ u - u_e\ _2$	1.0970e-03	3.87	2.8362e-04	3.95	7.1842e-05	3.98	1.8057e-05
$\ v - v_e\ _2$	1.1443e-03	3.89	2.9444e-04	3.95	7.4606e-05	3.98	1.8727e-05
$\ p - p_e\ _2$	4.1720e-02	3.58	1.1645e-02	3.29	3.5391e-03	2.89	1.2230e-03

Tabela 6.6: Teste de convergência na malha composta para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas constantes.

Malha uniforme							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ u - u_e\ _2$	4.1282e-03	3.84	1.0739e-03	3.87	2.7764e-04	3.95	7.0208e-05
$\ v - v_e\ _2$	4.3618e-03	3.81	1.1446e-03	3.88	2.9485e-04	3.95	7.4654e-05
$\ p - p_e\ _2$	1.4229e-01	3.15	4.5194e-02	3.59	1.2595e-02	3.51	3.5840e-03

Tabela 6.7: Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas variáveis.

Malha composta							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ \nabla \cdot \mathbf{u}\ _2$	9.6413e-06	4.0	2.4101e-06	4.0	6.0250e-07	4.0	1.5065e-07
$\ u - u_e\ _2$	1.0641e-03	3.87	2.7522e-04	3.96	6.9570e-05	3.99	1.5062e-05
$\ v - v_e\ _2$	1.1168e-03	3.88	2.8796e-04	3.96	7.2779e-05	4.0	1.8180e-05
$\ p - p_e\ _2$	3.8148e-02	3.59	1.0622e-02	3.29	3.2242e-03	2.85	1.1328e-03

Tabela 6.8: Teste de convergência na malha composta para condições de contorno de Dirichlet para as velocidades e Neumann para a pressão, com propriedades físicas variáveis.

Malha uniforme							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ u - u_e\ _2$	2.6094e-03	3.68	7.0888e-04	3.87	1.8340e-04	3.90	4.7053e-05
$\ v - v_e\ _2$	4.5557e-03	3.72	1.2259e-03	3.83	3.2049e-04	3.92	8.1691e-05
$\ p - p_e\ _2$	3.6868e-02	2.65	1.3929e-02	2.50	5.5755e-03	3.76	1.4846e-03

Tabela 6.9: Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno Periódica na direção x e Dirichlet em y , com propriedades físicas constantes.

Malha composta							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ \nabla \cdot \mathbf{u}\ _2$	1.0933e-05	3.96	2.7637e-6	4.02	6.8665e-07	4.01	1.7141e-07
$\ u - u_e\ _2$	7.7167e-04	3.78	2.0388e-04	4.12	4.9438e-05	4.01	1.2326e-05
$\ v - v_e\ _2$	1.2281e-03	3.79	3.4017e-04	4.09	8.3125e-05	4.03	2.0610e-05
$\ p - p_e\ _2$	3.2054e-02	1.84	1.7420e-02	4.21	4.1397e-03	2.71	1.5296e-03

Tabela 6.10: Teste de convergência na malha composta para condições de contorno Periódica na direção x e Dirichlet em y , com propriedades físicas constantes.

Malha uniforme							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ \nabla \cdot \mathbf{u}\ _2$	6.2534e-09	-	3.8988e-10	-	1.8663e-11	-	1.1425e-12
$\ u - u_e\ _2$	6.9871e-03	4.01	1.7405e-03	4.01	4.3443e-04	4.00	1.0853e-04
$\ v - v_e\ _2$	6.9871e-03	4.01	1.7405e-03	4.01	4.3443e-04	4.00	1.0853e-04
$\ p - p_e\ _2$	3.6659e-02	3.72	9.8550e-03	4.03	2.4473e-03	4.01	6.1079e-04

Tabela 6.11: Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas constantes.

Malha composta							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ \nabla \cdot \mathbf{u}\ _2$	7.0470e-05	4.10	1.7175e-05	4.04	4.2505e-06	4.02	1.0573e-06
$\ u - u_e\ _2$	6.5549e-03	3.98	1.6450e-03	3.97	4.1393e-04	3.99	1.0374e-04
$\ v - v_e\ _2$	4.2603e-03	4.03	1.7997e-03	4.11	4.3774e-04	4.05	1.0808e-04
$\ p - p_e\ _2$	9.9461e-02	3.47	2.8701e-03	3.35	8.5641e-03	3.18	2.6919e-03

Tabela 6.12: Teste de convergência na malha composta para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas constantes.

Malha uniforme							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ \nabla \cdot \mathbf{u}\ _2$	2.4136e-09	-	7.0730e-10	-	2.2644e-011	-	1.6430e-11
$\ u - u_e\ _2$	7.7680e-03	4.01	1.9352e-03	4.01	4.8296e-04	4.00	1.2066e-04
$\ v - v_e\ _2$	7.7638e-03	4.01	1.9341e-03	4.01	4.8268e-04	4.00	1.2059e-04
$\ p - p_e\ _2$	3.8816e-02	3.81	1.0195e-02	4.02	2.5362e-03	4.01	2.3259e-04

Tabela 6.13: Teste de convergência na malha uniforme para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas variáveis.

Malha composta							
Domínio	64×64	r_e	128×128	r_e	256×256	r_e	512×512
$\ \nabla \cdot \mathbf{u}\ _2$	7.0566e-05	4.11	1.7180e-05	4.04	4.2507e-06	4.02	1.0573e-06
$\ u - u_e\ _2$	7.2023e-03	3.99	1.8035e-03	3.98	4.5302e-04	3.99	1.1354e-04
$\ v - v_e\ _2$	7.2133e-03	4.05	1.7825e-03	4.09	4.3576e-04	4.04	1.0786e-04
$\ p - p_e\ _2$	1.0645e-01	3.48	3.0590e-02	3.33	9.1777e-03	3.15	2.9154e-03

Tabela 6.14: Teste de convergência na malha composta para condições de contorno Periódica em todas as direções, com propriedades físicas variáveis.

6.2 Simulações de Escoamentos em uma Cavidade

Foram simulados casos para escoamentos bidimensionais em uma cavidade com tampa deslizante e com valores para o número de Reynolds iguais a 100, 1.000 e 10.000, obtidos com discretizações espaciais e temporais de segunda ordem, utilizando-se malha composta e malha uniforme. Os resultados são comparados com os resultados de Ghia *et al.* (1982) e Pinho (2006).

Para escoamentos em uma cavidade, o trabalho de Burgraff (1966) é pioneiro em estudar numericamente este o problema. No entanto, foi no trabalho de Ghia *et al.* (1982) que primeiramente analisou-se de forma quantitativa e detalhada este problema. Nesse último trabalho, os autores utilizaram a formulação de vorticidade e função corrente para estudar o método multigrid na obtenção de soluções numéricas para escoamentos a altos números de Reynolds com malhas refinadas. Para realização dos testes, eles utilizaram como problema modelo o escoamento bidimensional, incompressível e em regime permanente. Apresentaram soluções para números de Reynolds entre 100 e 12.500. As malhas utilizadas foram de 128×128 para Reynolds até 5.000 e 256×256 para números de Reynolds acima deste valor, ambas com refinamentos uniformes próximo às paredes. Desde então, seus resultados são referências para qualquer estudo sobre cavidades bidimensionais e utilizados para comparações entre as diversas técnicas numéricas.

Os resultados recentes de Pinho (2006) também são utilizados para validação. Pinho recorre a discretizações por diferenças finitas de quarta ordem e aos modelos sub-malha de Smagorinsky e Germano para analisar as estruturas transitórias presentes nos escoamentos em cavidades cúbicas. Simulações bidimensionais com o modelo de Smagorinsky dinâmico também foram realizadas.

Nesta seção, são apresentadas as comparações entre os resultados obtidos no presente trabalho e os resultados de referência. Estas comparações foram realizadas utilizando-se o perfil da componente de velocidade u , na linha vertical do centro da cavidade ($x = 0,5m$) e o perfil da componente de velocidade v , na linha horizontal do centro da cavidade ($y = 0,5m$). Estes perfis são referenciados a partir de então como perfil de u e perfil de v , respectivamente.

Os resultados para $Re = 100$, $Re = 1.000$ e $Re = 10.000$ foram obtidos simulando-se uma cavidade bidimensional de domínio $\Omega = [0; 1] \times [0; 1]$, tanto na malha composta

quanto na malha uniforme, onde l_{base} é sempre 32×32 e o espaçamento da malha uniforme corresponde ao espaçamento mais fino da malha composta. O modelo sub-malha de Smagorinsky com a constante $C_s = 0,18$ é aplicado para todos os casos.

As Figuras 6.5 e 6.6 apresentam os resultados dos perfis de velocidade horizontal e vertical para $Re = 100$ na malha uniforme (128×128) e na malha composta ($32 \times 32L3$). O passo de tempo utilizado é $\mathcal{O}(\Delta x)$. Para estes casos esse valor corresponde a $\frac{1}{128} \cdot 0,5$, onde 0,5 é um coeficiente de segurança. Verifica-se que os resultados apresentam boa convergência, atingindo os pontos de máximo e de mínimo das componentes da velocidade. Os resultados para $Re = 1.000$ são mostrados nas Figs. 6.7 e 6.8. Para estes, os pontos de mínimo não são alcançados pela metodologia adotada. Observa-se que esses valores são alcançados pelos autores de referência, os quais usam métodos de alta ordem e Pinho (2006) utiliza também Smagorinsky dinâmico (ver Fig. 6.8).

Nas Figuras 6.9 e 6.10 verifica-se a influência da malha para $Re=10.000$. Observa-se que à medida que a malha é refinada os pontos de máximo e mínimo são melhor simulados. Este refinamento é aplicado para a malha composta, sendo uma primeira análise feita sobre uma malha com 3 níveis de refinamento e a segunda com 4 níveis de refinamento. Uma simulação sem modelo de turbulência é também realizada para este caso, a qual apresenta um distanciamento considerável dos valores apresentados pelos autores de referência em comparação com os resultados utilizando modelo de Smagorinsky. Os pontos de mínimos para o perfil de v não são alcançados para 4 níveis de refinamento, tanto na malha adaptativa quanto na malha uniforme. Pinho (2006) também observou que esses pontos não são alcançados para discretizações de segunda ordem e com modelo de Smagorinsky. Tais valores só foram encontrados utilizando quarta ordem de discretização e modelo dinâmico de Smagorinsky.

6.2.1 Topologia dos Escoamentos

As Figuras 6.11 e 6.12 mostram o campo de vorticidade sobreposto por um conjunto de linhas de corrente que indica o centro das estruturas formadas para os casos de $Re = 100$ e $Re = 1.000$. A topologia do primeiro caso apresenta uma circulação central e dois vórtices secundários nos cantos inferiores que aumentam de tamanho com o aumento do número de Reynolds. Para a discretização com malha uniforme visualiza-se a presença

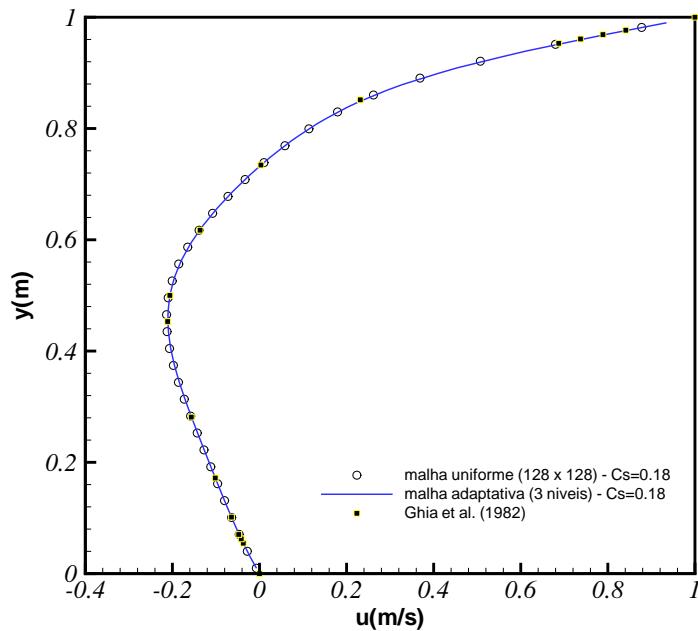


Figura 6.5: Comparaçāo dos perfis da componente de velocidade média u em $x = 0,5m$ para $Re = 100$, obtidos com malha composta $32 \times 32L3$ e malha uniforme 128×128 .

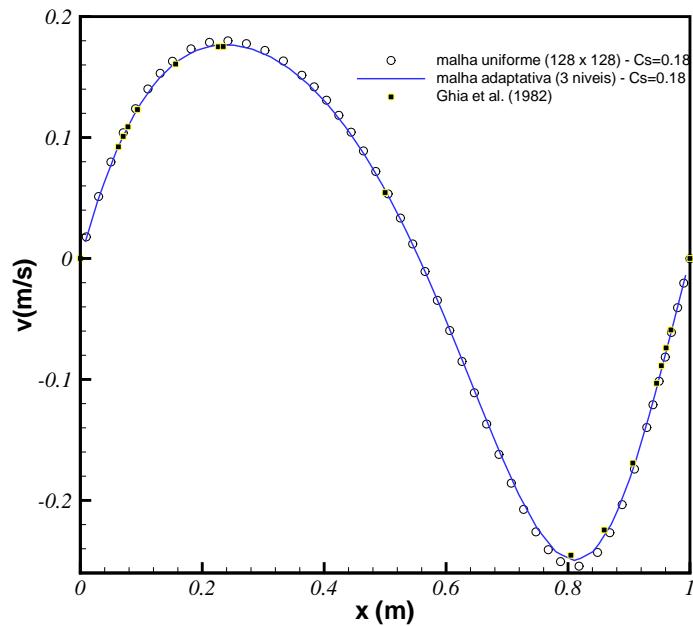


Figura 6.6: Comparaçāo dos perfis da componente de velocidade média v em $y = 0,5m$ para $Re = 100$, obtidos com malha composta $32 \times 32L3$ e malha uniforme 128×128 .

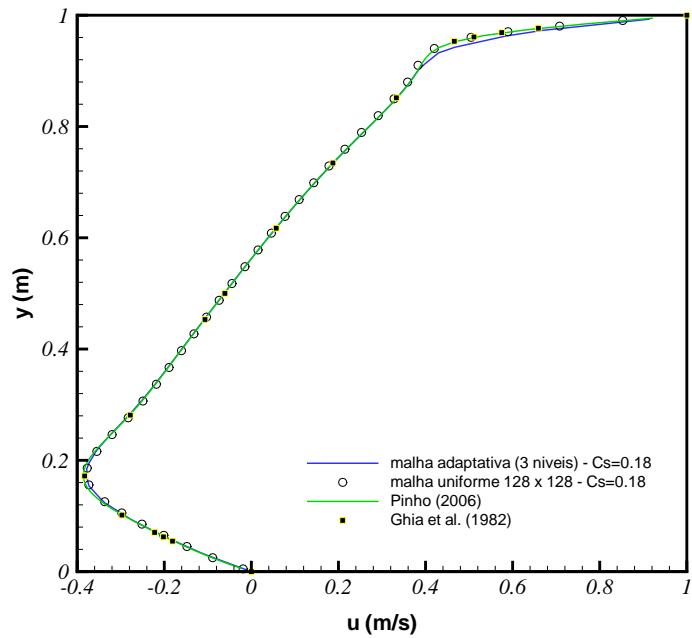


Figura 6.7: Comparação dos perfis da componente de velocidade média u em $x = 0,5m$ para $Re = 1.000$, obtidos com malha composta $32 \times 32L3$ e malha uniforme 128×128 .

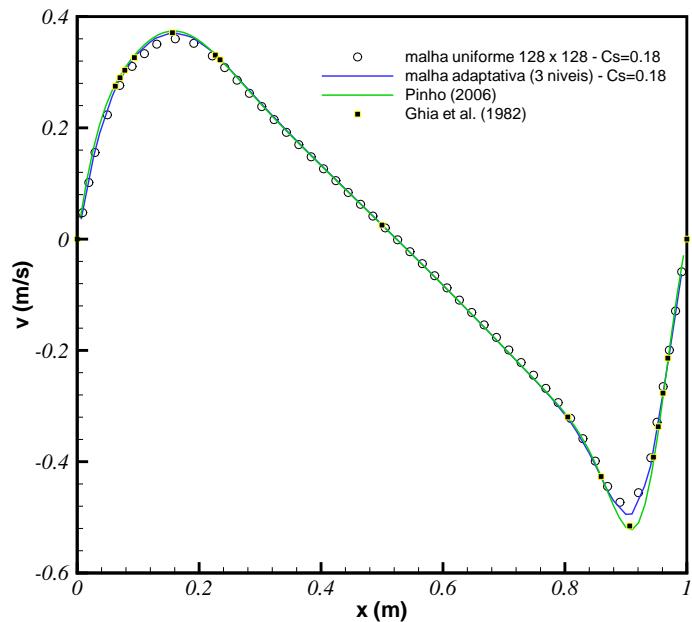


Figura 6.8: Comparação dos perfis da componente de velocidade média v em $y = 0,5m$ para $Re = 1.000$, obtidos com malha composta $32 \times 32L3$ e malha uniforme 128×128 .

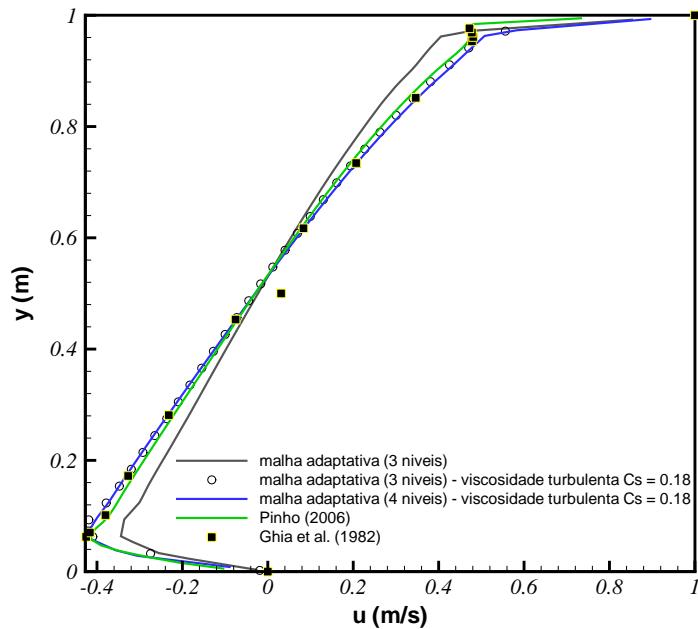


Figura 6.9: Comparaçāo dos perfis da componente de velocidade média u em $x = 0,5m$ para $Re = 10.000$ e $C_s = 0,18$, obtidos com malha composta $32 \times 32L3$ e $32 \times 32L4$.

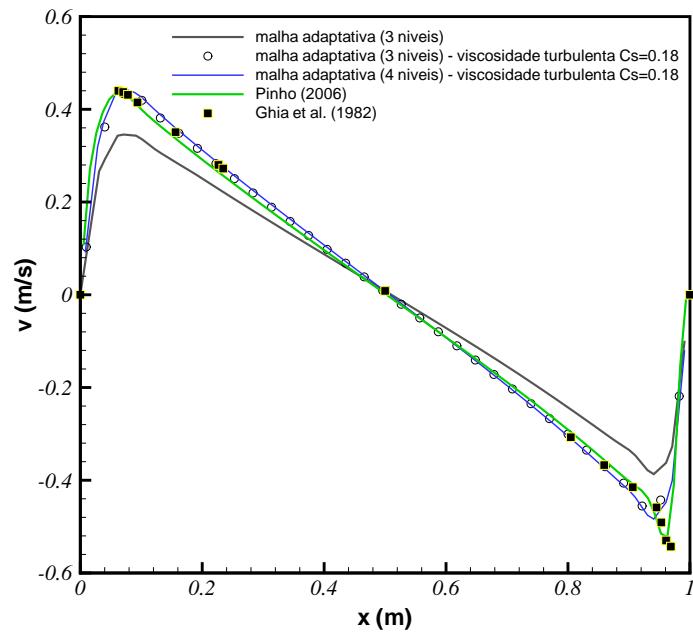


Figura 6.10: Comparaçāo dos perfis da componente de velocidade média v em $y = 0,5m$ para $Re = 10.000$ e $C_s = 0,18$, obtidos com malha composta $32 \times 32L3$ e $32 \times 32L4$.

do segundo vórtice secundário. Na malha composta, o refinamento adaptativo é feito em função da vorticidade. Devido a grandeza da vorticidade nos cantos ser pequena, ela não é selecionada para refinamento. Assim, o refinamento é imposto nestes locais, na busca de captar os vórtices dos cantos inferiores. A Fig. 6.13, permite visualizar o refinamento adaptativo na malha composta, a qual possui 3 níveis de refinamento sendo o $l_{base} = 32 \times 32$ ($32 \times 32L3$).

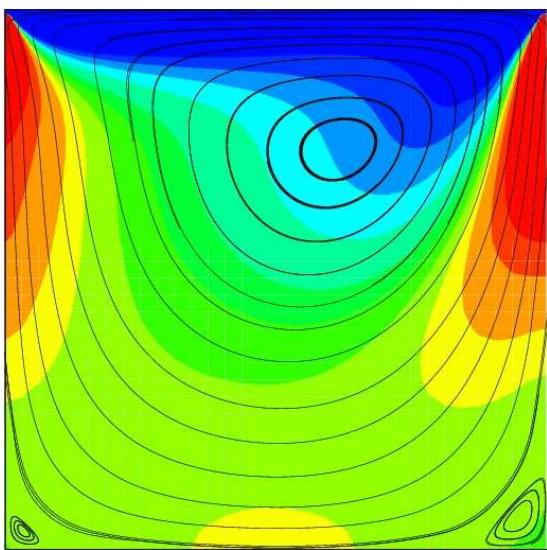


Figura 6.11: Campo de vorticidade com linhas de corrente superpostas em regime permanente para $Re = 100$ obtidos na malha composta $32 \times 32L3$.

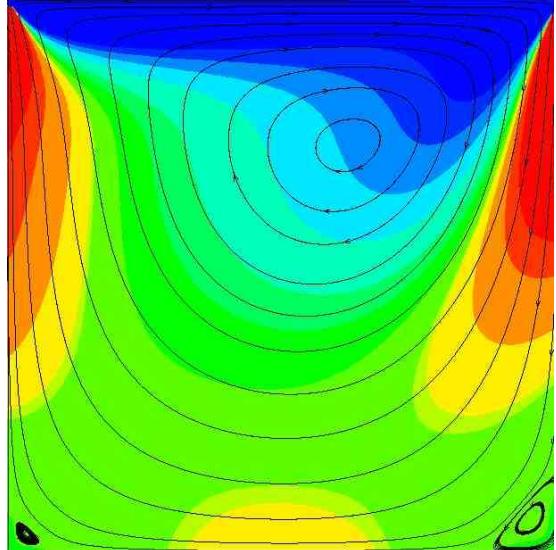


Figura 6.12: Campo de vorticidade com linhas de corrente superpostas em regime permanente para $Re = 100$ obtidos na malha uniforme 128×128 .

Para $Re = 1.000$, a mesma configuração topológica do escoamento é observada. São formados um vórtice central, dois secundários nos cantos inferiores e uma curvatura na lateral indicando uma deformação do escoamento nessa região, conforme apresentado nas Figs. 6.14 e 6.15. Tanto a simulação na malha composta como na malha uniforme detectaram a presença dos vórtices secundários, pois o refinamento adaptativo se estende por todo domínio como mostrado na Fig. 6.16, a qual mostra uma seqüência temporal com o campo de vorticidade sobreposto pela malha adaptativa com 3 níveis de refinamento onde $l_{base} = 32 \times 32$ ($32 \times 32L3$).

A Figura 6.17 mostra uma seqüência temporal com o campo de vorticidade sobreposto por linhas de corrente para $Re = 10.000$. Percebe-se o surgimento de pequenos

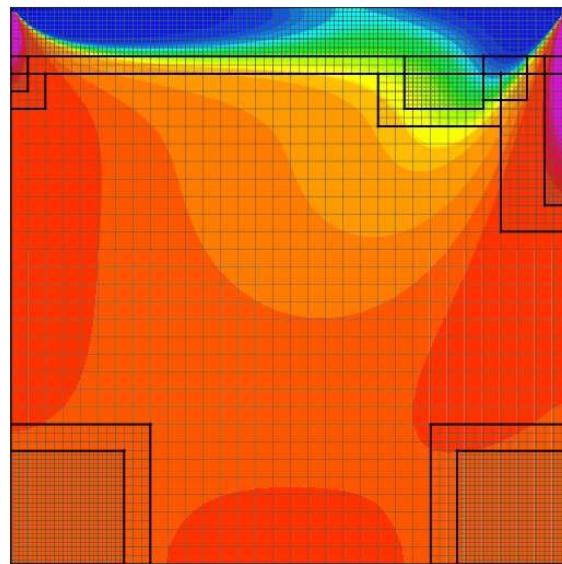


Figura 6.13: Campo vorticidade sobreposto pelo refinamento adaptativo para $Re = 100$ em uma malha composta $32 \times 32L3$.

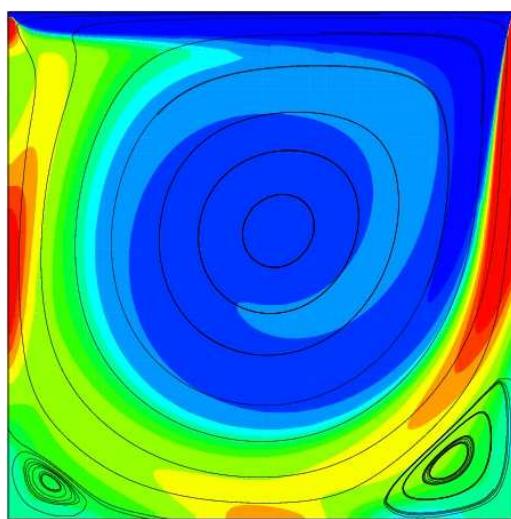


Figura 6.14: Campo de vorticidade com linhas de corrente superpostas em regime permanente para $Re = 1.000$ obtidos na malha composta $32 \times 32L3$.

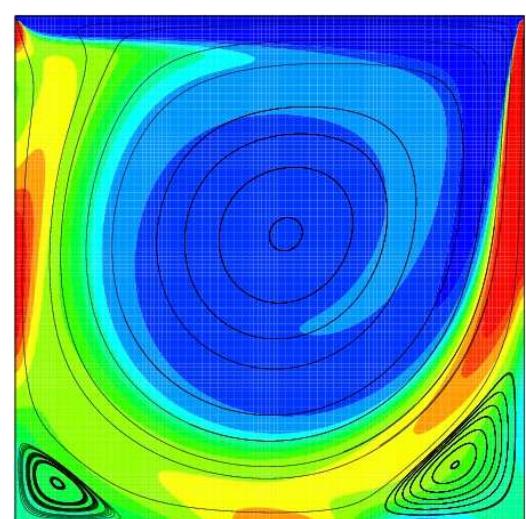


Figura 6.15: Campo de vorticidade com linhas de corrente superpostas em regime permanente para $Re = 1.000$ obtidos na malha uniforme 128×128 .

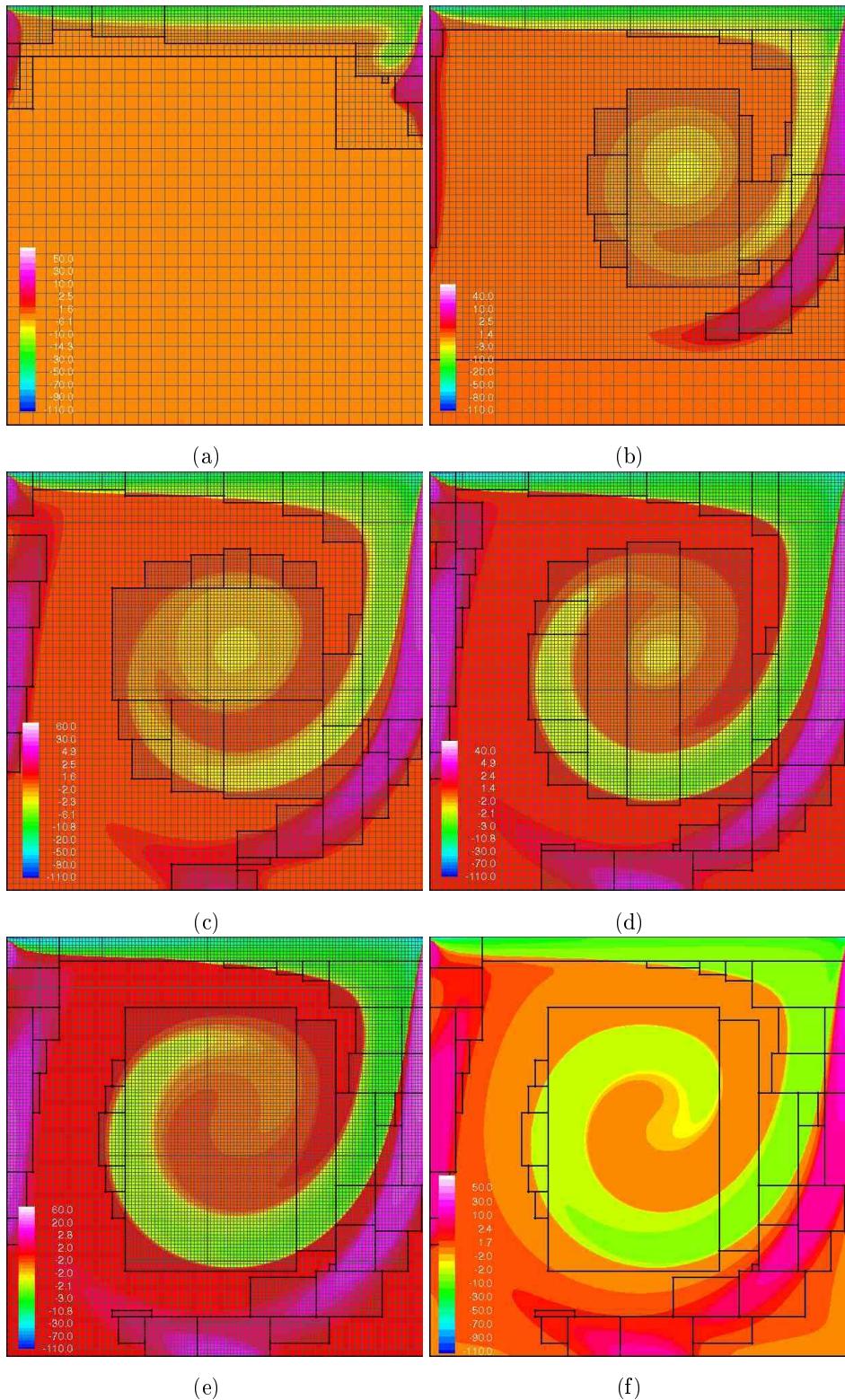


Figura 6.16: Evolução temporal da remalhagem em função da vorticidade na malha composta $32 \times 32L3$ para $Re = 1.000$. Células computacionais em (a), (b), (c), (d) e (e). Perfil das malhas para $L3$ em (f).

vórtices na região central inferior que são “capturados” pelo vórtice secundário do canto inferior esquerdo. Este processo se repete para o vórtice secundário superior. Os vórtices secundários do canto inferior oscilam em torno de suas posições, além de sofrerem deformações. A seqüência temporal com o campo de vorticidade sobreposto pela remalhagem para $Re = 10.000$ é mostrado na Fig. 6.18. A malha composta considerada consiste em 4 níveis de refinamento com $l_{base} = 32 \times 32$ ($32 \times 32L4$), onde a adaptatividade da malha está em função da vorticidade. Observa-se que o refinamento tende a acompanhar a formação e o desprendimento do vórtice central.

6.3 Resultados para Testes de Regularização da Malha Lagrangiana

Nesta seção, são apresentados dois testes que permitem verificar a eficiência do processo de regularização da malha lagrangiana. Como citado anteriormente, os pontos lagrangianos devem permanecer igualmente distribuídos ao longo de toda interface durante todo o tempo de cálculo, a fim de se evitar instabilidades numéricas. Para tal verificação, uma interface foi submetida a um campo de velocidade cisalhante de valor unitário em um domínio $\Omega = [0; 1] \times [0; 1]$ na malha uniforme 64×64 , permitindo que a interface se deforme em sentidos opostos. A Figura 6.19 mostra a evolução temporal da deformação da interface pela ação de um campo de velocidade cisalhante. A função indicadora é utilizada para visualizar a deformação da interface ao longo do tempo.

A Figura 6.20 mostra a distribuição dos pontos lagrangianos sobre a interface que se deforma, relativa à Fig. 6.19. Observa-se que os pontos são inseridos e redistribuídos, de forma que sua distribuição sobre a interface permanece uniforme ao longo do tempo. Quando o espaçamento da malha lagrangiana Δs for maior que o espaçamento da malha euleriana ($\min(\Delta x, \Delta y)$), a quantidade de pontos lagrangianos deve ser aumentada ao longo de toda a interface. Este artifício é mostrado na transição entre a interface definida pela cor vermelha e a interface definida pela cor verde, onde se observa um aumento do número de pontos. Se o espaçamento entre os pontos lagrangianos for menor que $\frac{\Delta s}{4}$, a quantidade de pontos lagrangianos ao longo da interface deve ser reduzida.

O mesmo teste também é aplicado sobre a malha composta como mostra a Fig. 6.21.

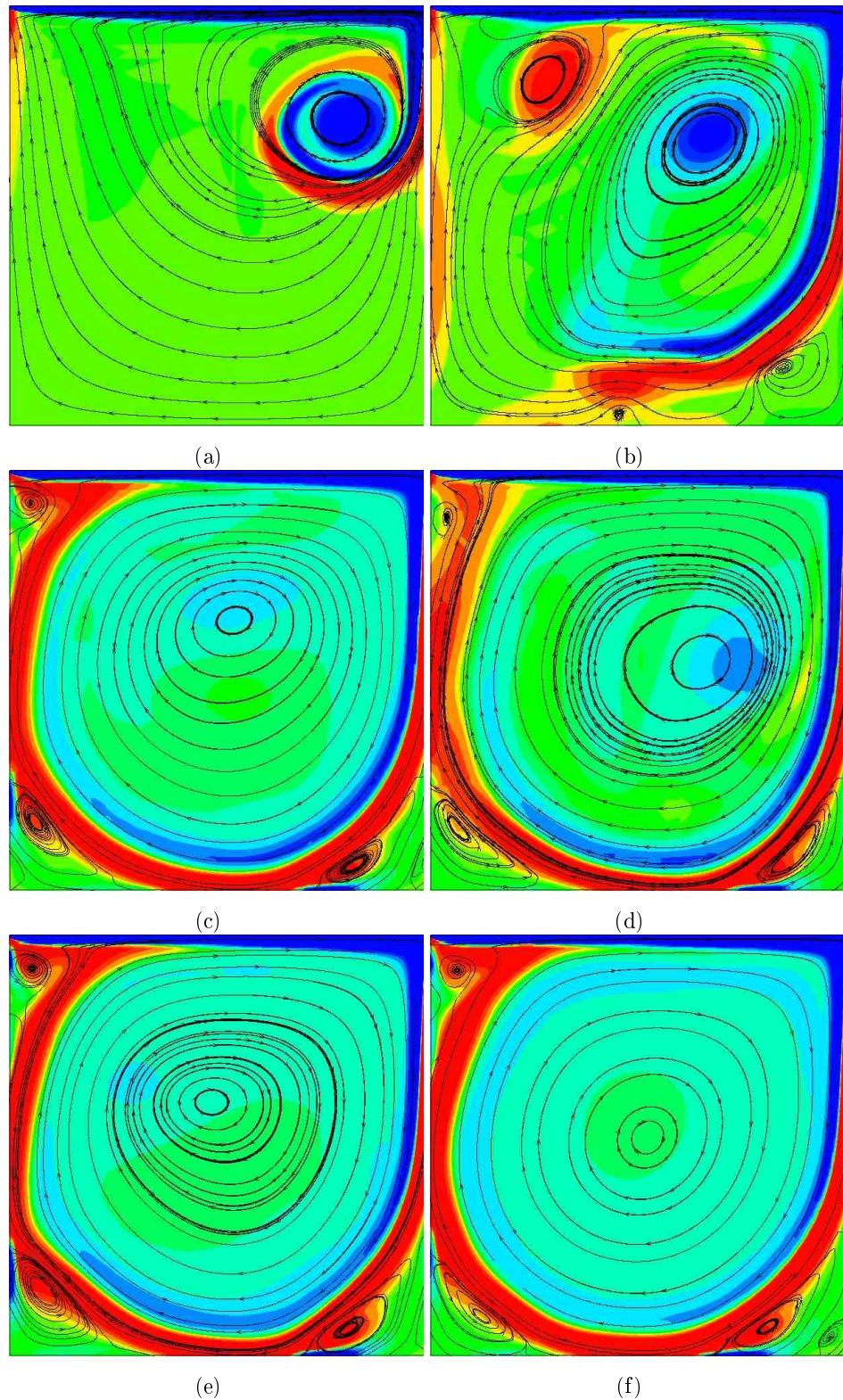


Figura 6.17: Seqüência temporal de campos de vorticidade com linhas de corrente superpostas para $Re = 10.000$ na malha composta $32 \times 32L4$.

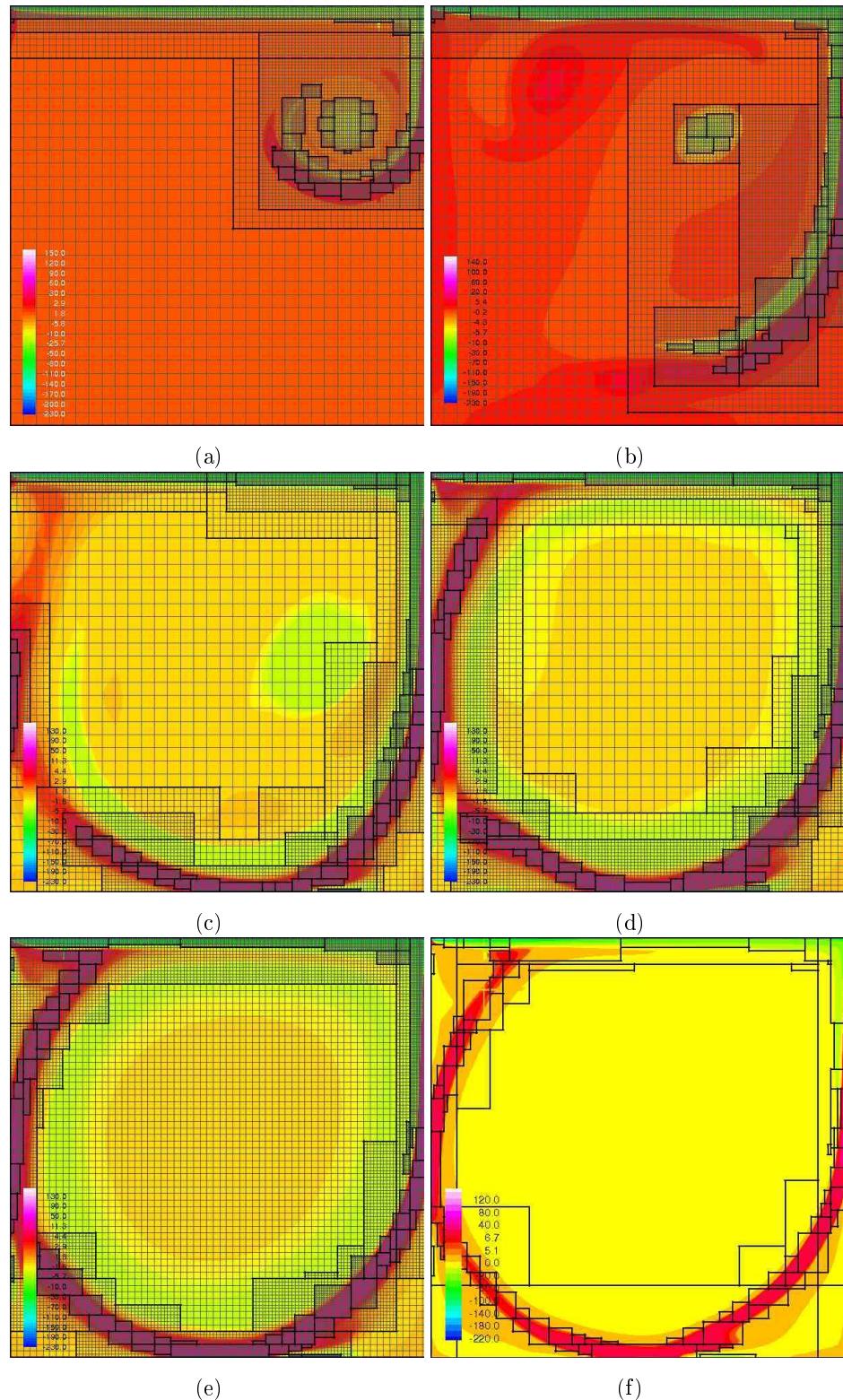


Figura 6.18: Evolução temporal da remalhagem em função da vorticidade na malha composta $32 \times 32L4$ para $Re = 10.000$. Células computacionais em (a), (b), (c), (d) e (e). Perfil das malhas em (f).

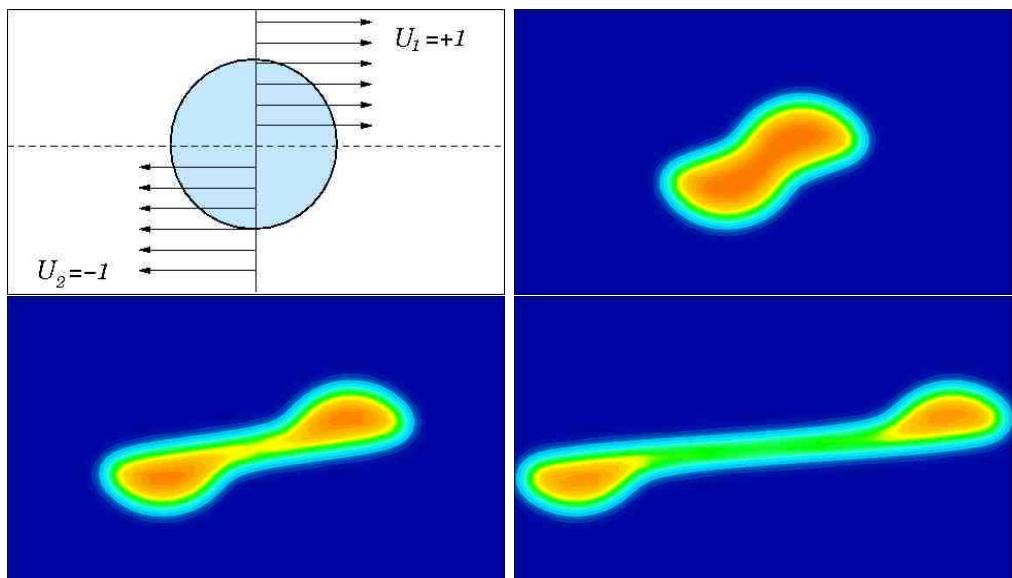


Figura 6.19: Cisalhamento de uma interface: evolução temporal da função indicadora em uma malha uniforme 64×64 .

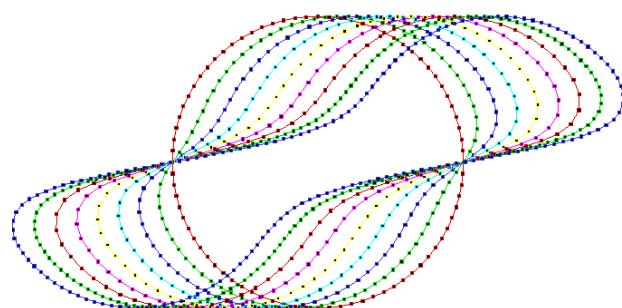


Figura 6.20: Cisalhamento de uma interface: evolução temporal da interface e redistribuição dos pontos lagrangianos.

O refinamento é adaptativo em função do movimento da interface, com 3 níveis de refinamento onde $l_{base} = 64 \times 32$ em um domínio $\Omega = [0; 2] \times [0; 1]$.

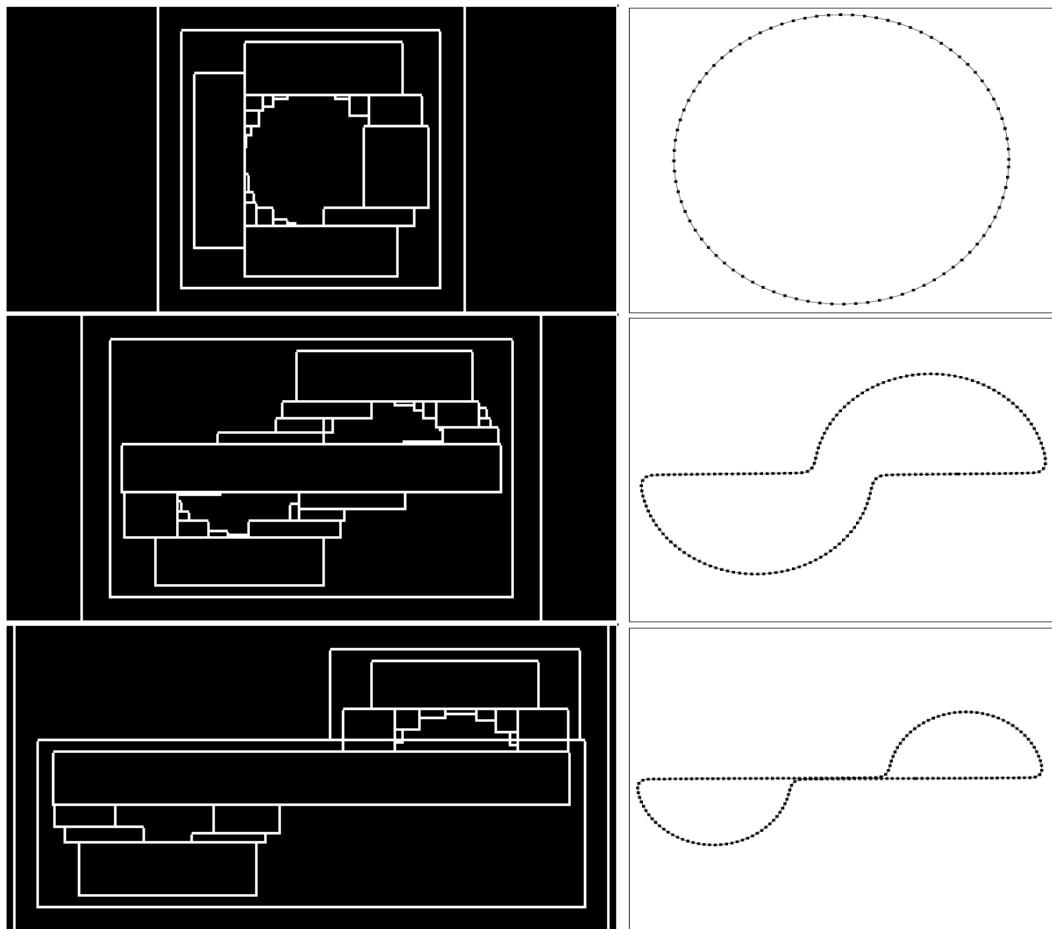


Figura 6.21: Transporte da interface: remalhagem em função do seu movimento em uma malha composta $64 \times 32L3$.

6.4 Simulações Numéricas de Escoamentos Bifásicos

O estudo de escoamentos de bolha isolada, tanto à jazante quanto interno a ela, está voltado para escoamentos onde bolhas ascendem inicialmente em um fluido em repouso. Para a modelagem de tais escoamentos, utiliza-se um domínio periódico em ambas as direções. O caso mais simples é quando há uma única bolha no domínio e sua geometria não se altera ao longo do tempo. Quando há um número maior de bolhas no domínio, ocorre a interação entre elas. Se o domínio é grande o suficiente, a bolha entra em

regime, ou seja, sua aceleração é nula e o movimento médio não se altera (BUNNER e TRYGGVASON, 2002).

Bolhas ascendentes são exemplos clássicos que podem ser usados para validar a modelagem de escoamentos que envolvem a presença de vários fluidos. Bolhas com massa específica inferior à do fluido tendem a ascender, devido aos efeitos de empuxo resultantes do gradiente de pressão causado pela gravidade. Com o objetivo de validar o código desenvolvido e demonstrar a potencialidade e robustez da metodologia aplicada, uma seqüência de casos foram simulados para diferentes números de Eötvös e Morton. Os resultados são comparados com o diagrama de forma de Clift *et al.* (1978), o qual relaciona os números de Reynolds, Morton e Eötvös para bolhas de gás em um meio líquido, definindo o movimento e a forma da bolha.

Os resultados numéricos são apresentados para uma única bolha, a baixos e a moderados números de Reynolds e um caso de regime *wobbling*, o qual apresenta alto número de Reynolds. Dois casos envolvendo múltiplas bolhas também são apresentados. Para a simulação numérica destes casos, uma bolha esférica de diâmetro d_d (diâmetro da fase dispersa), está imersa em um meio fluido, de forma que este domínio computacional é de $\frac{10}{3}d_d \times 10d_d$ discretizado na malha composta. O refinamento adaptativo para estes casos, está em função da posição da interface. A Fig. 6.22 ilustra de forma esquemática o domínio computacional adotado. Nenhuma condição de contorno é aplicada na bolha e as condições de contorno para a fase contínua são periódicas. O passo de tempo utilizado é da ordem de Δx , ou seja, $\Delta t = \mathcal{O}(\Delta x)$. Mais especificamente, $\Delta t = C \min(\Delta x/2, \Delta y/2)$, onde C é um coeficiente de segurança e igual a 0,2 para todos os casos.

As condições do escoamento são definidas pelos parâmetros adimensionais, os quais determinam a geometria e a posição da bolha ao longo do tempo. Estes parâmetros são o número de Reynolds (Re), o número de Morton (M) e o número de Eötvös (Eo), os quais são baseados nas propriedades da fase contínua.

Dois outros parâmetros governam o escoamento ascendente de uma bolha, os quais são as razões entre as massas específicas das diferentes fases e as razões entre as viscosidades das diferentes fases, ou seja, $\gamma = \rho_d/\rho_c$ e $\lambda = \mu_d/\mu_c$, respectivamente. Os valores adotados no presente trabalho são $\gamma = 0,5$ e $\lambda = 0,5$.

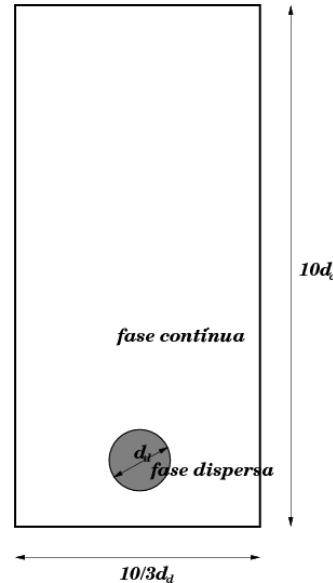


Figura 6.22: Modelo computacional esquemático utilizado para a simulação numérica de uma única bolha ascendente.

6.4.1 Ascensão da Bolha Isolada a Baixos Números de Reynolds

6.4.1.1 Regime Esférico

A ascensão de uma bolha isolada a baixo número de Reynolds foi simulada para $Eo = 1$, $M = 10^{-2}$, $T = 9,0N/m$ e $d_d = 0,03m$. Para esta situação, observa-se que a interface permanece circular ao longo de todo o tempo, entrando rapidamente em regime permanente. Na Fig. 6.23, visualiza-se o deslocamento desta interface circular em função do tempo t^* , o qual é baseado no diâmetro da bolha ($t^* = \frac{t}{\sqrt{d_d/g}}$), na direção vertical no sentido ascendente em uma malha adaptativa refinada localmente com 4 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 32 \times 96$ em $\Omega = [0; 1] \times [0; 3]$. As linhas de corrente são também apresentadas. Pode-se observar a formação de duas recirculações internas que têm o mesmo sentido de movimento do fluido externo. O comportamento qualitativo das linhas de corrente é consistente com o que se observa experimentalmente. A Fig 6.24 mostra uma visualização experimental das linhas de corrente de um escoamento interno em uma bolha de fluido (CLIFT *et al.*, 1978).

Na Figura 6.25, mostra-se o campo de pressão em todo domínio de cálculo. Observa-se um salto da pressão através da interface, o qual equilibra a força interfacial que aponta radialmente para o interior da interface. Em um plano horizontal posicionado sobre a

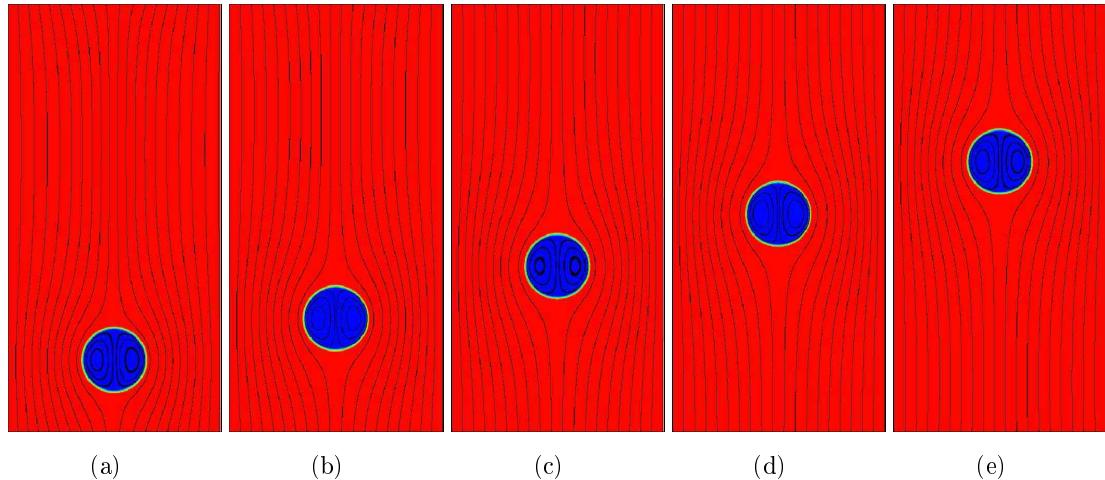


Figura 6.23: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de corrente em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$. (a) $t^* = 1,4$; (b) $t^* = 7,0$; (c) $t^* = 14,1$; (d) $t^* = 21,2$ e (e) $t^* = 28,3$.

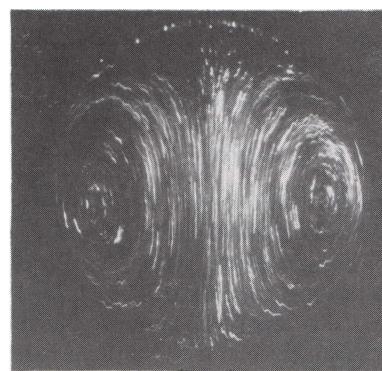


Figura 6.24: Visualização experimental da recirculação interna em uma bolha ascendente (CLIFT *et al.*, 1978).

interface, extraíram-se os valores da pressão, que são visualizados na Fig. 6.26. Os resultados são apresentados em uma malha uniforme 256×768 , em uma malha adaptativa com 4 níveis de refinamento com $l_{base} = 32 \times 96$ e outro caso com malha adaptativa com 3 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 32 \times 96$.

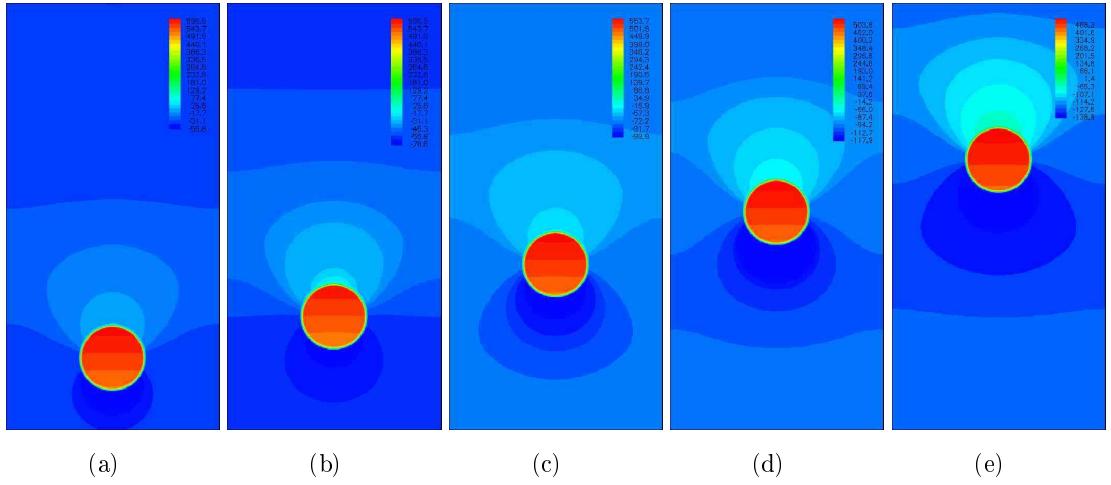


Figura 6.25: Evolução temporal do campo de pressão em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$: (a) $t^* = 1,4$; (b) $t^* = 7,0$; (c) $t^* = 14,1$; (d) $t^* = 21,2$ e (e) $t^* = 28,3$.

O salto de pressão, calculado numericamente para a malha uniforme e para as malhas adaptativas com 4 níveis e 3 níveis de refinamento, assumem valores muito próximos: $596,52N/m^2$, $597,62N/m^2$ e $594,53N/m^2$, respectivamente. O salto de pressão é também calculado analiticamente pela expressão (3.51), a qual é conhecida como Lei de Young-Laplace. Este salto analítico é de $\Delta p = 600,0N/m^2$ o qual implica um erro de 0,58% na malha uniforme de 256×768 , 0.91% para malha adaptativa com 3 níveis de refinamento e 0,39% para malha adaptativa com 4 níveis de refinamento. Lima e Silva (2002), utilizando Modelo Físico Virtual apresenta um erro igual a 0,67%. Assim, tal erro é considerado bastante aceitável e permite inferir que o transporte da interface está sendo simulado com sucesso. Percebe-se, no entanto, uma forte influência dos níveis de refinamento.

Nas Figuras 6.27 e 6.28, são mostrados os campos das componentes horizontais e verticais da velocidade para a malha com 4 níveis de refinamento. A região onde está posicionada a bolha está representada pela cor vermelha na Fig. 6.28, indicando uma região de velocidades positivas, devido à existência das recirculações internas e ao seu movimento ascendente. Na Fig. 6.27, a componente horizontal da velocidade indica o

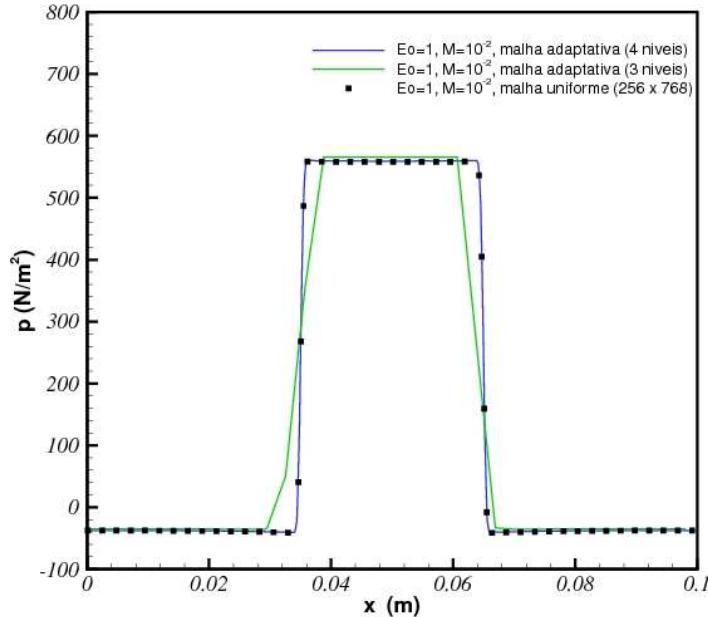


Figura 6.26: Salto de pressão ao longo de x para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$, obtido pela simulação numérica com malha uniforme e malhas compostas $32 \times 96L3$ e $32 \times 96L4$.

desvio do fluido nas vizinhanças da interface.

A evolução do campo de vorticidade ao longo do tempo é apresentada na Fig. 6.29. Observa-se que para uma partícula de fluido, o escoamento no interior da bolha tem o mesmo sentido que o escoamento do meio no qual ela está inserida. A Fig. 6.30 ilustra as linhas de corrente tanto no interior como no exterior da bolha, permitindo visualizar o sentido do movimento das partículas de fluido. Observa-se que este movimento permanece constante ao longo do tempo devido as altas tensões viscosas. O perfil de vorticidade para $t^* = 1,4$ (Fig. 6.29a) é apresentado na Fig. 6.31 comprovando os valores positivos e negativos da vorticidade o qual leva a formação de linhas de corrente no sentido horário e anti-horário e internamente à bolha.

Para se conhecer o número de Reynolds de uma bolha de fluido, tanto em queda como em ascensão, é necessário conhecer a velocidade do centróide da partícula. A expressão (3.47) permite o cálculo da velocidade do centróide a cada instante de tempo, a qual é dada em função da velocidade nos pontos lagrangianos e da posição da interface. Conhecendo-se a velocidade do centróide plota-se o número de Reynolds em função do

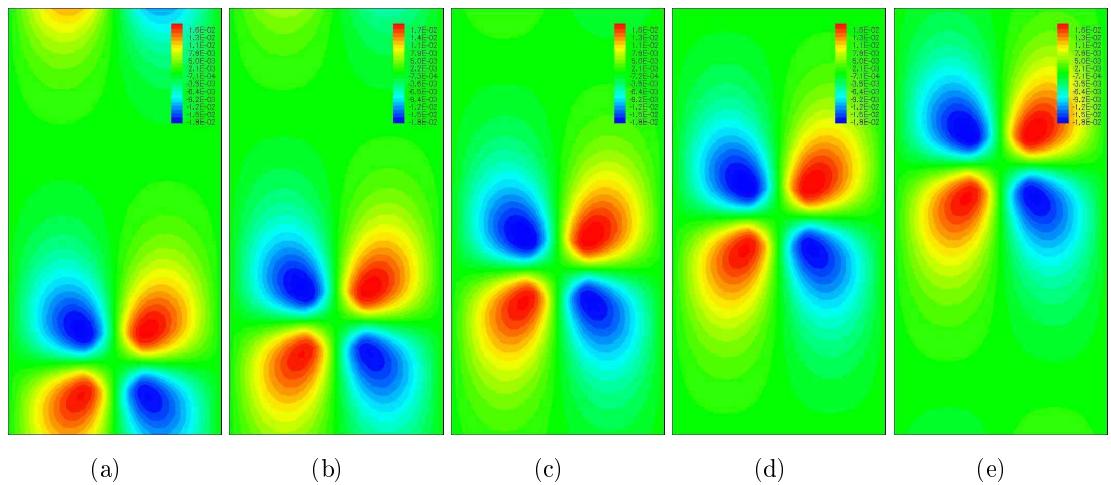


Figura 6.27: Evolução temporal do campo de velocidade horizontal em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$: (a) $t^* = 1, 4$; (b) $t^* = 7, 0$; (c) $t^* = 14, 1$; (d) $t^* = 21, 2$ e (e) $t^* = 28, 3$.

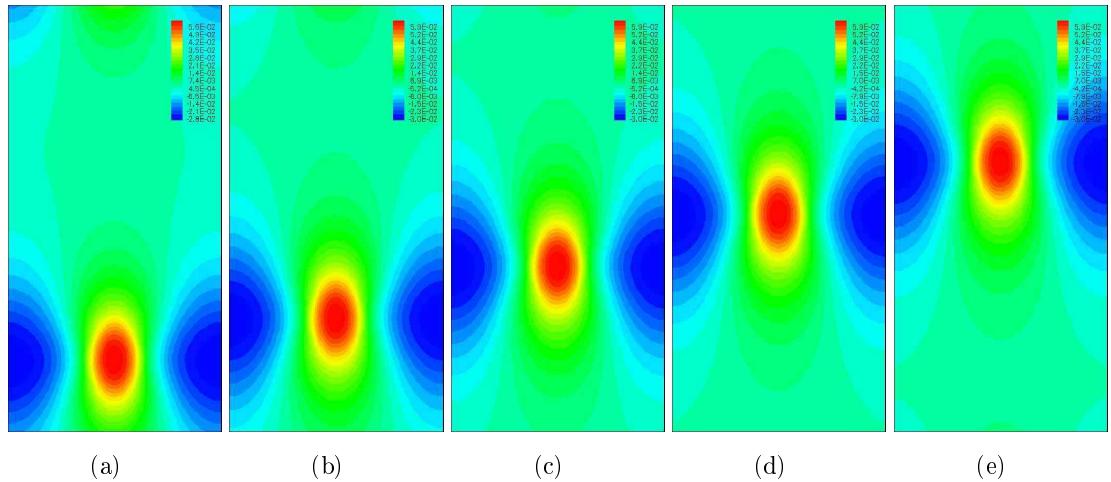


Figura 6.28: Evolução temporal do campo de velocidade vertical em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$: (a) $t^* = 1, 4$; (b) $t^* = 7, 0$; (c) $t^* = 14, 1$; (d) $t^* = 21, 2$ e (e) $t^* = 28, 3$.

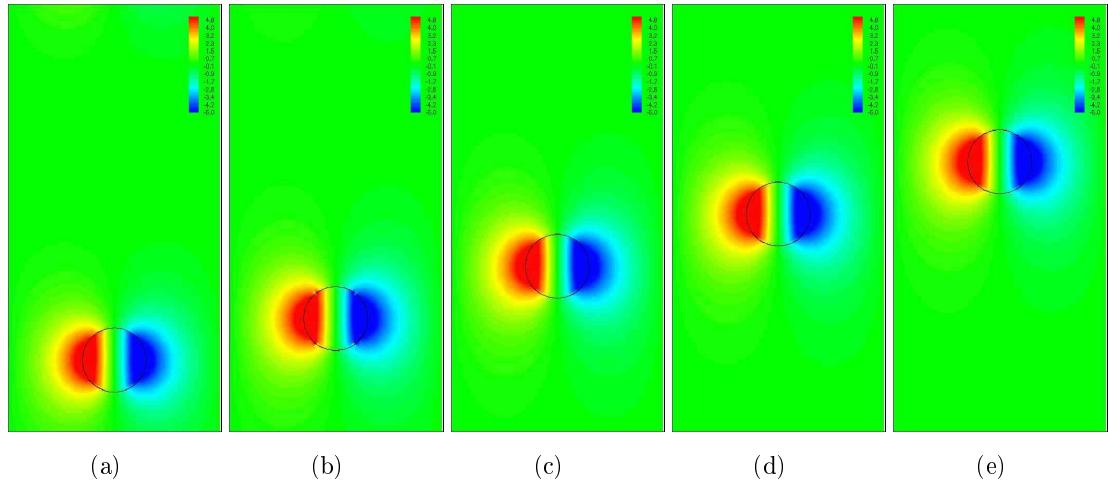


Figura 6.29: Evolução temporal do campo de vorticidade em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$: (a) $t^* = 1, 4$; (b) $t^* = 7, 0$; (c) $t^* = 14, 1$; (d) $t^* = 21, 2$ e (e) $t^* = 28, 3$.

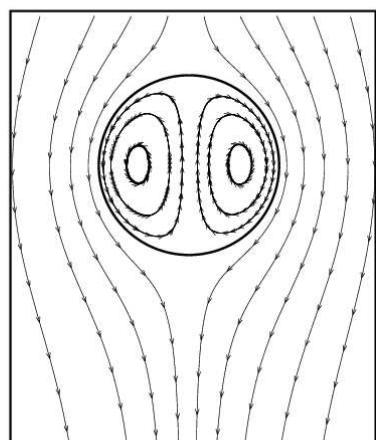


Figura 6.30: Linhas de corrente em uma bolha no regime estacionário para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$ na malha composta $32 \times 96L4$.

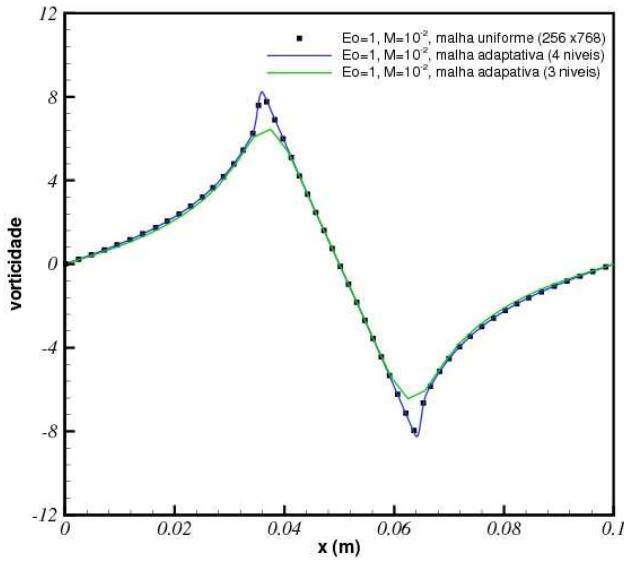


Figura 6.31: Perfil de vorticidade para $t^* = 1,4$ na malha uniforme e nas malhas compostas $32 \times 96L3$ e $32 \times 96L4$.

tempo característico t^* , o qual é baseado no diâmetro característico da bolha, tal que $t^* = \frac{t}{\sqrt{d_a/g}}$. A Fig. 6.32, apresenta a evolução temporal do número de Reynolds. Nota-se que a bolha estabelece rapidamente o regime estacionário, atingindo $Re = 0,3$. Clift *et al.* (1978) apresenta um número de Reynolds para uma bolha ascendente tridimensional aproximadamente igual 0,5. Observa-se que as relações de massa específica são diferentes, o que explica a diferença do Reynolds terminal.

Esmaelli e Tryggvason (1998), comentam que as razões de massa específica e viscosidade afetam diretamente a velocidade terminal da bolha. Esses autores reportam que para número de Reynolds igual a zero o efeito das razões das propriedades finitas no regime permanente pode ser calculado explicitamente. Assim, observaram que o fato de se usar $\lambda = 0,05$ ocorre uma redução na velocidade terminal de 2,3%. Como as razões das propriedades usadas no presente trabalho são iguais a 0,5, espera-se que a redução na velocidade terminal seja maior, alterando o número de Reynolds para quando a bolha entra em regime.

As variações da massa específica e viscosidade das bolhas ascendentes em meios fluidos são tipicamente grandes na maioria dos escoamentos de interesse. Por exemplo, para

bolhas de ar em água à temperatura ambiente $\rho_d/\rho_c = 1,22 \cdot 10^{-3}$ e $\mu_d/\mu_c = 1,81 \cdot 10^{-3}$. O método multigrid usado aqui falha para a convergência da solução da equação da correção da pressão para razões de massa específica tão pequenas.

Tryggvason *et al.* (2001) afirmam que para essas razões de massa específica, pequenos erros geram valores negativos dessa propriedade, que usualmente causam dificuldades na convergência. Entretanto, os autores afirmam que esse problema pode ser eliminado utilizando um processo de filtragem e sugerem o uso de SOR, com fatores de sobre-relaxação. Os autores também lembram que em muitos casos essas razões têm efeitos pequenos na velocidade do escoamento, e que é possível usar razões modestas sem influência significante nos resultados.

Através de soluções analíticas em escoamentos de Stokes, Bunner e Tryggvason (2002) observaram que a diferença na velocidade terminal, utilizando razões de 1/50, é cerca de 1% quando comparado com valores experimentais. Esmaelli e Tryggvason (1998), afirmam que a redução nas velocidades devido às razões de massa específica são diretamente proporcionais à diferença de massa específica entre as fases. Esmaelli e Tryggvason (1999), utilizando SOR com sobre-relaxação no solver do multigrid, adotam razões da ordem 1/10, os quais geram uma diferença de aproximadamente 4,3% na velocidade terminal da bolha. Sussman *et al.* (1999) sugerem a aplicação do Método Gradiente Conjugado Precondicionado para superar as dificuldades de convergência no Método Multigrid. Esses autores conseguem trabalhar com razões 1/816, atingindo a velocidade terminal prescrita pelas análise experimental.

No presente trabalho, o multigrid utiliza como relaxador o RBGS. Com isso, as razões de massa específica ficaram limitadas a 1/2, podendo variar 1/5 sem alteração no passo de tempo, ou seja, $\Delta t = \mathcal{O}(\Delta x)$. Para a razão entre as massa específica de 1/2, verifica-se para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$, um $Re = 0,29$. Assim, observa-se uma diferença de 48% em comparação com os valores experimentais de Clift *et al.* (1978), o que aparentemente é elevado. No entanto, isso não causa alteração na forma ou no movimento da bolha.

Uma importante informação para se conhecer o comportamento da metodologia adotada consiste na taxa da variação da área relativa ao longo do tempo. Como citado anteriormente, espera-se que essa variação de área ao longo do tempo seja da ordem da espessura da interface estendida. A Figura 6.33 apresenta a variação da área relativa da bolha ao longo do tempo. Para este caso a *taxa de perda de área* (razão da variação da

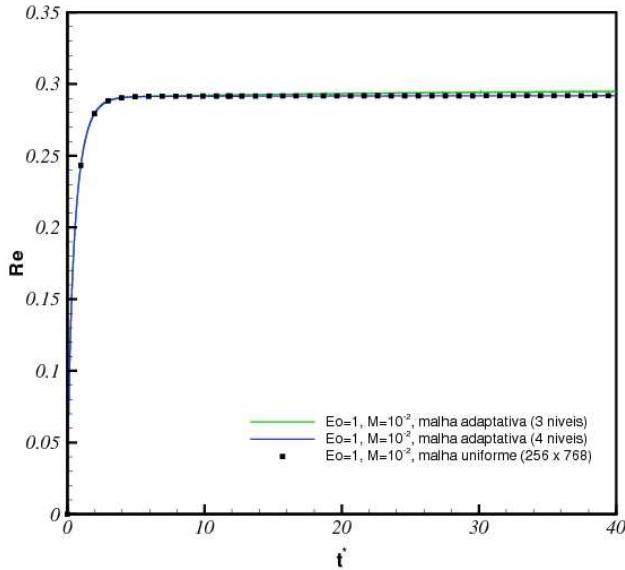


Figura 6.32: Evolução do número de Re ao longo do tempo avaliado na malha uniforme (256×768) e nas malhas compostas $32 \times 96L3$ e $32 \times 96L4$.

área relativa pelo tempo característico) é de $1,13 \cdot 10^{-3}\%$, na malha adaptativa $32 \times 96L4$. Na malha uniforme equivalente com 256×768 células esse valor é de $1,44 \cdot 10^{-3}\%$. Para a malha adaptativa $32 \times 96L3$ a taxa de perda de área é de $5,14 \cdot 10^{-3}\%$. Conforme mostrado na Fig. 6.33, esse valor tende a diminuir a medida que a malha é refinada. Para 5 níveis de refinamento ($32 \times 96L5$) a taxa de perda de área é de $5,9 \cdot 10^{-4}\%$. Como a taxa de perda de área para 5 níveis de refinamento é a metade do valor encontrado para 4 níveis de refinamento. Assim, verifica-se que a taxa de perda de área é da ordem da espessura da interface estendida. Sousa *et al.* (2004) utilizando também um método híbrido *Front-Tracking/Front-Capturing* encontram valores semelhantes. Para $Eo = 1$, $N = 10^{3/2}$, $\lambda = 0,05$ e $\gamma = 0,05$ observa-se uma perda de área de 0,5% na malha uniforme $32 \times 32 \times 64$ ao longo de 6s. Transformando esse valor em porcentagem por unidade de tempo característico tem-se uma perda de $1,17 \cdot 10^{-3}\%$.

A evolução do perímetro em conjunto com a evolução da área é apresentada na Fig. 6.34 apenas para a malha adaptativa com 4 níveis de refinamento. Para os casos a seguir, os demais resultados não são validos em diferentes níveis de malhas. Devido aos valores dos erros apresentados e das taxas, considera-se que para $Eo = 1$ e $M = 10^{-6}$, 4 níveis de

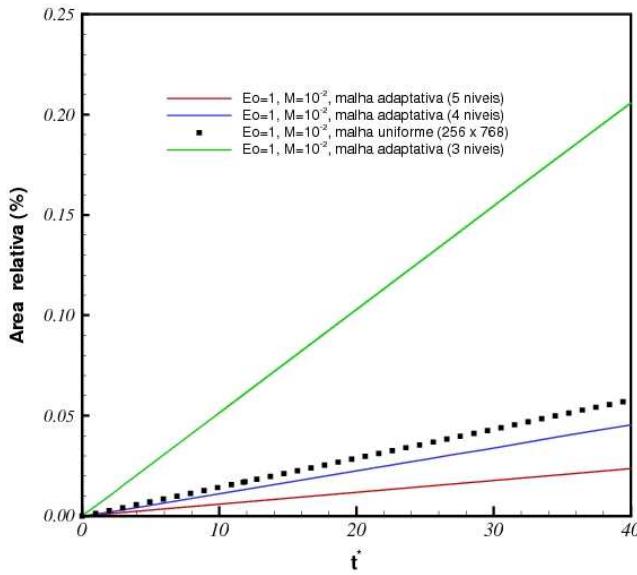


Figura 6.33: Evolução temporal da área relativa para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$ nas malhas compostas $32 \times 96L3$, $32 \times 96L4$, $32 \times 96L5$ e na malha uniforme equivalente (256×768).

refinamento é suficiente para se obter resultados com um bom nível de precisão em um tempo computacional relativamente pequeno. Assim, a maioria dos resultados a seguir serão analisados apenas na malha adaptativa com 4 níveis de refinamento. Para os casos onde as deformações da bolha são elevadas, um nível maior de refinamento é aplicado.

Como já citado, os resultados aqui apresentados são simulados em uma malha composta. O uso da malha composta se justifica devido ao ganho em tempo computacional e a precisão alcançada devido ao refinamento local. É verificado que à medida que se aumenta o número de níveis na malha composta, maior é o ganho de tempo computacional quando comparado com uma malha uniforme com o espaçamento semelhante ao nível mais fino da malha composta. As Figs. 6.35 e 6.36, apresentam o tempo de CPU pelo número de passos no tempo e o número de células computacionais pelo número de passos no tempo para a malha composta $32 \times 96L5$, respectivamente. Nota-se que a remalhagem ocupa apenas 0.11% de todo o tempo computacional durante o processo de cálculo que é de $80,06h$. Ao se comparar com uma malha uniforme com o espaçamento correspondente ao nível mais fino da malha composta, o tempo total de CPU equivale à $633,34h$, onde o número de células computacionais armazenados é constante e igual à

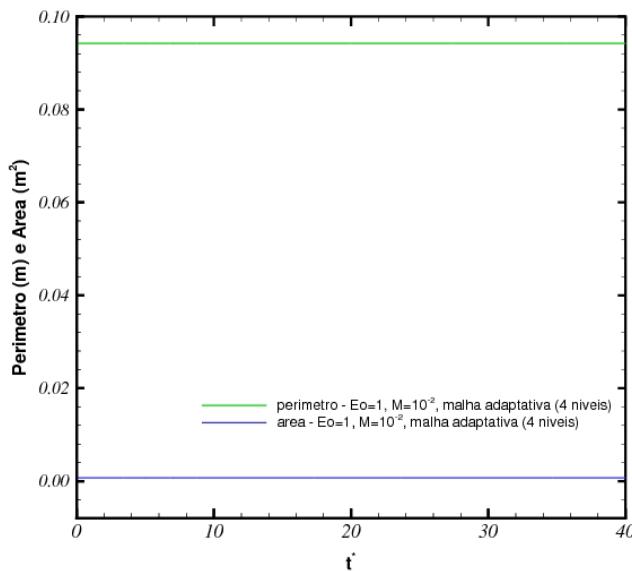


Figura 6.34: Avaliação da conservação da área da bolha e evolução do perímetro ao longo do tempo para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$ na malha composta $32 \times 96L4$.

720.951. Esses testes foram simulados em uma máquina Pentium(R) D CPU 3.40GHz.

6.4.2 Ascensão da Bolha Isolada a Moderados Números de Reynolds

Bolhas e gotas em queda livre ou em ascensão em um meio infinito sobre a influência da gravidade, são geralmente agrupadas nas três categorias descritas a seguir:

- **Esféricas:** bolhas e gotas apresentam uma geometria aproximada de uma esfera se as tensões interfaciais e/ou as forças viscosas são muito mais importantes que as forças de inércia.
- **Elipsoidais:** o termo elipsóide é geralmente usado para se referir à bolhas e gotas que se apresentam oblíquas com uma interface convexa ao redor de toda a sua superfície. Freqüentemente, bolhas e gotas elipsoidais são submetidas a dilatações periódicas ou a movimentos oscilatórios randômicos (*wobbling*), os quais tornam a caracterização de sua geometria particularmente difícil. Fotografias de bolhas e gotas neste regime são apresentadas na Fig. 6.37.

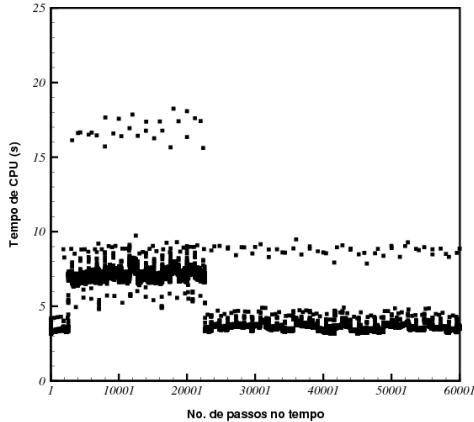


Figura 6.35: Tempo de CPU avaliado durante o processo de cálculo na malha composta $32 \times 96L5$.

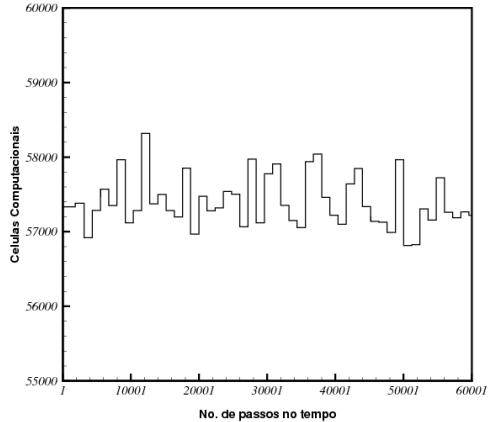


Figura 6.36: Número de células computacionais armazenadas durante o processo de cálculo na malha composta $32 \times 96L5$.

- **Calotas-esféricas:** Este termo advém do fato de grandes bolhas ou gotas apresentarem a geometria de uma calota, com bases lisas ou recortadas. Esta configuração também pode apresentar finas ondações, as quais são referidas como “saias”. Fotografias de bolhas em movimento ascendente neste regime são mostrados na Fig. 6.38.

Devido às tensões interfaciais serem maiores que as forças viscosas, bolhas esféricas geralmente apresentam baixos números de Eötvös e devido às altas forças viscosas possuem baixos números de Reynolds, como apresentado na seção anterior. Bolhas com moderados números de Reynolds podem assumir tanto a configuração elipsóide quanto a configuração de calotas-esféricas.

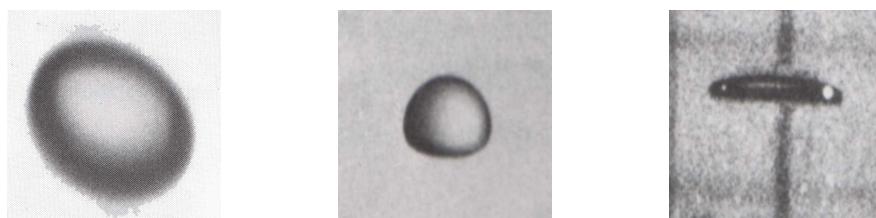


Figura 6.37: Fotografias de bolhas e gotas que assumem a forma elipsóide (CLIFT *et al.*, 1978).



Figura 6.38: Fotografias de bolhas que assumem a forma calota-esférica (CLIFT *et al.*, 1978).

Resultados numéricos, tem sido extensivamente obtidos permitindo visualizar e determinar parâmetros relativos ao escoamento e à interface, os quais muitas vezes não podem ser identificados em análise experimental. Smolianski *et al.* (2007), apresentam uma seqüência de resultados numéricos utilizando métodos dos Elementos Finitos e de Acompanhamento de Interface. A Fig. 6.39, ilustra alguns dos resultados obtidos por Smolianski *et al.* (2007) e as diferentes formas definidas para uma bolha ascendente.

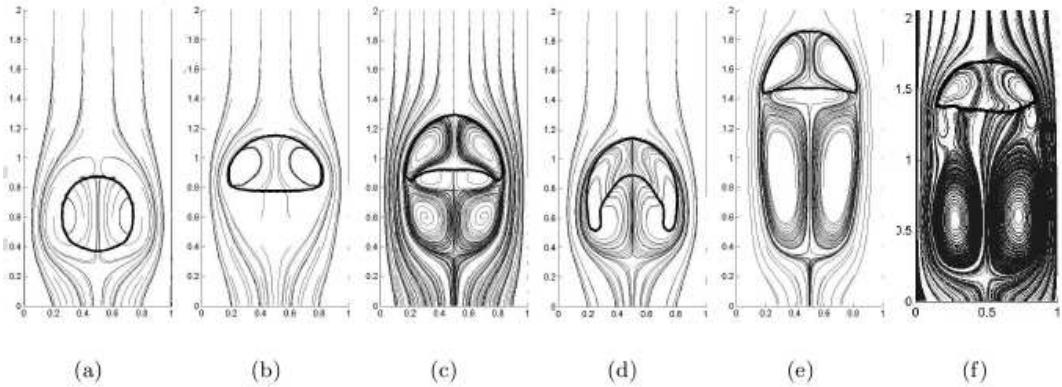


Figura 6.39: Solução numérica obtendo diferentes formas de bolhas: (a) esférica: $Re = 1$, $Eo = 0,6$, (b) elipsóide: $Re = 20$, $Eo = 1,2$, (c) calota-elipsoidal: $Re = 35$ e $Eo = 125$, (d) skirted: $Re = 55$, $Eo = 875$, (e) calota-esférica: $Re = 94$, $Eo = 115$ e (f) wobbling $Re = 1100$ e $Eo = 3$ (SMOLIANSKI, 2007).

Os resultados apresentados nesta seção permitem identificar de forma qualitativa o processo de deformação da bolha a moderados números de Reynolds. Linhas de corrente são mostradas em todos os casos, permitindo identificar a formação de esteiras bem como a sua evolução ao longo do tempo. Campos de vorticidade e a evolução do Re ao longo tempo também são apresentados.

6.4.2.1 Regime Elipsoidal

Na Figura 6.40, apresentam-se os resultados da simulação do movimento de uma interface (bolha) que se deforma, assumindo a geometria final de um elipsóide. As linhas de corrente tanto para o escoamento interno quanto externo à bolha são também apresentadas, permitindo visualizar o movimento das partículas de fluido. O diâmetro da interface é de $d_d = 0,03m$ e o valor do coeficiente da tensão interfacial é $T = 9,0N/m$. As relações das propriedades físicas são $\gamma = 0,5$ e $\lambda = 0,5$, para a massa específica e viscosidade, respectivamente. Os parâmetros adimensionais são $Eo = 2$ e $M = 10^{-2}$. Esse par de parâmetros assumem valores que permitem a deformação da interface, o que está de acordo com o diagrama experimental de Clift *et al.* (1978). Os resultados apresentados foram realizados para uma malha adaptativa com 4 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 32 \times 96$.

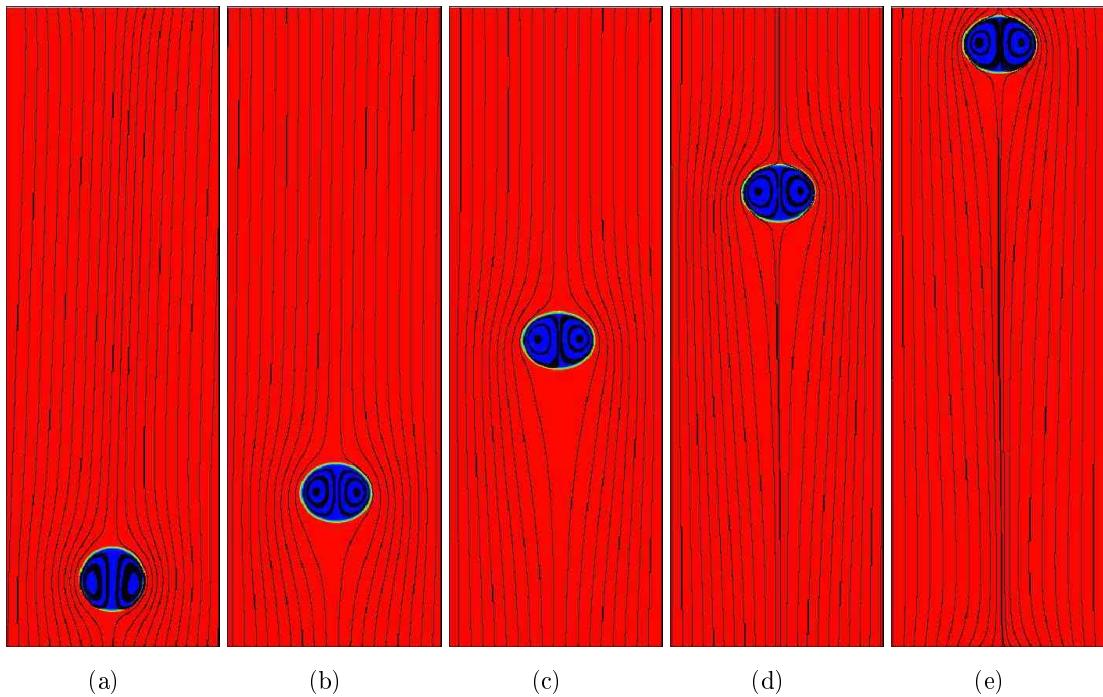


Figura 6.40: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 2$ e $M = 10^{-6}$: (a) $t^* = 0,56$; (b) $t^* = 3,7$; (c) $t^* = 7,4$; (d) $t^* = 10,8$ e (e) $t^* = 14,1$

A evolução temporal do campo de vorticidade para $Eo = 2$ e $M = 10^{-6}$ é mostrado na Fig. 6.41. Verifica-se, que à medida que a bolha se deforma, uma esteira é gerada à jazante da bolha. Clift *et al.* (1978), relata que a formação de esteiras para sistemas

impuros (presença de surfactantes) ocorre para valores de Re aproximadamente iguais a 20. Para sistemas puros a mobilidade interfacial pode significantemente retardar essa formação, sendo observado para Re maiores que 20. O número de Reynolds para $Eo = 2$, $M = 10^{-6}$, $\lambda = 0,5$ e $\gamma = 0,5$, quando a bolha entra em regime é $Re = 33$. A Fig. 6.42 apresenta a evolução temporal do número de Reynolds, avaliado ao longo do tempo característico dado por $t^* = \frac{t}{\sqrt{d_d/g}}$.

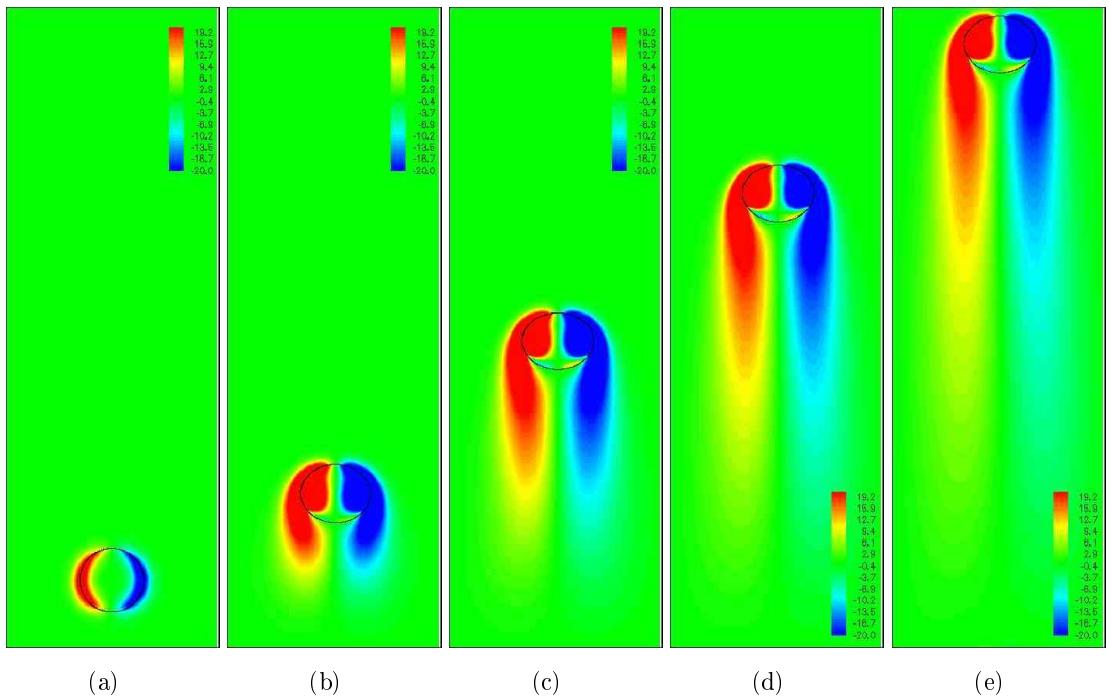


Figura 6.41: Campo de vorticidade na malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 2$ e $M = 10^{-6}$: (a) $t^* = 0,56$; (b) $t^* = 3,7$; (c) $t^* = 7,4$; (d) $t^* = 10,8$ e (e) $t^* = 14,1$

A Figura 6.43 mostra a evolução do perímetro ao longo do tempo característico. A evolução da área é apresentada em conjunto. A Fig. 6.70 apresenta em menor escala a evolução da área relativa, na qual observa-se uma taxa de perda de área de $8,6 \cdot 10^{-3}\%$. O perímetro da bolha tende a se alongar levemente, em consequência da bolha assumir o formato de uma elipse.

Winnikow e Chao (1966) distinguem duas classes de esteiras para partículas de fluido sem a ação de surfactantes: linhas constantes de vórtices (acompanhada por um vórtice toroidal) e esteiras periódicas com centros de vorticidades. Esta última, tipicamente ocorre em geometrias convolutas, as quais inicialmente são simétricas mas, eventualmente, entram em transição e perdem a simetria, formando assim uma esteira instável. Essa

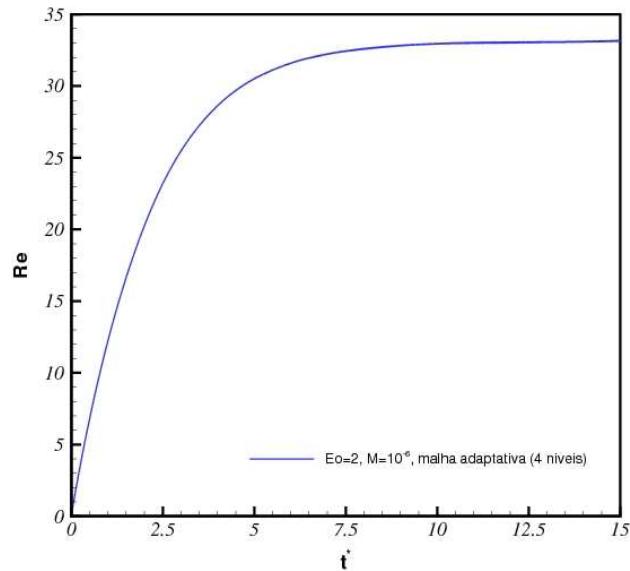


Figura 6.42: Evolução temporal do número de Reynolds, avaliado na malha composta $32 \times 96L4$, para $Eo = 2$ e $M = 10^{-6}$.

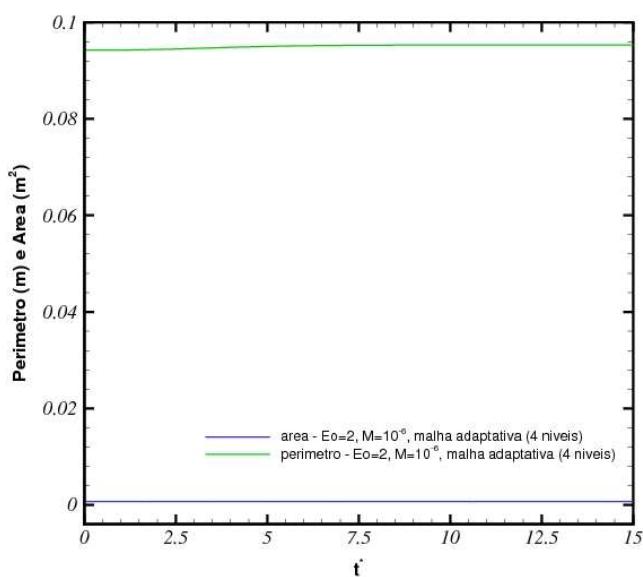


Figura 6.43: Evolução temporal da área e do perímetro na malha composta $32 \times 96L4$, para $Eo = 2$ e $M = 10^{-6}$.

característica está intimamente associada com as oscilações na geometria da bolha. Experimentalmente, recirculações internas são difíceis de serem obtidas. Ainda não é claro se há um vórtice secundário reverso no interior do fluido como indicado pela linha pontilhada. Tal vórtice, no entanto, parece ser necessário para a velocidade e a continuidade das tensões, mas experimentalmente esta evidência ainda não é conclusiva.

Clift *et al.* (1978), na Fig. 6.44, apresentam de forma esquemática as possíveis recirculações à jazante e no interior de uma bolha submetida a uma alta deformação. Nos resultados numéricos obtidos, devido ao fato que as partículas de fluido caminham no mesmo sentido para ambas as fases, não se observa tais vórtices imaginados por Clift *et al.* (1978). Verificam-se linhas de corrente contínuas ao longo de ambas as fases, identificando que, tanto as partículas de fluido da fase contínua quanto, as partículas de fluido da fase dispersa possuem o mesmo sentido de movimento.

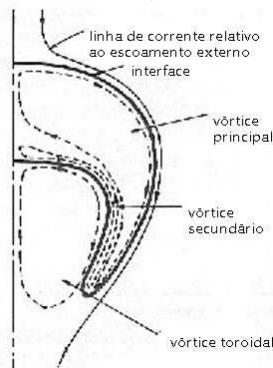


Figura 6.44: Diagrama esquemático de um escoamento interno e externo em uma bolha com elevado Eo (CLIFT *et al.*, 1978).

Para $Eo = 10$ e $M = 10^{-6}$, observam-se as dilatações periódicas ou pulsasões periódicas com fases de acelerações e fases de desacelerações. A Fig. 6.45 apresenta uma seqüência temporal do campo de massa específica sobreposto pelas linhas de corrente. Em sua esteira, são observadas inicialmente a formação de vórtices toroidais e posteriormente uma esteira periódica se estendendo ao longo do caminho, contendo centros de vorticidade.

Os vórtices que são liberados a $Eo = 10$ e $M = 10^{-6}$ devido as pulsasões da bolha, estão sempre em fase como pode ser observado na Fig. 6.46. Por estar usando um domínio periódico em ambas as direções, à medida que a bolha atinge a face norte ela retorna na

face sul. Interrompe-se o processo de cálculo nessa fase, de forma a não permitir que a bolha entre em sua própria esteira, o que alteraria sua geometria e seu percurso.

Os resultados apresentados para $Eo = 10$ e $M = 10^{-6}$ são simulados em uma malha adaptativa com 4 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 32 \times 96$. O passo de tempo utilizado tem ordem $\mathcal{O}(\Delta x)$. A evolução do número de Reynolds pelo tempo característico é mostrado na Fig. 6.47. Oscilações são observadas ao longo de todo o gráfico identificando regiões de aceleração e desaceleração, devido às pulsações da bolha. A evolução do número de Reynolds também é avaliada na malha uniforme 256×768 . Os resultados apresentados são idênticos a malha adaptativa, os quais atingem um valor máximo de $Re = 106$, denotando que a malha adaptativa utilizada está sendo bem empregada ao longo da interface com alto grau de deformação.

A Figura 6.48, mostra a evolução do perímetro ao longo do tempo característico utilizando a malha adaptativa com 4 níveis de refinamento. Verifica-se que, da mesma forma que mostrado no número de Reynolds, ocorre as pulsações na bolha, indentificando-se regiões de dilatações e regiões de contrações. A evolução da área é apresentada em conjunto. A Fig. 6.70, apresenta em menor escala, a evolução da área, onde observa-se uma taxa de aumento absoulto de área de $8,7 \cdot 10^{-3}\%$.

6.4.2.2 Regime Calota-Elipsoidal

À medida que o número de Eötvös aumenta, maiores se tornam as forças de empuxo em relação à tensão interfacial, a qual matém-se constante e igual a $9,0 N/m$ para todos os casos. Para $Eo = 100$ e $M = 100$, onde as tensões viscosas são altas, determinando um número de Reynolds menor, a bolha ascendente atinge a geometria de uma calota-elipsoidal. É fácil observar que, para os casos com números de Reynolds maiores, (e.g. calota-esférica) as bolhas ascendem mais rapidamente que nos regimes com menores números de Reynolds (e.g. calota-elipsoidal). Um caso para o qual a bolha assume a forma final de uma calota-elipsoidal é apresentado na Fig. 6.49, onde $Eo = 100$ e $M = 100$ discretizado na malha adaptativa com 4 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 32 \times 96$. Novamente, na Fig. 6.49 são plotados o campo de massa específica sobreposto pelas linhas de corrente. A esteira formada é constante ao longo do tempo e se desloca junto com a interface.

O campo de vorticidade para $Eo = 100$ e $M = 100$ é apresentado na Fig. 6.50. Quatro

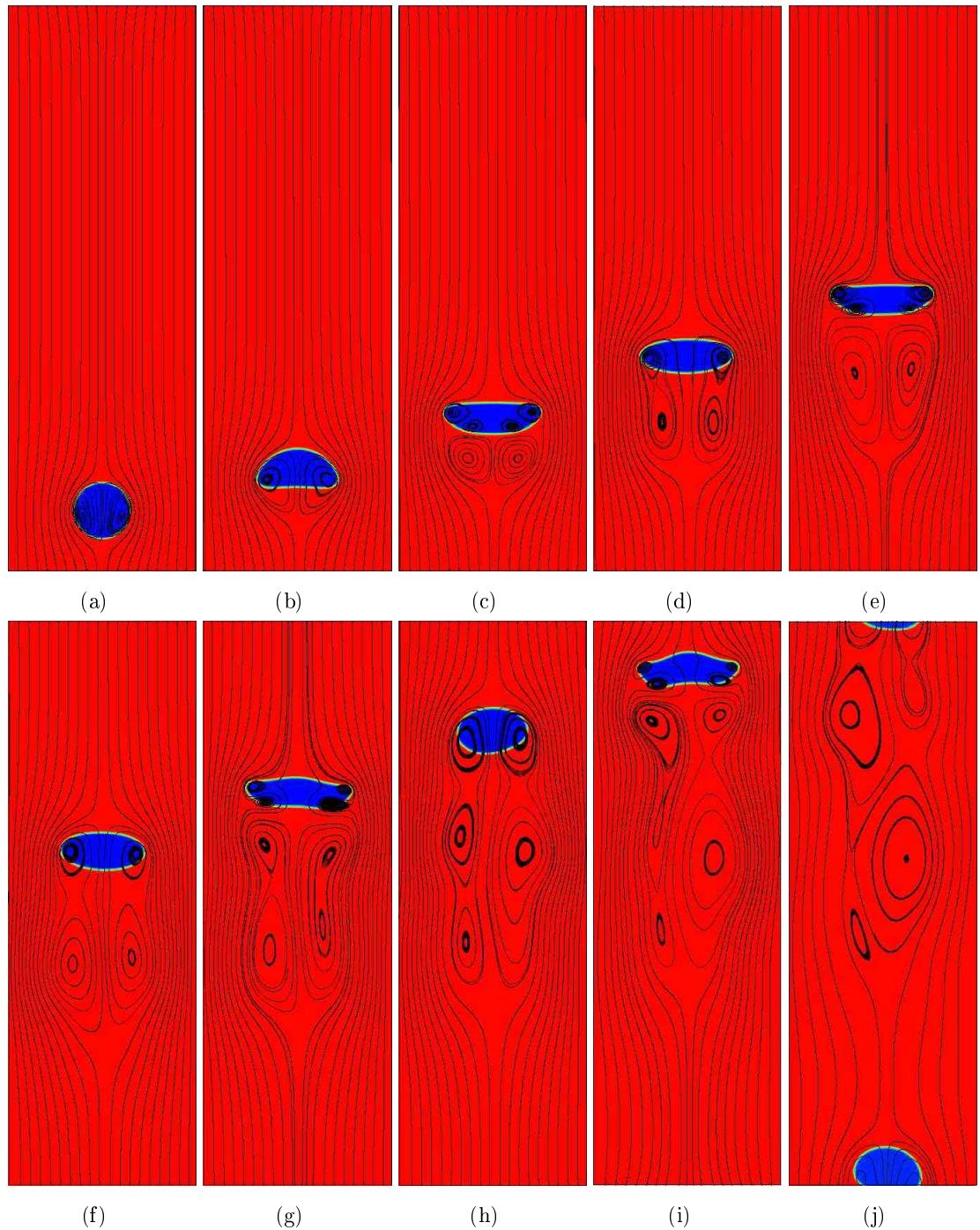


Figura 6.45: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-6}$: (a) $t^* = 0,71$; (b) $t^* = 2,8$; (c) $t^* = 5,6$; (d) $t^* = 8,4$; (e) $t^* = 11,2$; (f) $t^* = 14,0$; (g) $t^* = 16,8$; (h) $t^* = 19,6$; (i) $t^* = 22,4$ e (j) $t^* = 25,2$.

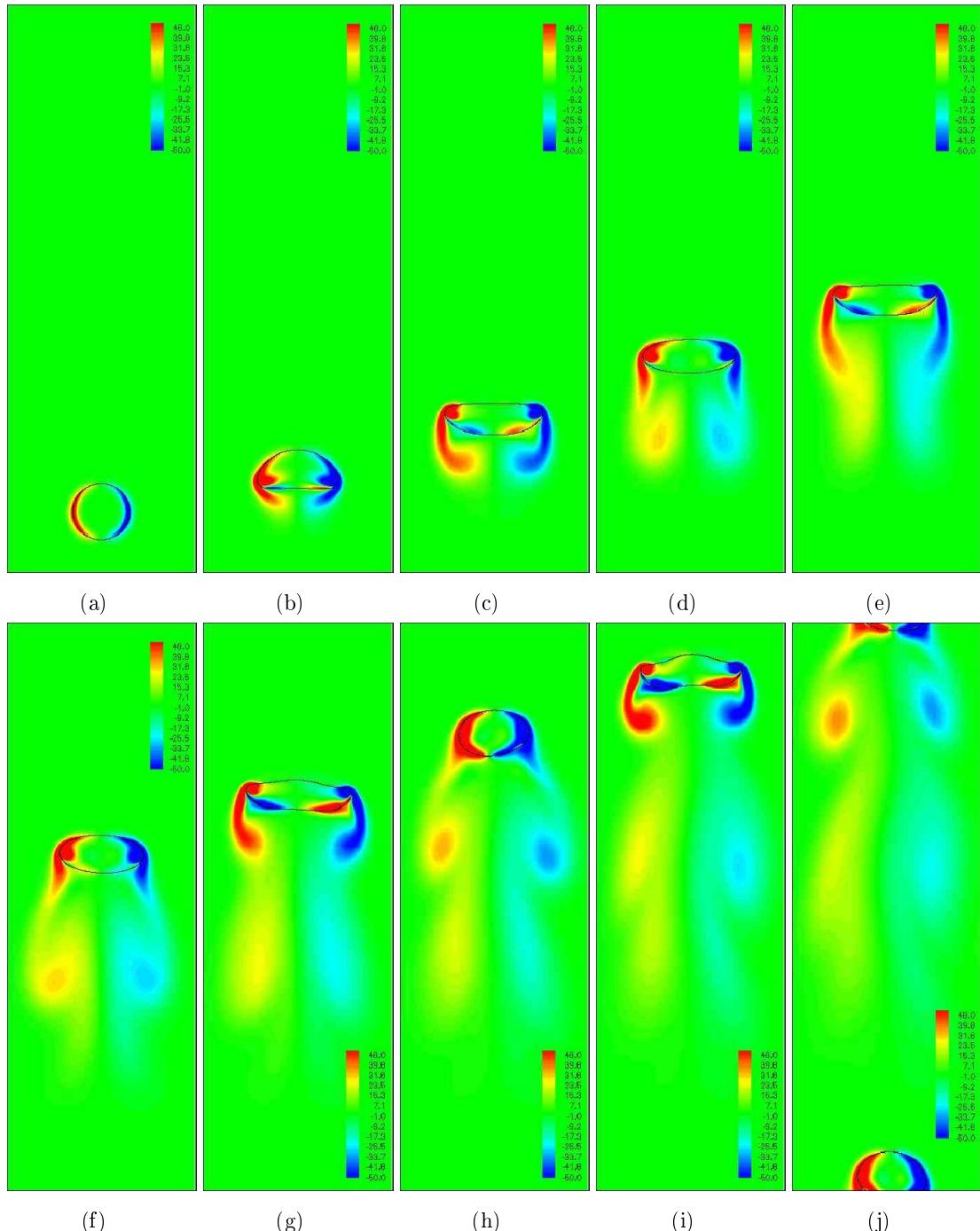


Figura 6.46: Evolução temporal do campo de vorticidade em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-6}$: (a) $t^* = 0, 71$; (b) $t^* = 2, 8$; (c) $t^* = 5, 6$; (d) $t^* = 8, 4$; (e) $t^* = 11, 2$; (f) $t^* = 14, 0$; (g) $t^* = 16, 8$; (h) $t^* = 19, 6$; (i) $t^* = 22, 4$ e (j) $t^* = 25, 2$.

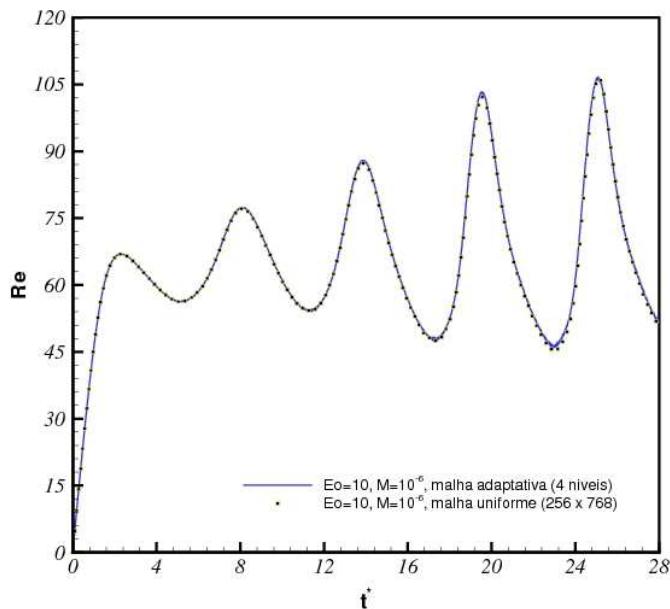


Figura 6.47: Evolução temporal do número de Re avaliado na malha composta $32 \times 96L4$ e na malha uniforme equivalente 256×768 , para $Eo = 10$ e $M = 10^{-6}$.

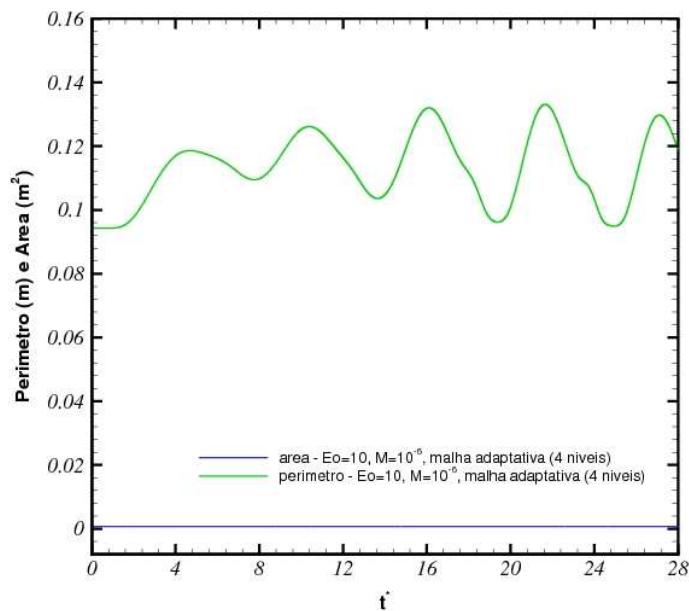


Figura 6.48: Evolução temporal da área e do perímetro da bolha na malha composta $32 \times 96L4$, para $Eo = 10$ e $M = 10^{-6}$.

regiões de vorticidade são observadas, sendo duas nas curvaturas laterais e duas outras nas curvaturas à jazante, com intensidades menores, identificando que em regiões de altas curvaturas ocorre vorticidade e que quanto maior a curvatura mais intensa é a vorticidade gerada. Nota-se que a partir de quando a bolha entra em regime o campo de vorticidade permanece constante ao longo do tempo.

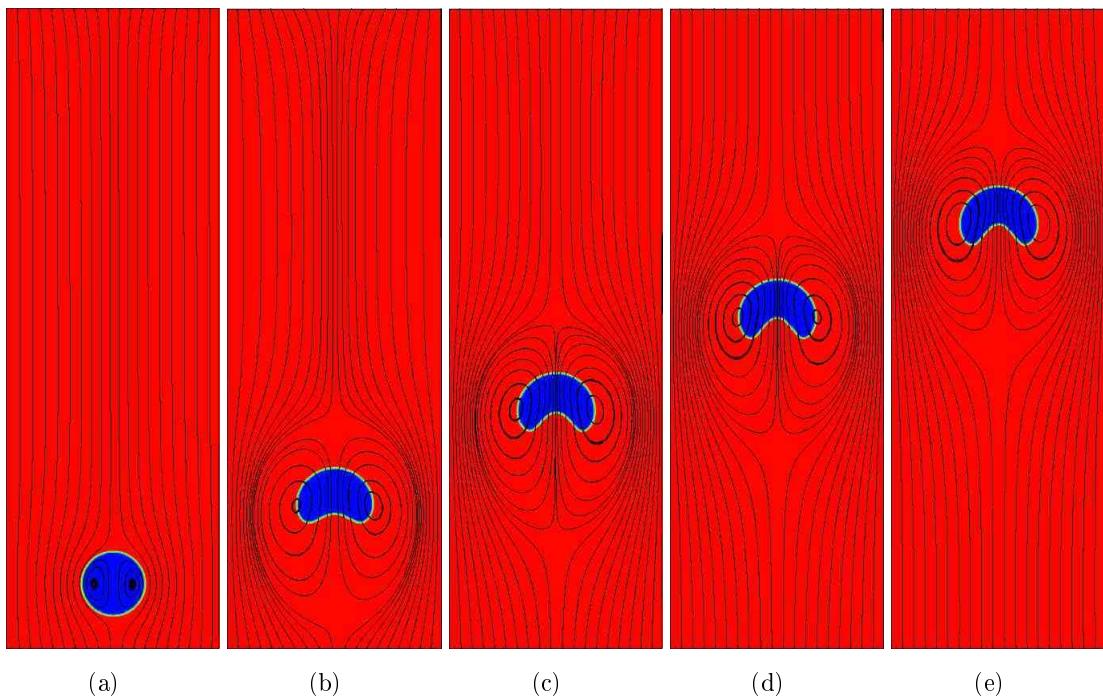


Figura 6.49: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 100$ e $M = 100$: (a) $t^* = 0, 28$; (b) $t^* = 7, 0$; (c) $t^* = 14, 0$; (d) $t^* = 21, 0$ e (e) $t^* = 28, 0$.

Para este par de parâmetros, o número de Reynolds atinge um valor de 2,1 entrando em regime rapidamente. A Fig. 6.51 mostra a evolução do número de Reynolds ao longo do tempo característico. Observa-se que a bolha acelera até um valor máximo de $Re = 2,3$ e depois desacelera entrando em regime. A evolução do perímetro também é avaliada para $Eo = 100$ e $M = 100$, onde o perímetro da bolha aumenta progressivamente até que a bolha atinja a forma de calota-elipsoidal como mostrada na Fig. 6.52. A evolução da área é traçada em conjunto. Como não se observa uma elevada variação na forma da bolha ao longo do tempo, a área tende a se conservar com maior facilidade quando se compara com os outros casos anteriores. A taxa de aumento de área relativa verificada é cerca de $7,7 \cdot 10^{-4}\%$. A Fig. 6.70 apresenta essa variação com maiores detalhes.

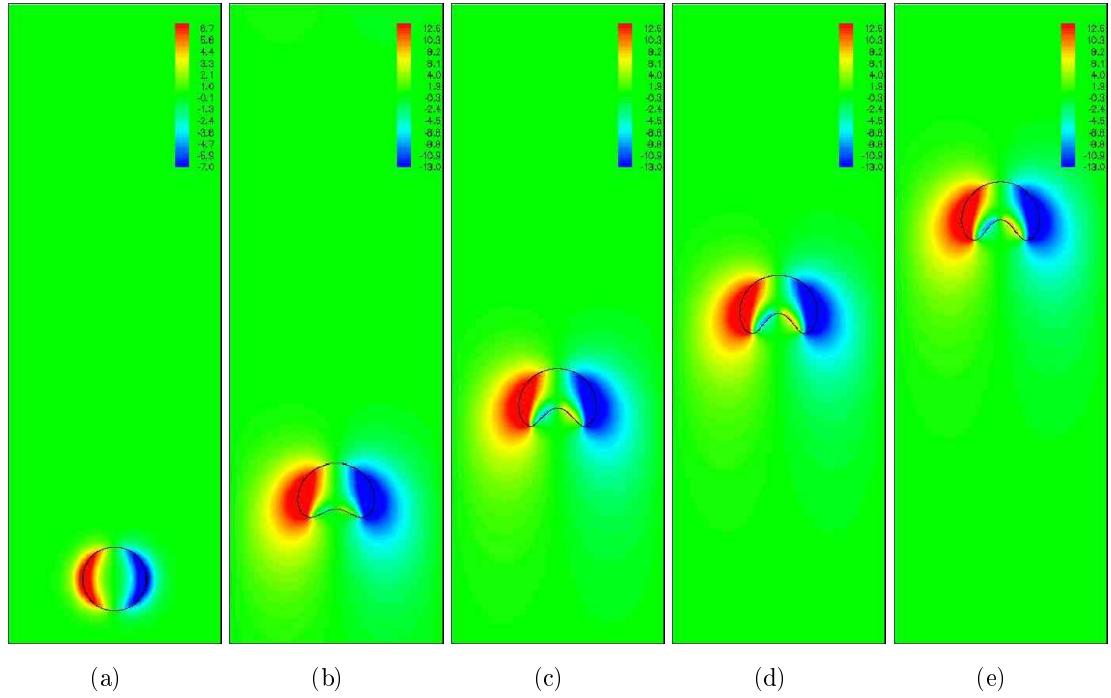


Figura 6.50: Campo de vorticidade na malha composta $32 \times 96L4$ para $Eo = 100$ e $M = 100$:
(a) $t^* = 0, 28$; (b) $t^* = 7, 0$; (c) $t^* = 14, 0$; (d) $t^* = 21, 0$ e (e) $t^* = 28, 0$.

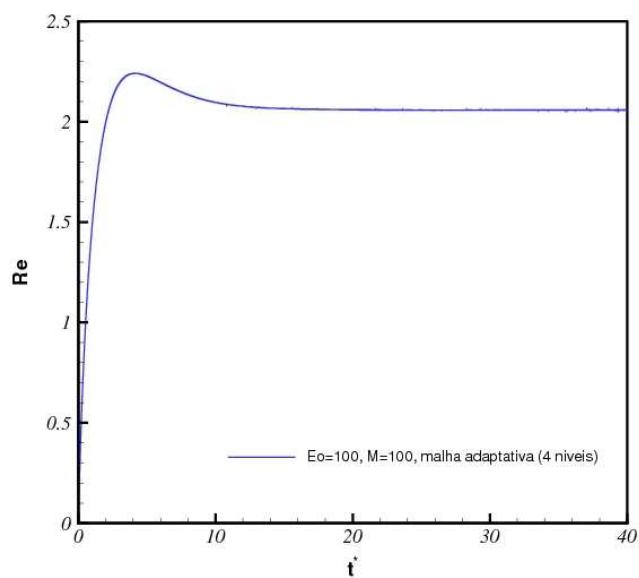


Figura 6.51: Evolução temporal do número de Re avaliado na malha composta $32 \times 96L4$, para $Eo = 100$ e $M = 100$.

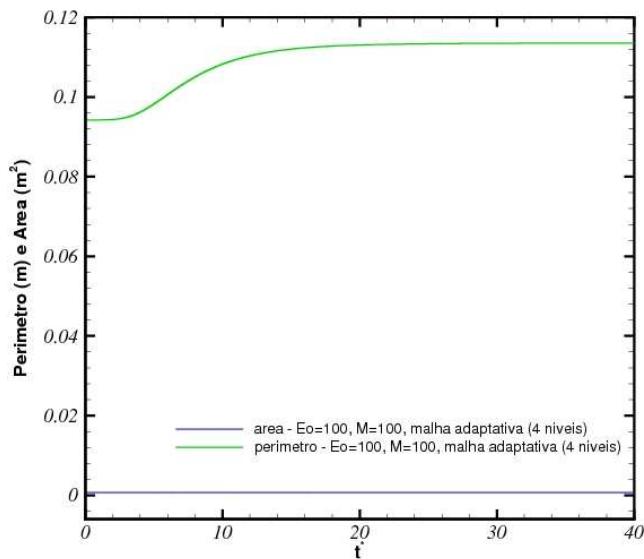


Figura 6.52: Evolução temporal da área e do perímetro na malha composta $32 \times 96L4$, para $Eo = 100$ e $M = 100$.

6.4.2.3 Regime Calota-Esférica

Se o número de Morton diminui, verifica-se que o número de Reynolds aumenta, ou seja, as forças iniciais são maiores que as forças viscosas. Logo, se as forças viscosas diminuem maior se torna a deformação da bolha ao se comparar com o caso mostrado na Fig. 6.49, mantendo-se a mesma tensão interfacial. Para $Eo = 100$ e baixos valores de Morton, apresenta-se a formação de “saias” nas extremidades laterais da bolha. Esta configuração é denominada *skirted*. A Fig. 6.53 mostra a transição entre as formas *skirted* e calota-esférica, onde a “saia” gerada se retrai e a forma final de calota-esférica é observada, quando a bolha entra em regime. Duas longas esteiras se estendem ao longo do domínio à medida que a interface se desloca, onde são observados os desprendimentos de centros periódicos de vorticidade.

A Figura 6.53 mostra uma seqüência temporal do campo de massa específica sobreposto pelas linhas de corrente. Os valores para d_d , λ , γ e T , assumem os mesmos valores apresentados para os casos anteriores. Para capturar um maior nível de detalhes, devido às elevadas curvaturas, observadas na formação das “saias”, são utilizados 5 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 32 \times 96$.

A Figura 6.54 mostra o campo de vorticidade para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$. Nas regiões de alta curvatura verifica-se alta vorticidade. À medida que a “saia” é formada, estirando-se e retraindo-se, vórtices são desprendidos da interface. Quando a bolha entra em regime estacionário ela atinge o formato de calota-esférica.

A Figura 6.55 apresenta a evolução do número de Reynolds ao longo do tempo para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$, o qual atinge um valor máximo de $Re = 61$. Devido às oscilações da bolha, fases de aceleração e desaceleração são determinadas, até entrar em regime estacionário quando a aceleração é nula. A variação do perímetro ao longo do tempo é apresentada na Fig. 6.56. Nota-se que à medida que a bolha se retrai ela tende a acelerar. Em conjunto também é traçada a variação da área ao longo do tempo. A taxa de aumento de área relativa é cerca de $1,3 \cdot 10^{-2}\%$. A Fig. 6.70 mostra com maiores detalhes essa variação em comparação com os outros casos.

Os resultados para $Eo = 800$ e $M = 10^{-5}$ são apresentados nas Figs. 6.58 e 6.60 para uma discretização realizada na malha adaptativa com 6 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 32 \times 96$ em $\Omega = [0; 1] \times [0; 3]$. Para esse número de Eötvös, experimentalmente a bolha atinge primeiramente a forma *skirted*. Posteriormente, a “saia” se rompe devido a ação dos vórtices na esteira da bolha e a parte restante da bolha rapidamente se desenvolve atingindo a forma de uma calota-esférica (SMOLIANSKI, 2005). Na verdade, essa ruptura deveria ser observada para valores de Reynolds menores como, por exemplo, no caso anterior. Sussman *et al.* (1999) afirmam que isso provavelmente não ocorre devido essencialmente ao comportamento tridimensional da bolha. Entretanto, um resultado qualitativo do processo de ínicio de rompimento da bolha é apresentado na Fig. 6.58, para variados instantes de tempo. O processo de rompimento não foi implementado no presente trabalho. No entanto, os resultados apresentados nas Figs. 6.58 e 6.60 mostram a potencialidade do código para se trabalhar com altas deformações da interface.

Smolianski (2005) apresenta um resultado numérico de rompimento da bolha, conforme mostrado na Fig. 6.57. Assim, pode-se notar que para o instante de tempo igual a $0,1s$ (Fig. 6.58i) deveria ocorrer o rompimento da bolha gerando mais duas novas estruturas.

O campo de vorticidade para $Eo = 800$ e $M = 10^{-5}$ é mostrado nas Fig. 6.60. Regiões de alta vorticidade são observadas tanto no escoamento interno quanto externo. No escoamento interno (Figs. 6.60l a 6.60n) observa-se o emparelhamento de vórtices co-rotativos. No entanto, isto não é mais físico pois a bolha, neste ponto, já deveria ter

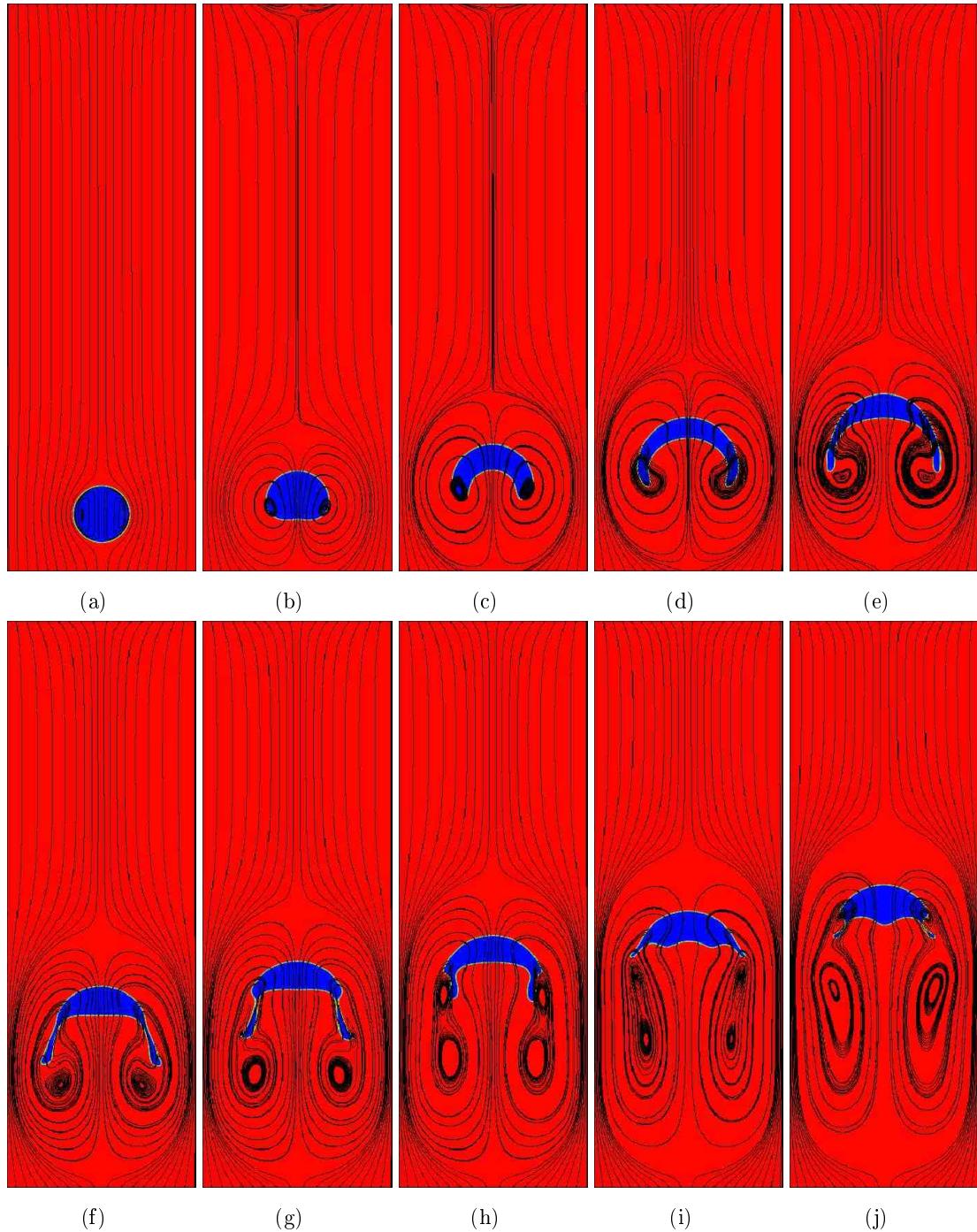


Figura 6.53: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $32 \times 96L5$ para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$: (a) $t^* = 0, 14$; (b) $t^* = 1, 56$; (c) $t^* = 3, 12$; (d) $t^* = 4, 68$; (e) $t^* = 6, 24$; (f) $t^* = 7, 8$; (g) $t = 9, 36$; (h) $t^* = 10, 92$; (i) $t^* = 12, 48$ e (j) $t^* = 14, 04$.

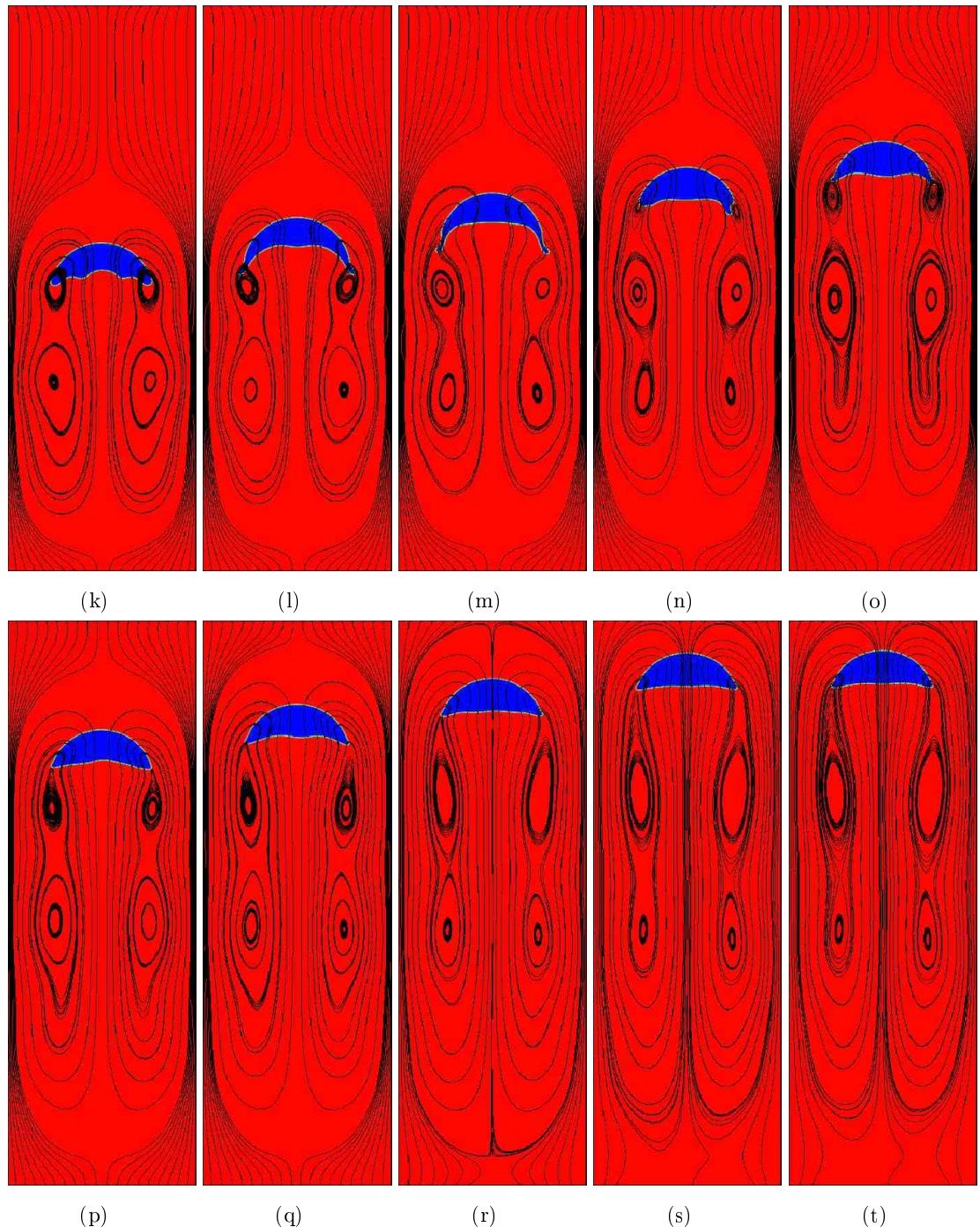


Figura 6.53: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $32 \times 96L5$ para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$: (k) $t^* = 15, 6$; (l) $t^* = 17, 16$; (m) $t^* = 18, 72$; (n) $t^* = 20, 28$; (o) $t^* = 21, 84$; (p) $t^* = 23, 4$; (q) $t^* = 24, 96$; (r) $t^* = 26, 52$; (s) $t^* = 27, 3$ e (t) $t^* = 28, 0$.

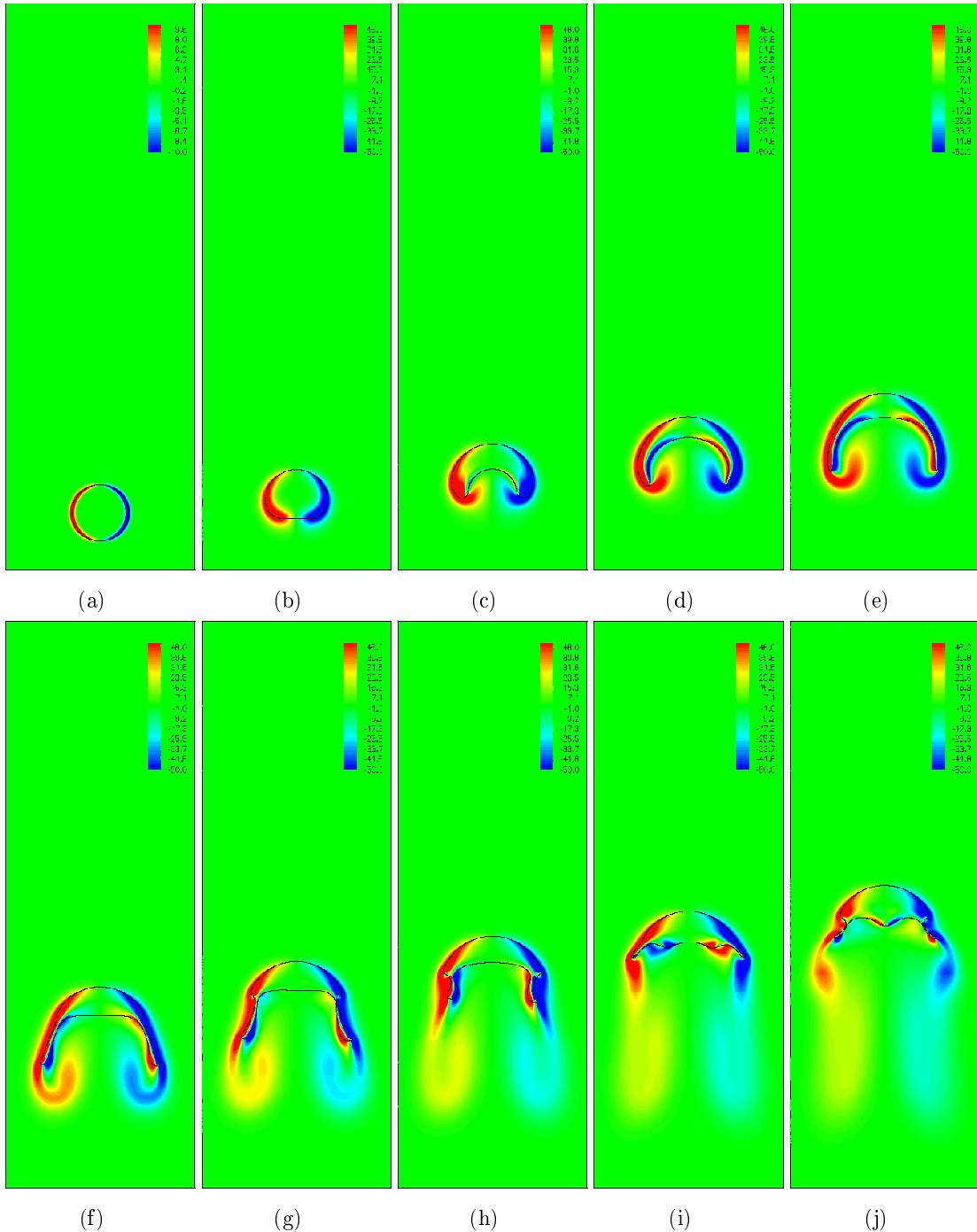


Figura 6.54: Evolução temporal do campo de vorticidade em uma malha composta $32 \times 96L5$ para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$: (a) $t^* = 0,14$; (b) $t^* = 1,56$; (c) $t^* = 3,12$; (d) $t^* = 4,68$; (e) $t^* = 6,24$; (f) $t^* = 7,8$; (g) $t = 9,36$; (h) $t^* = 10,92$; (i) $t^* = 12,48$ e (j) $t^* = 14,04$.

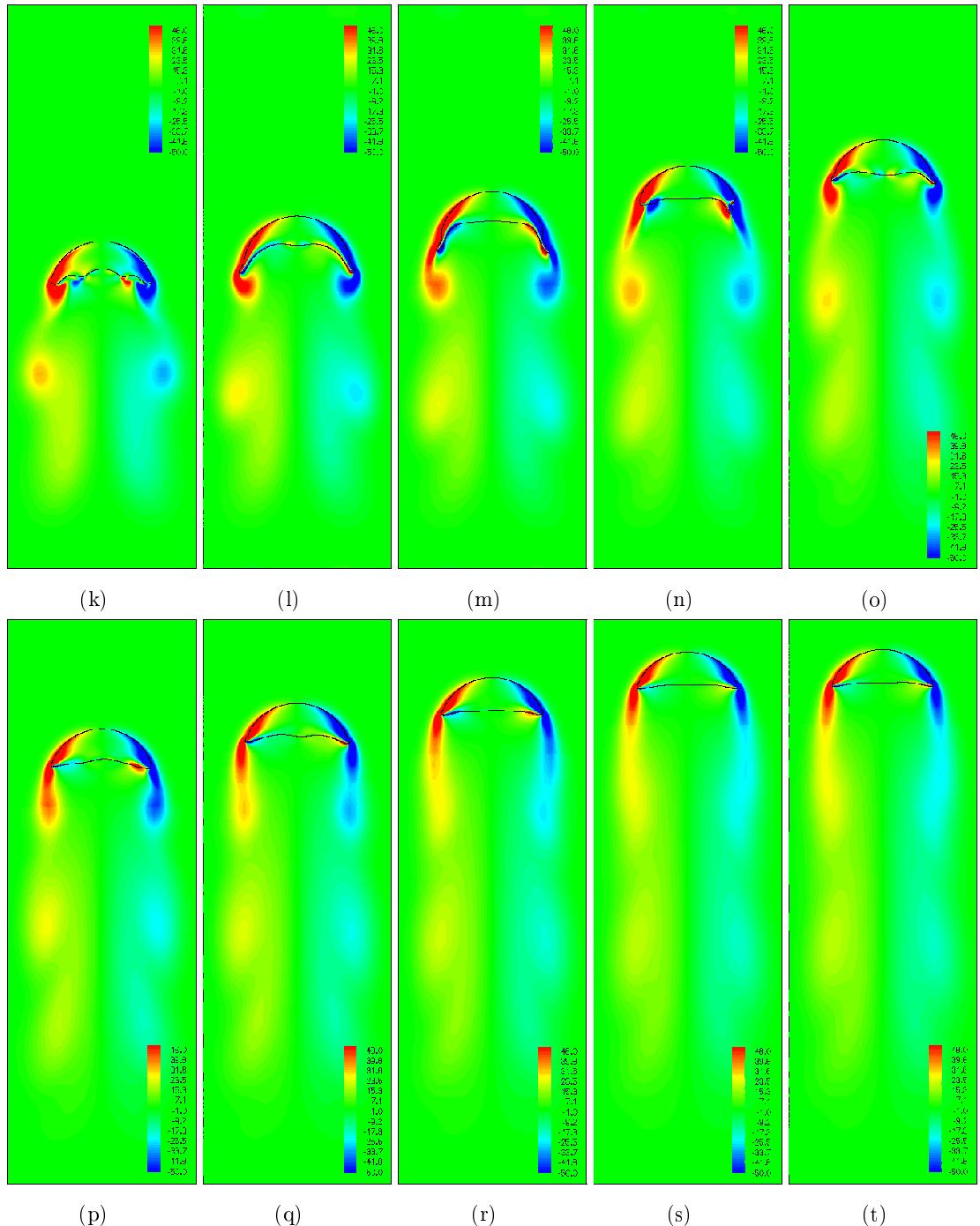


Figura 6.54: Evolução temporal do campo de vorticidade em uma malha composta $32 \times 96L5$ para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$: (k) $t^* = 15, 6$; (l) $t^* = 17, 16$; (m) $t^* = 18, 72$; (n) $t^* = 20, 28$; (o) $t^* = 21, 84$; (p) $t^* = 23, 4$; (q) $t^* = 24, 96$; (r) $t^* = 26, 52$; (s) $t^* = 27, 3$ e (t) $t^* = 28, 0$.

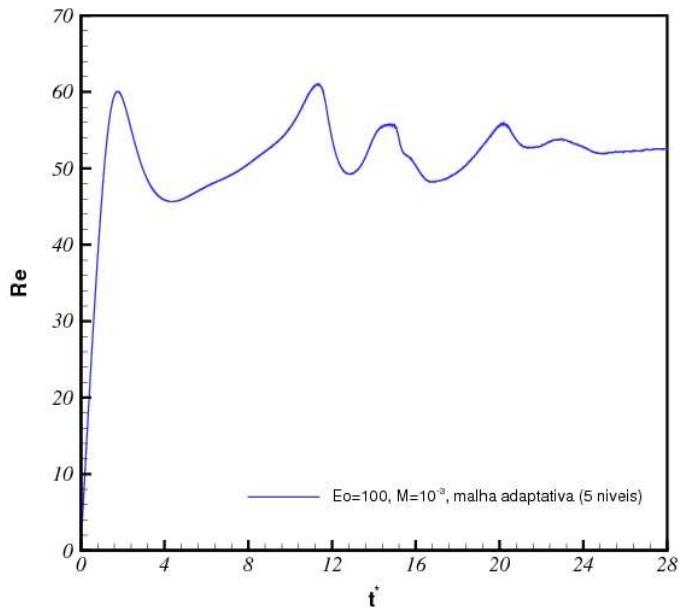


Figura 6.55: Evolução temporal do número de Re avaliado na malha composta $32 \times 96L5$, para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$.

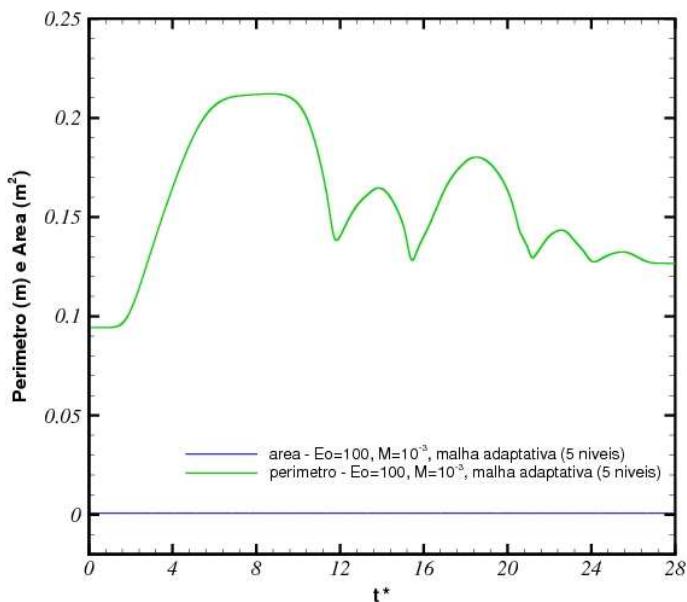


Figura 6.56: Evolução temporal da área e do perímetro na malha composta $32 \times 96L5$, para $Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$.

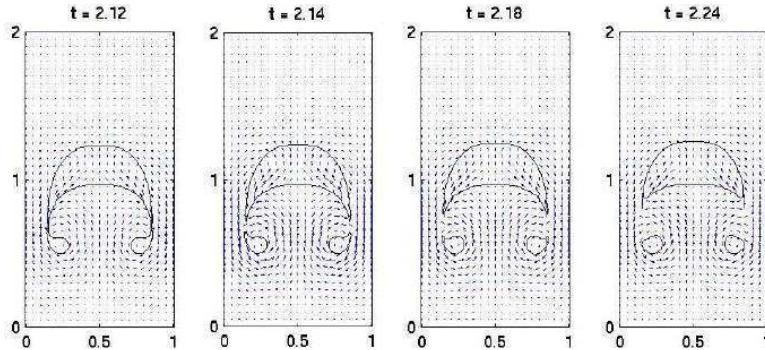


Figura 6.57: Rompimento de uma bolha ascendente para $Eo = 500$, $Re = 700$, $\gamma = 0,001$ e $\lambda = 0,01$ (SMOLIANSKI, 2005).

sido fragmentada. A evolução temporal do número de Reynolds é mostrada na Fig. 6.59. A interrupção do cálculo se dá devido a falta do modelo de fragmentação, o qual leva a resultados destituídos de significado físico.

6.4.3 Ascensão da Bolha Isolada a Altos Números de Reynolds

Apesar das simulações descritas anteriormente ilustrarem o comportamento de bolhas dispersas em um meio fluido para baixos e moderados Reynolds, verifica-se que em algumas situações práticas o número de Reynolds é relativamente alto. É conhecido que para altos Reynolds as bolhas ascendem de forma instável, ou seja, ascendendo ao longo de um percurso espiralado. Quando a forma e a trajetória das bolhas variam constantemente, o regime de movimento é denominado de *wobbling*.

A formação de vórtices ocorre nos diferentes regimes de escoamentos tanto interno quanto externos a bolha. Para o caso de *wobbling*, os vórtices não simétricos são mais “destacáveis”, o que aumenta o grau de dificuldade da simulação numérica na busca de captar estas instabilidades, tanto na esteira quanto ao longo da interface. O *wobbling*, tipicamente aparece para números de Reynolds elevados quando o número de Eötvös está entre 1 e 100.

A bolha no regime *wobbling* está submetida a deformações permanentes resultantes da instabilidade e da assimetria na evolução da esteira. Em particular, pares não simétricos de vórtices secundários são claramente observados na esteira como consequência da separação da camada limite dos diferentes lados da superfície da bolha. Estas estrutu-

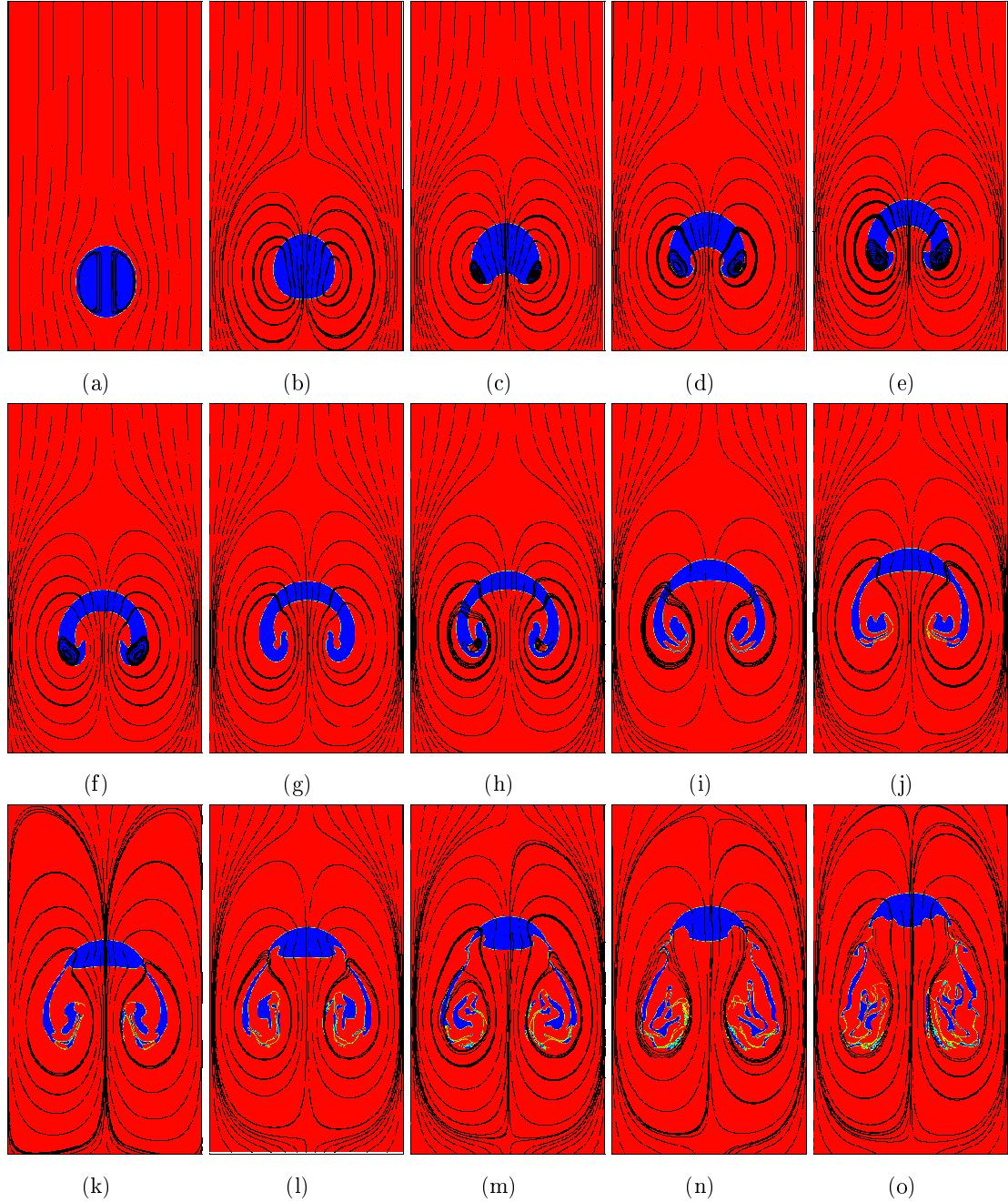


Figura 6.58: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $32 \times 96L6$ para $Eo = 800$ e $M = 10^{-5}$: (a) $t^* = 0,07$; (b) $t^* = 0,57$; (c) $t^* = 1,14$; (d) $t^* = 1,71$; (e) $t^* = 2,28$; (f) $t^* = 2,85$; (g) $t^* = 3,42$; (h) $t^* = 3,99$; (i) $t^* = 4,56$; (j) $t^* = 5,13$; (k) $t^* = 5,7$; (l) $t^* = 6,27$; (m) $t^* = 6,84$; (n) $t^* = 7,41$ e (o) $t^* = 7,98$.

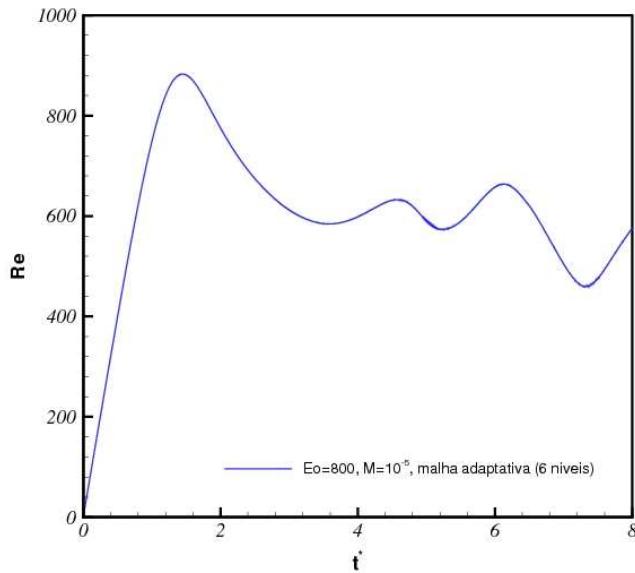


Figura 6.59: Evolução temporal do número de Reynolds avaliado na malha composta $32 \times 96L6$, para $Eo = 800$ e $M = 10^{-5}$.

ras se assemelham aos vórtices de von Karman, tipicamente formados à jazante de um escoamento ao redor de um corpo rígido.

Ellingsen e Risso (2001) em estudos experimentais de bolhas isoladas sem a ação de surfactantes, sugerem que o regime *wobbling* desenvolve dois modos transicionários. O primeiro modo leva a uma trajetória em zig-zag no plano. No segundo modo, a trajetória se altera progressivamente em uma hélice.

Liu *et al.* (2005) levanta análises experimentais das estruturas induzidas no escoamento por uma bolha de gás em uma coluna retangular usando PIV (*Particle Image Velocimetry*). Os autores observaram que a trajetória das bolhas se altera de uma dimensão para três dimensões quando a viscosidade do líquido é reduzida. A intensidade turbulenta também é analisada para líquidos de baixa viscosidade. Dessa forma, comprehende-se que a interface não somente translada mas também rotaciona sobre seu próprio eixo. A Fig. 6.61 ilustra a trajetória e a forma da bolha de gás dispersa em água deionizada e em água contendo 50% de glicerina. Na Fig. 6.62, verifica-se de forma mais detalhada as alterações no formato da bolha para alto número de Reynolds.

Computacionalmente, bolhas bidimensionais em domínio periódico atingem o regime

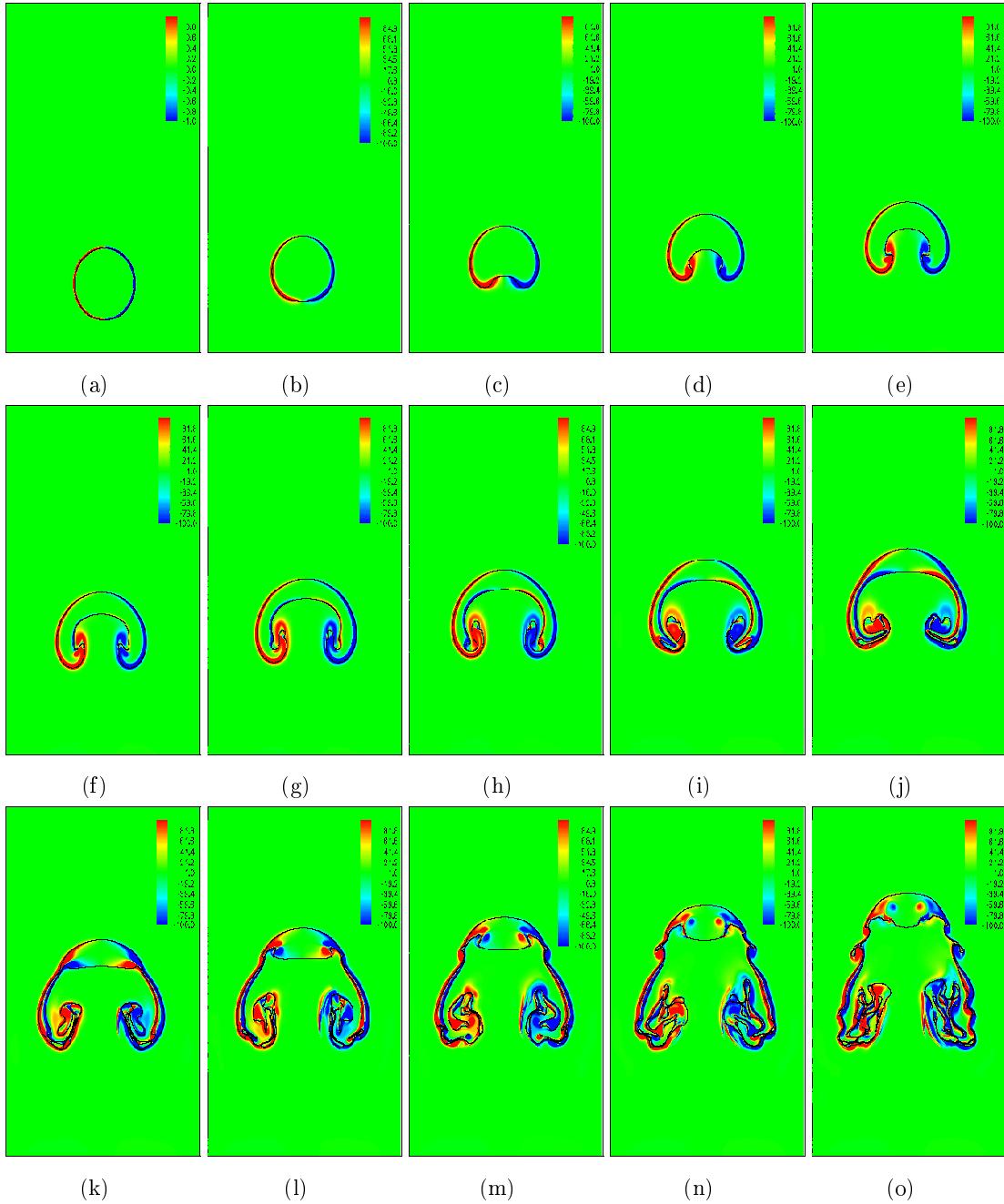


Figura 6.60: Evolução temporal do campo de vorticidade em uma malha composta $32 \times 96L6$ para $Eo = 800$ e $M = 10^{-5}$. (a) $t^* = 0,07$; (b) $t^* = 0,57$; (c) $t^* = 1,14$; (d) $t^* = 1,71$; (e) $t^* = 2,28$; (f) $t^* = 2,85$; (g) $t^* = 3,42$; (h) $t^* = 3,99$; (i) $t^* = 4,56$; (j) $t^* = 5,13$; (k) $t^* = 5,7$; (l) $t^* = 6,27$; (m) $t^* = 6,84$; (n) $t^* = 7,41$ e (o) $t^* = 7,98$.

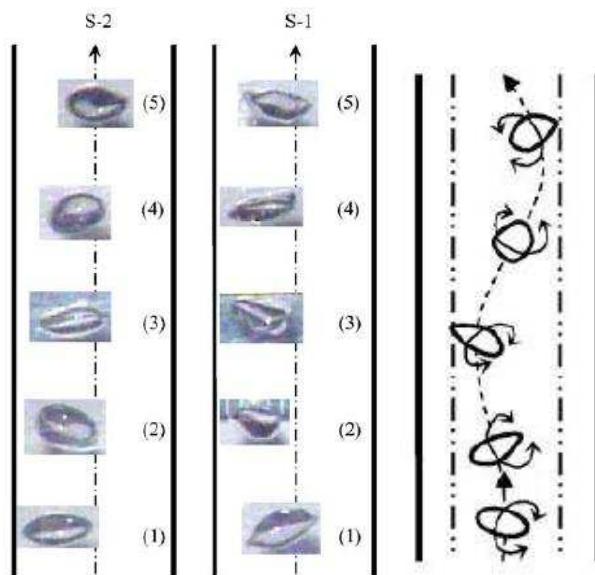


Figura 6.61: Trajetória tridimensional de bolhas de gás dispersas em um fluido (água deionizada) de baixa viscosidade (LIU *et al.*, 2005).

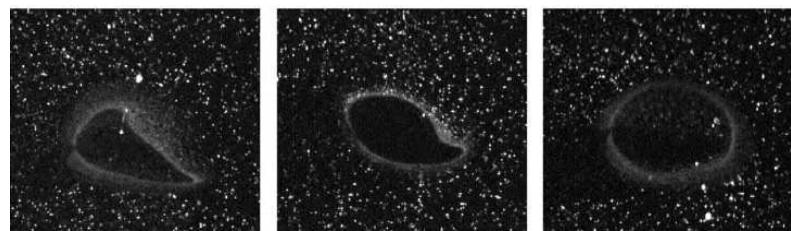


Figura 6.62: Imagens de um *wobbling* capturadas por Liu *et al.* (2005) utilizando PIV.

wobbling para números de Reynolds muito menores que os casos tridimensionais. Esmaeeli *et al.* (1994) analisaram brevemente bolhas em um domínio periódico e observaram que as bolhas desaceleram significantemente uma vez que o processo de *wobbling* se inicializa. Isto indica que este tipo de movimento aumenta a força de arrasto. Göz *et al.* (2000) examinaram o comportamento das bolhas para altos números de Reynolds e verificaram que um movimento caótico é apresentado. Entretanto, uma vez que as bolhas assumem a forma de calotas-esféricas, tais movimentos não são mais observados. Tryggvason *et al.* (2006) verifica o regime *wobbling* na simulação numérica de múltiplas bolhas usando simulação numérica direta. Resultados preliminares demonstram que o regime *wobbling* não se inicializa até que o número de Reynolds seja consideravelmente alto.

Sussman *et al.* (1994), apresentam resultados numéricos para a simulação de bolhas e gotas isoladas onde tanto o processo de fragmentação como a coalisão são simulados. A evolução ascendente de bolhas isoladas é investigada para altos números de Reynolds. Para $Re = 1.000$, observa-se que antes da bolha atingir o regime de calota-esférica ela se fragmenta quando a “saia” é formada. Para estes resultados, não se verificam as trajetórias de zig-zag ou trajetórias em hélice. Aqueles autores no entanto, relatam instabilidades numéricas encontradas devido ao processo de regularização da malha lagrangiana adotada. Smolianski *et al.* (2004) observaram o mesmo comportamento usando o Método dos Elementos Finitos e uma função indicadora, mas relatam que, devido à densidade da malha, não é possível estender o domínio buscando captar as fases de translação e rotação da interface.

Os resultados apresentados nesta seção utilizam malha adaptativa com 5 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 64 \times 192$ em $\Omega = [0; 2] \times [0; 6]$, com viscosidade turbulenta (Eq. 3.39), onde $Cs = 0, 18$. Para o caso de *wobbling*, a modelagem de turbulência é aplicada, utilizando o modelo sub-malha de Smagorinsky. O passo de tempo é da $\mathcal{O}(\Delta x)$. Testes preliminares mostraram que quanto maior for o nível de refinamento, menos rígido pode se tornar o coeficiente de segurança C . As variações de C foram de 0,2 a 0,6, para os quais o código apresentou estabilidade.

Os parâmetros adimensionais adotados para o regime *wobbling* são $Eo = 10$, $M = 10^{-9}$, $\lambda = 0,5$ e $\gamma = 0,5$. O mesmo diâmetro e tensão superficial para os casos anteriores são mantidos ($d_d = 0,03m$ e $T = 9N/m$). Os contornos da malha adaptativa empregada são visualizados na Fig. 6.63. Nota-se que o refinamento acompanha a posição da interface

e, à medida que ela se deforma, o refinamento também acompanha a deformação.

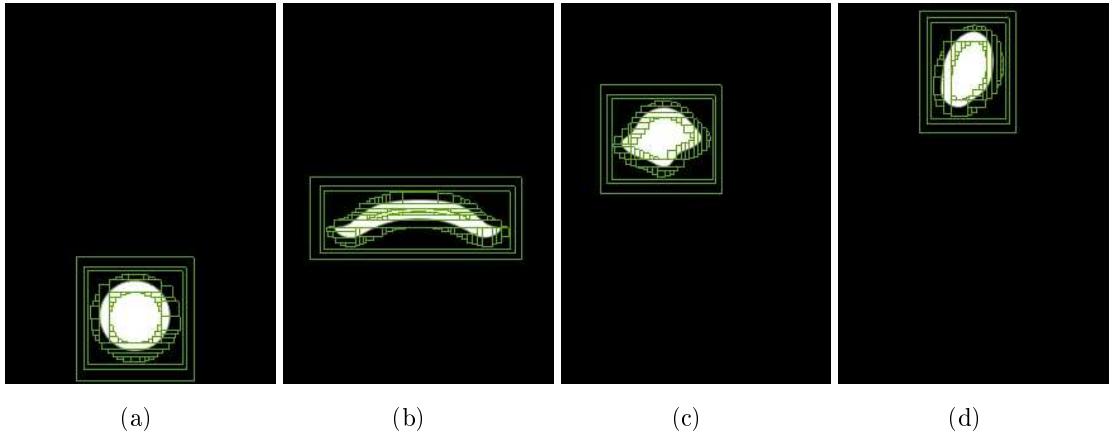


Figura 6.63: Evolução da remalhagem ao longo do tempo na malha composta $64 \times 192L5$: (a) $t^* = 0, 35$; (b) $t^* = 9, 2$; (c) $t^* = 20, 7$ e (d) $t^* = 32, 2$.

A Figura 6.64 apresenta a evolução da interface ao longo do tempo. Observa-se uma trajetória instável ao longo do domínio, onde a interface translada formando um zig-zag. Uma amostra da malha lagrangiana também é apresentada, comprovando que os pontos lagrangianos permanecem igualmente distribuídos. A evolução temporal do campo de massa específica sobreposto pelas linhas de corrente é mostrado na Fig. 6.65. Uma esteira com centros de vorticidades periódicos é formada à juzante da bolha, de forma que à medida que a bolha translada vórtices são desprendidos da interface.

A evolução do campo de vorticidade para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$ é apresentado nas Fig. 6.66. Na fase inicial, a bolha se deforma em trajetória retílinea e vórtices em fase são desprendidos da interface (veja Fig. 6.66a - 6.66e). À medida que a bolha se deforma, vórtices não simétricos são liberados alterando a sua trajetória, que por sua vez afetam novamente a vorticidade. Assim, vórtices fora de fase passam a ser gerados (veja Figs. 6.66k - 6.66t). É importante notar que o emparelhamento de vórtices é observado para o regime *wobbling*, como mostrado nas Figs. 6.66s e 6.66t. Devido à trajetória desenvolvida pela interface, é esperado que o emparelhamento (Fig. 6.66m) e a interação entre os vórtices (Fig. 6.66s), tanto interior à interface quanto exterior à interface ocorressem. No entanto, não se conhece nenhum dado experimental ou numérico sobre esse fenômeno.

A evolução temporal do campo de pressão para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$ na malha adaptativa com 5 níveis de refinamento é mostrada na Fig. 6.67. Observa-se que para

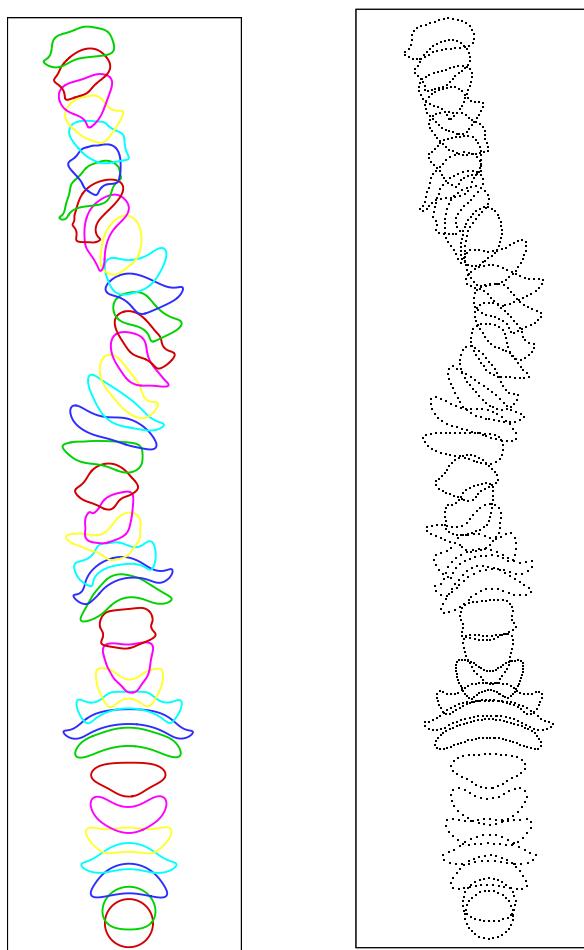


Figura 6.64: Deformação da bolha ascendente (esquerda) e distribuição dos pontos lagrangianos (direita) ao longo do tempo para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$ na malha composta $64 \times 192L5$.

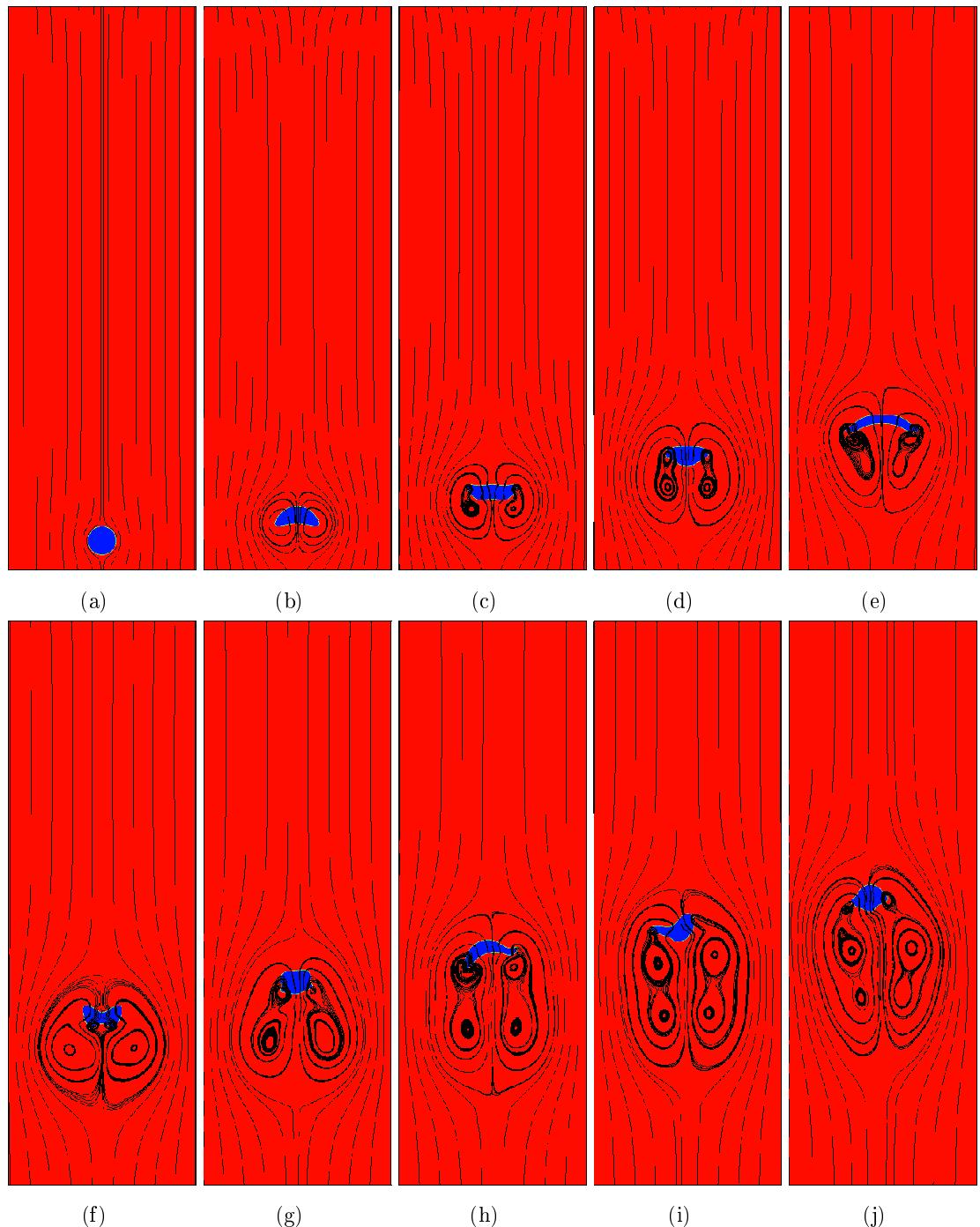


Figura 6.65: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $64 \times 192L5$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$. (a) $t^* = 0, 35$; (b) $t^* = 2, 3$; (c) $t^* = 4, 6$; (d) $t^* = 6, 9$; (e) $t^* = 9, 2$; (f) $t^* = 11, 5$; (g) $t^* = 13, 8$; (h) $t^* = 16, 1$; (i) $t^* = 18, 4$ e (j) $t^* = 20, 7$.

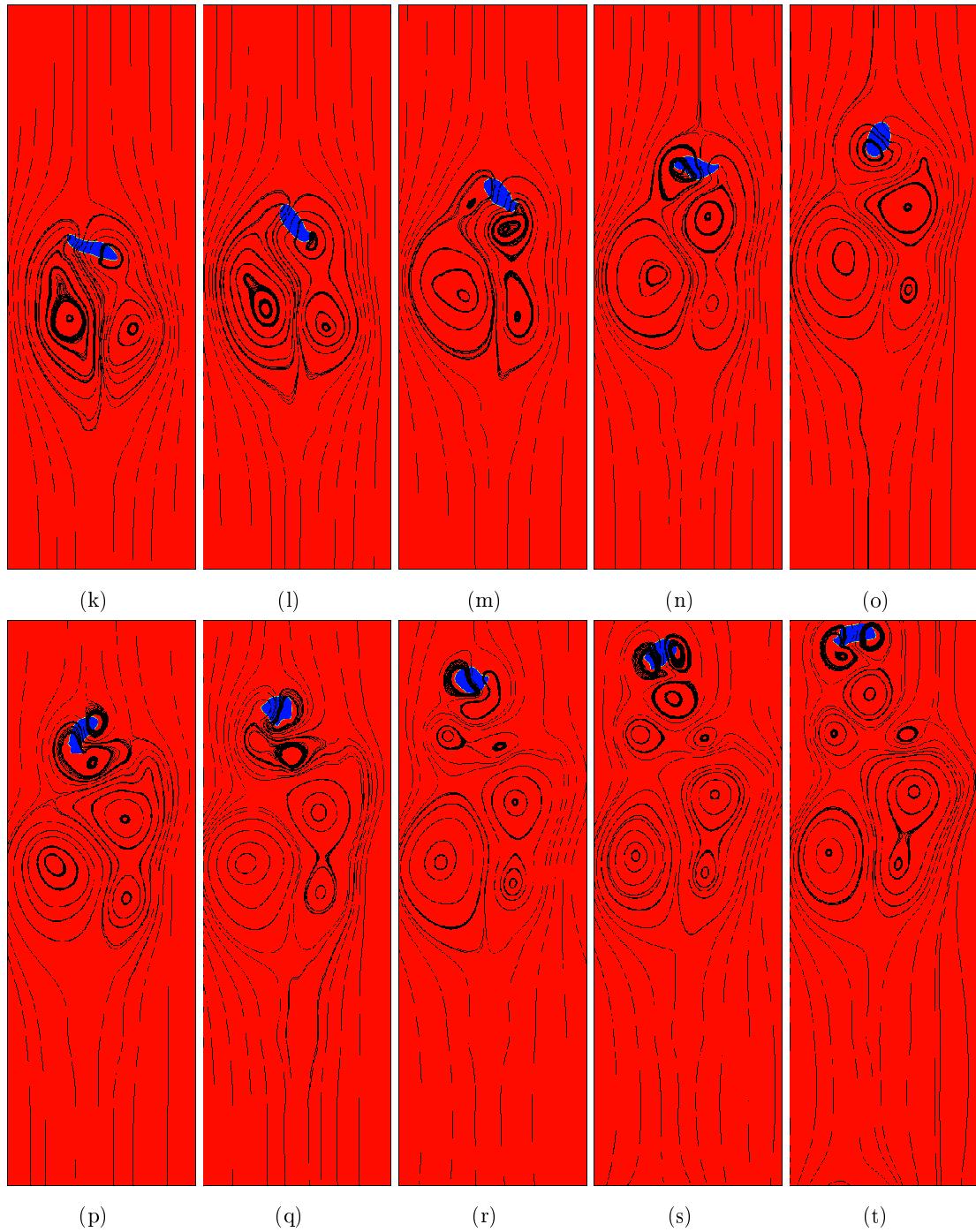


Figura 6.65: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de correntes em uma malha composta $64 \times 192L5$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$. (k) $t^* = 23, 0$; (l) $t^* = 25, 3$; (m) $t^* = 27, 6$; (n) $t^* = 29, 9$; (o) $t^* = 32, 2$; (p) $t^* = 34, 5$; (q) $t^* = 36, 8$; (r) $t^* = 39, 1$; (s) $t^* = 41, 4$ e (t) $t^* = 43, 7$.

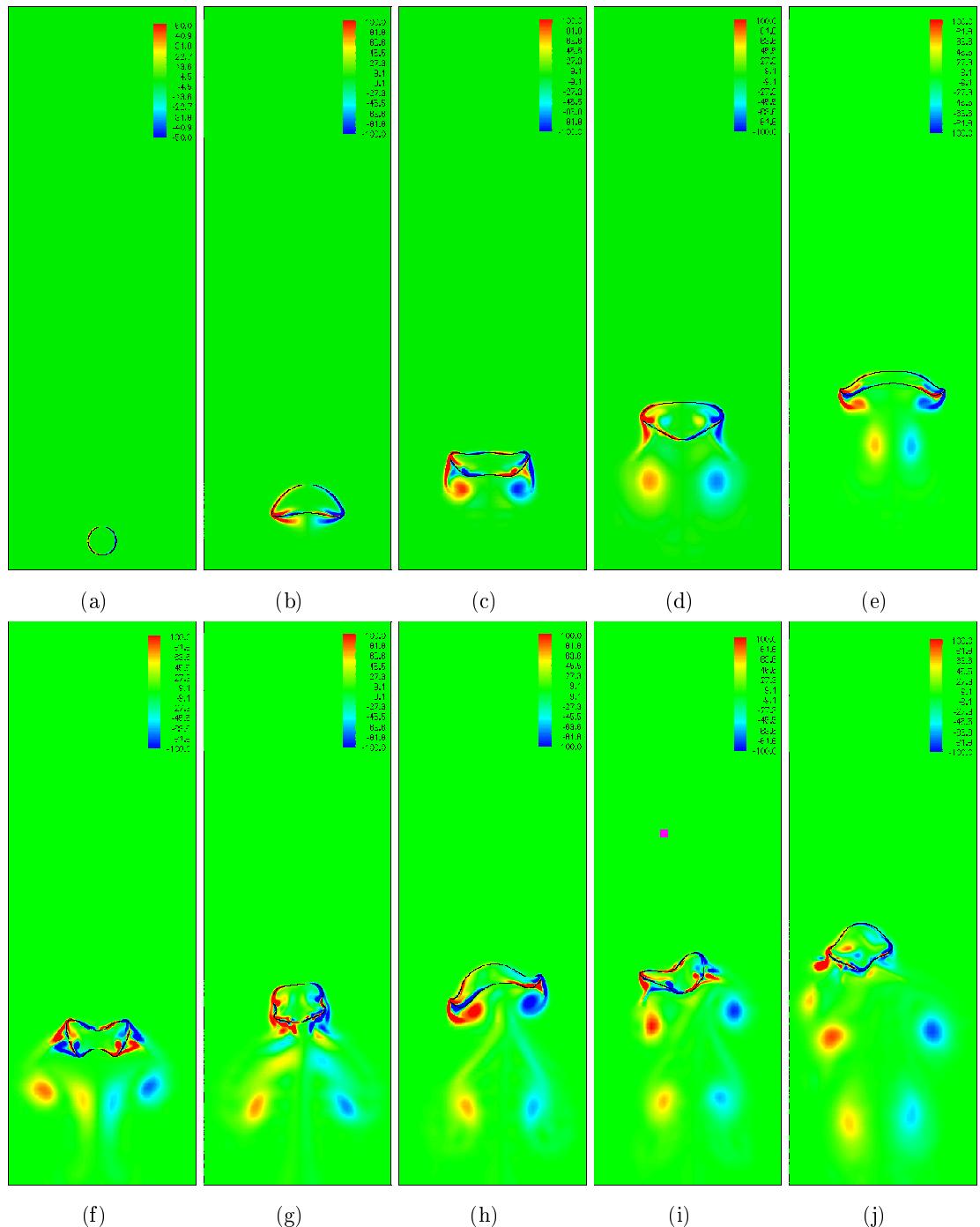


Figura 6.66: Evolução temporal do campo de vorticidade na malha composta $64 \times 192L5$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$. (a) $t^* = 0, 35$; (b) $t^* = 2, 3$; (c) $t^* = 4, 6$; (d) $t^* = 6, 9$; (e) $t^* = 9, 2$; (f) $t^* = 11, 5$; (g) $t^* = 13, 8$; (h) $t^* = 16, 1$; (i) $t^* = 18, 4$ e (j) $t^* = 20, 7$.

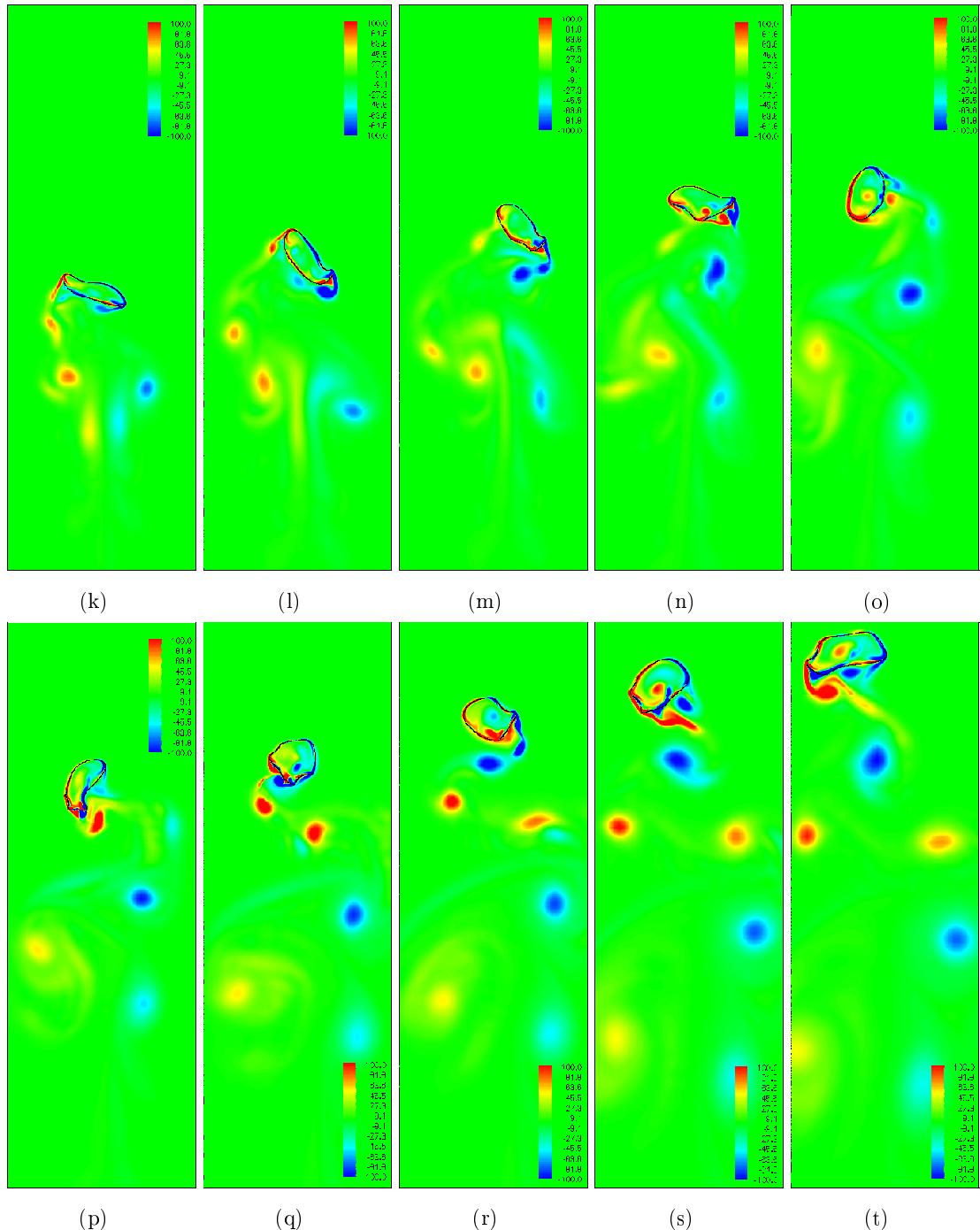


Figura 6.66: Evolução temporal do campo de vorticidade na malha composta $64 \times 192L5$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$. (k) $t^* = 23, 0$; (l) $t^* = 25, 3$; (m) $t^* = 27, 6$; (n) $t^* = 29, 9$; (o) $t^* = 32, 2$; (p) $t^* = 34, 5$; (q) $t^* = 36, 8$; (r) $t^* = 39, 1$; (s) $t^* = 41, 4$ e (t) $t^* = 43, 7$.

as regiões com alta vorticidade o campo de pressão é negativo e o contrário se verifica para regiões de baixa vorticidade. Devido à assimetria do campo de pressão é importante destacar que o domínio de discretização deve ser grande o suficiente ao ponto de garantir a periodicidade da pressão em todas as faces (A Fig. 6.67 não apresenta periodicidade no campo de pressão nas faces leste e oeste porque a imagem foi ampliada para uma melhor visualização).

A Figura 6.68, mostra a variação do número de Reynolds ao longo do tempo característico. As oscilações de aceleração e desaceleração ocorrem devido a variação da forma da interface, onde pode-se observar que para a fase de retração a bolha se acelera e na fase de dilatação sua aceleração tende a diminuir. A evolução do perímetro ao longo do tempo característico é traçado na Fig. 6.69, em conjunto traça-se também a variação da área para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$ na malha adaptativa com 5 níveis de refinamento. Detalhes desta variação ao longo do tempo característico são mostrados na Fig. 6.70, onde nota-se uma taxa de perda de área relativa de $6,4 \cdot 10^{-3}\%$.

A análise da variação da área da bolha durante o seu processo de ascensão é relevante para avaliação da transferência de massa através da superfície da bolha no caso em estudo. Teoricamente, a área da bolha deve ser conservada devido ao modelo adotado, o qual garante a incompressibilidade. No entanto, devido às elevadas variações na forma da bolha durante o seu movimento, observa-se uma perda ou ganho de área ao longo do tempo de simulação, sendo que esta deveria permanecer constante ao longo do cálculo. Conforme mostrado na Fig. 6.70, as menores variações ocorrem para quando a bolha entra rapidamente em regime sem alterar sua forma constantemente, ou seja, para os casos $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$ e para $Eo = 100$ e $M = 100$. A maior variação ocorre para quando a bolha atinge a forma *skirted* e posteriormente atinge o regime com a forma de calota-esférica ($Eo = 100$ e $M = 10^{-3}$). Smolianski *et al.* (2007) também observa elevadas variações para esta fase, onde seus valores praticamente dobram e após o rompimento da bolha voltam a dimensão original.

Uma visualização final para os casos simulados para bolhas isoladas são apresentados na Fig. 6.71. Como já citado o número de Reynolds alcançado para os casos simulados se diferem dos apresentados por Clift *et al.* (1978), devido às razões das propriedades físicas utilizadas estarem restritas às limitações do método multigrid-multinível aplicado para resolver a equação da correção de pressão.

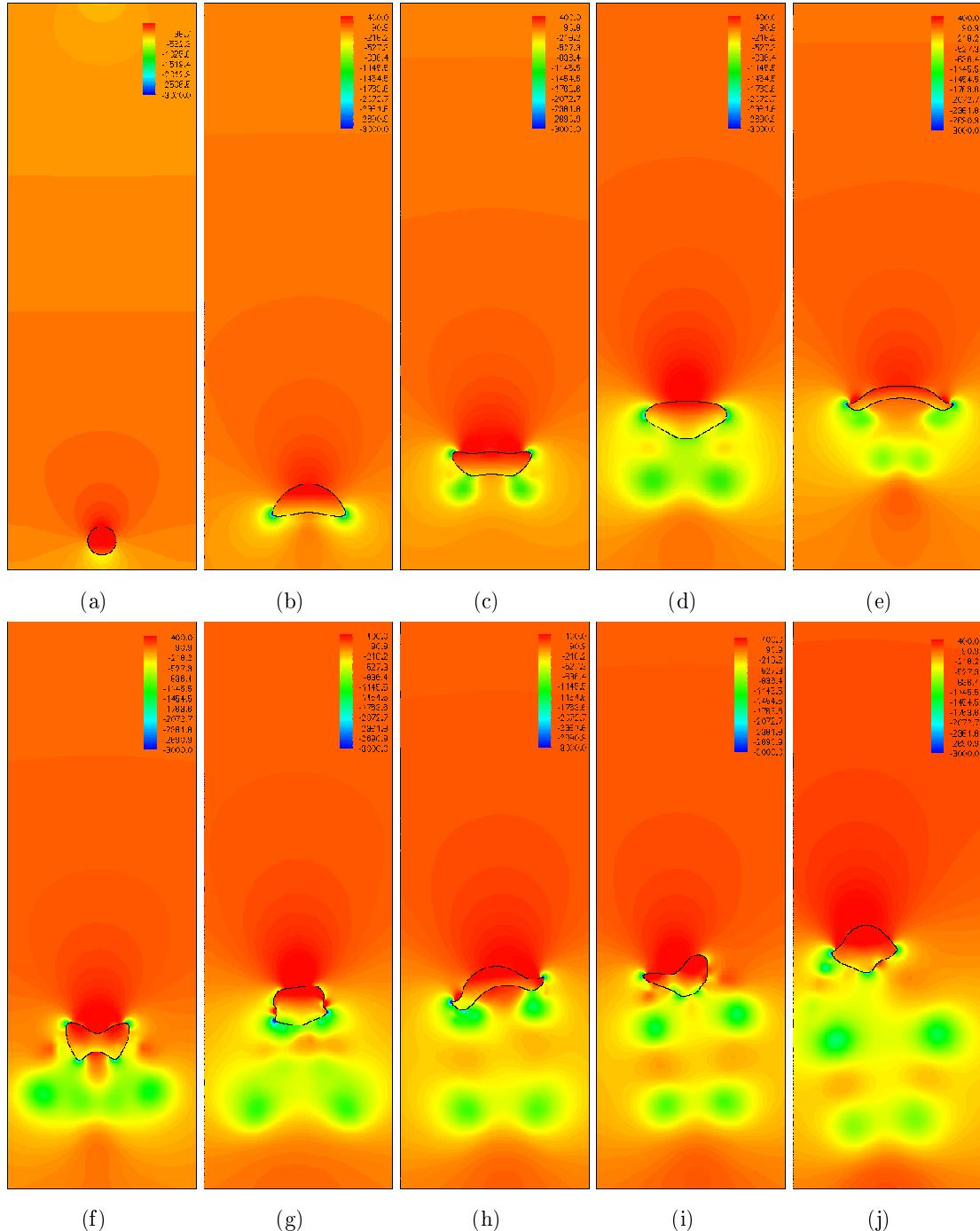


Figura 6.67: Evolução temporal do campo de pressão na malha composta $64 \times 192L5$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$. (a) $t^* = 0, 35$; (b) $t^* = 2, 8$; (c) $t^* = 5, 6$; (d) $t^* = 8, 4$; (e) $t^* = 11, 2$; (f) $t^* = 14, 0$; (g) $t^* = 16, 8$; (h) $t^* = 19, 6$; (i) $t^* = 22, 4$ e (j) $t^* = 25, 2$.

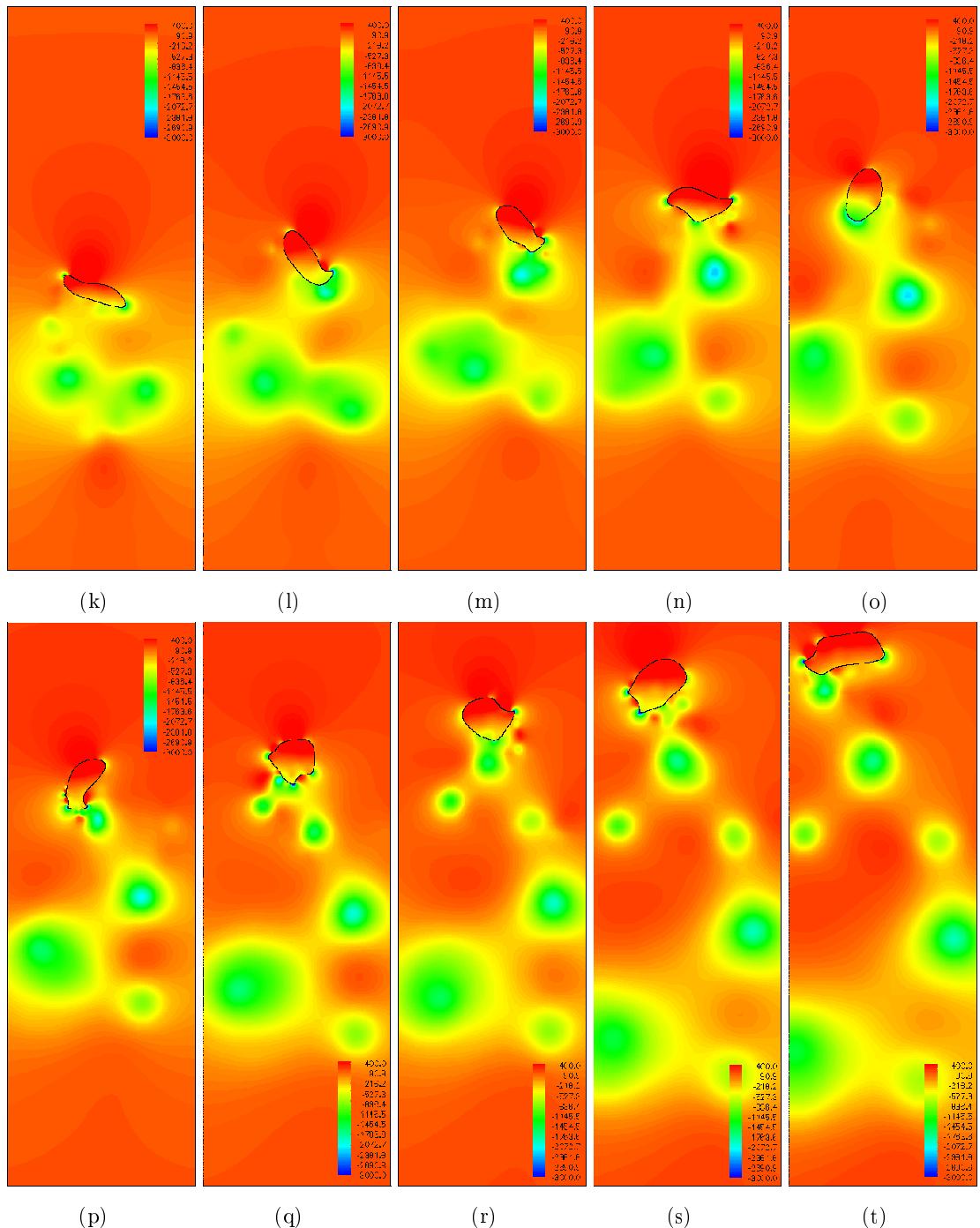


Figura 6.67: Evolução temporal do campo de pressão na malha composta $64 \times 192L5$ para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$. (k) $t^* = 23, 0$; (l) $t^* = 25, 3$; (m) $t^* = 27, 6$; (n) $t^* = 29, 9$; (o) $t^* = 32, 2$; (p) $t^* = 34, 5$; (q) $t^* = 36, 8$; (r) $t^* = 39, 1$; (s) $t^* = 41, 4$ e (t) $t^* = 43, 7$.

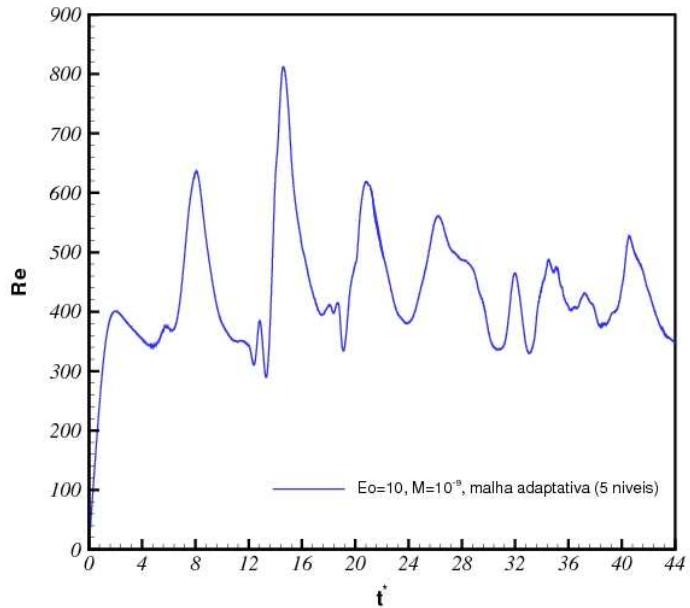


Figura 6.68: Evolução temporal do número de Re avaliado na malha composta $64 \times 192L5$, para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$.

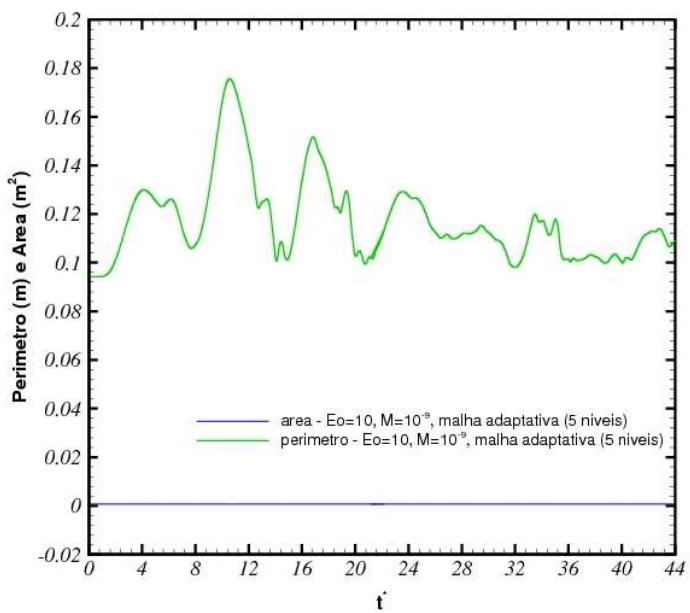


Figura 6.69: Evolução temporal da área e do perímetro na malha composta $64 \times 192L5$, para $Eo = 10$ e $M = 10^{-9}$.

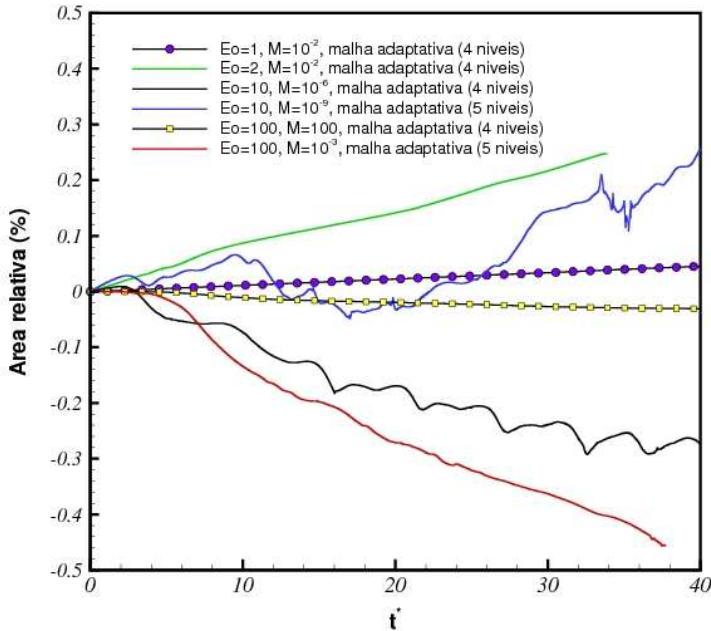


Figura 6.70: Evolução temporal da área realtiva para os diferentes casos de bolhas isoladas simuladas.

6.4.4 Ascensão de Múltiplas Bolhas

Enquanto que a dinâmica de uma bolha isolada é importante para o entendimento do processo de escoamentos internos e externos à bolha, informações variadas e significantes podem ser extraídas na análise de pequenos grupos de bolhas.

Esmaelli e Tryggvason (1996, 1998, 1999), Bunner e Tryggvason (2002) e Tryggvason *et al.* (2001) têm estudado estensivamente a ascensão de múltiplas bolhas a baixos, moderados e altos números de Reynolds contendo de 20 a 324 bolhas bolhas em domínios bidimensionais e tridimensionais. Observa-se que para estes casos o movimento é caótico e as bolhas tendem a interagir entre si, por intermédio de coalescência, de choques e de fragmentações. Smolianski (2007) simula o processo de regime de golfadas a partir da introdução de 9 bolhas em um canal. Esta situação é devido ao fato que as bolhas entram nas esteiras das outras formando uma única bolha.

Nesta seção são, apresentados os resultados para 3 bolhas ascendentes a baixo número de Reynolds. Esta aplicação procura mostrar a pontencialidade do código ao trabalhar com várias interfaces e visualizar a interação dos campos de pressão e velocidade de cada

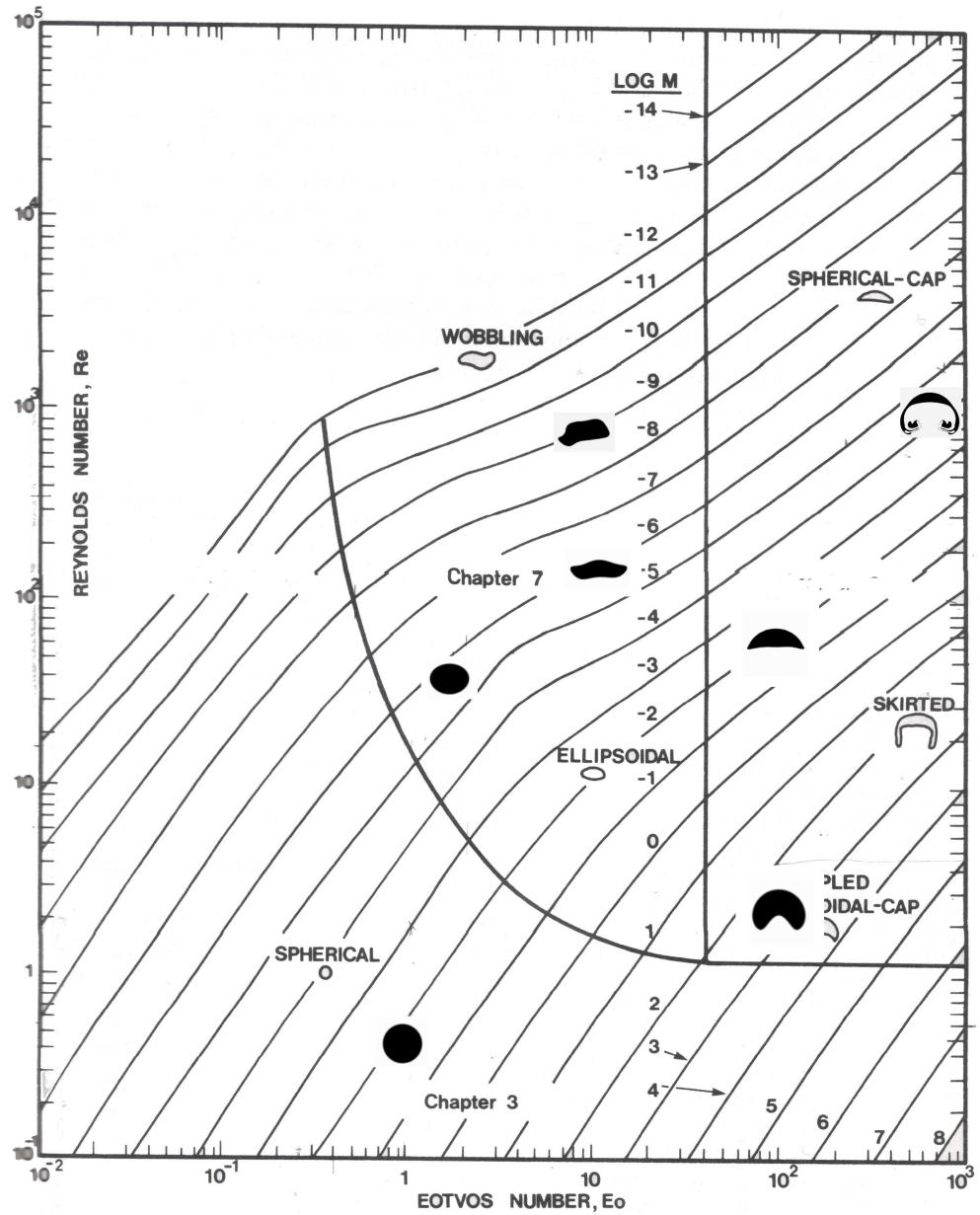


Figura 6.71: Diagrama geométrico de bolhas (diagrama experimental reproduzido de Clift *et al.*, (1978)).

bolha no processo como um todo. Outra aplicação com duas bolhas em processo inicial de coalisão também foi simulada. É importante lembrar que o código ainda não está apto a simular completamente os processos de coalisão e fragmentação neste instante.

Os resultados com o campo de massa específica para três bolhas ascendentes são mostrados na Fig. 6.23. O diâmetro das três bolhas são iguais e têm valor de $0,03m$, a fração volumétrica é igual $0,012$ e $Eo=1$. Os resultados para este caso são avaliados na malha adaptativa refinada localmente com 5 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 64 \times 128$ e $\Omega = [0; 3] \times [0; 6]$. Assim, o espaçamento da malha é da $\mathcal{O}(10^{-4})$ e o passo de tempo é da $\mathcal{O}(10^{-5})$.

Na fase inicial, observa-se a formação de uma campo de pressão assimétrico na parte superior das bolhas laterais (Fig. 6.74), com intensidade maior que o campo de pressão na parte superior da bolha central. Como o campo de pressão é maior nas extremidades, a velocidade da bolha central é maior, o que faz com que ela se desloque mais rapidamente que as bolhas laterais. Devido à ação da esteira da bolha central, as bolhas laterais tendem a se afastar e posteriormente se atraem, até que a influência da esteira da bolha central diminua devido a sua maior aceleração. Esse deslocamento das interfaces são mostrados na Fig. 6.72. Nesta figura, são mostradas a posição do centróide na direção horizontal (Xc) pela posição do centróide na direção vertical (Yc). Legendre e Magnaudet (1998) relatam que duas bolhas lado a lado se atraem quando estão distantes uma das outras, mas se repelem quando estão próximas até uma distância de equilíbrio onde duas bolhas lado a lado ascendem de forma constante. Análises feitas por Harper (1997), mostram que duas bolhas esféricas em linha se atraem devido a esteira gerada e se repelem devido a um gradiente de pressão adverso. Quando esses dois efeitos tendem a balancear uns aos outros, então a bolha encontra uma distância de equilíbrio.

O campo de vorticidade desenvolvido entre as três bolhas é apresentado na Fig. 6.75. A influência da vorticidade gerada na bolha central e de sua esteira são facilmente observados. Nota-se que na fase inicial, as faces externas das bolhas laterais apresentam uma vorticidade com maior intensidade que as faces internas. A medida que a bolha central se acelera, as bolhas laterais sofrem então influência do campo de vorticidade da bolha central e o processo de atração se inicia até atingirem o equilíbrio. A evolução do número de Reynolds ao longo do tempo característico é mostrado na Fig. 6.76. Nota-se claramente que a aceleração da bolha central é maior que as demais. A evolução do perímetro e a

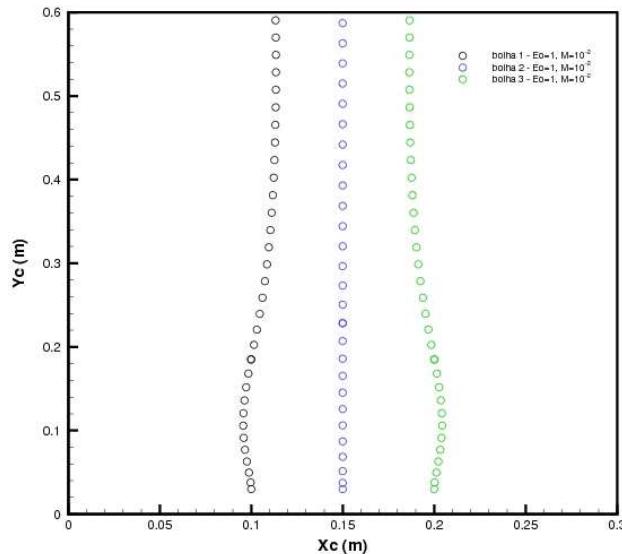


Figura 6.72: Evolução das posição do centróide de múltiplas avaliada na malha composta $64 \times 128L5$, para $Eo = 1$ e $\alpha = 0,012$.

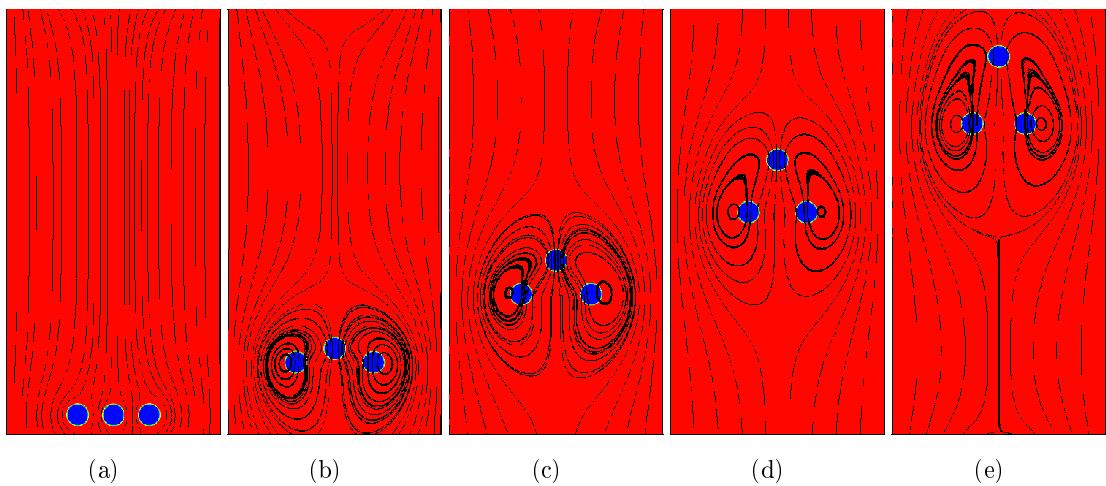


Figura 6.73: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de corrente em uma malha composta $64 \times 128L5$, para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$. (a) $t^* = 1,06$; (b) $t^* = 21,2$; (c) $t^* = 42,4$; (d) $t^* = 63,6$ e (e) $t^* = 100,0$

variação da área ao longo do tempo são apresentados na Fig. 6.77, os quais se mostram constantes ao longo do tempo característico devido ao baixo número de Reynolds.

Em estudo experimentais de interações binárias em bolhas deformáveis, Stewart (1995) e Brücker (1999), observaram que as colisões entre as bolhas somente ocorrem após uma

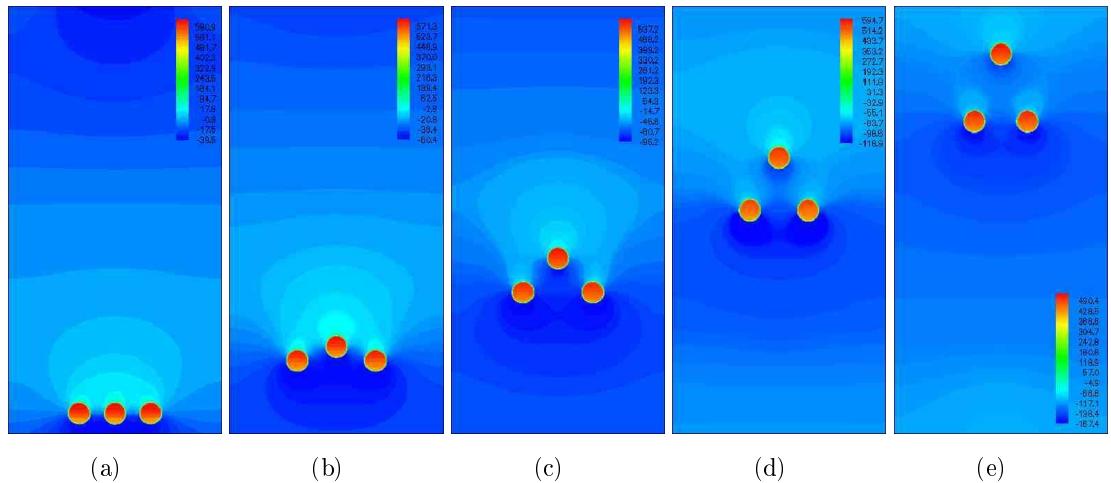


Figura 6.74: Evolução temporal do campo de pressão em uma malha composta $64 \times 128L5$, para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$. (a) $t^* = 1,06$; (b) $t^* = 21,2$; (c) $t^* = 42,4$; (d) $t^* = 63,6$ e (e) $t^* = 100,0$

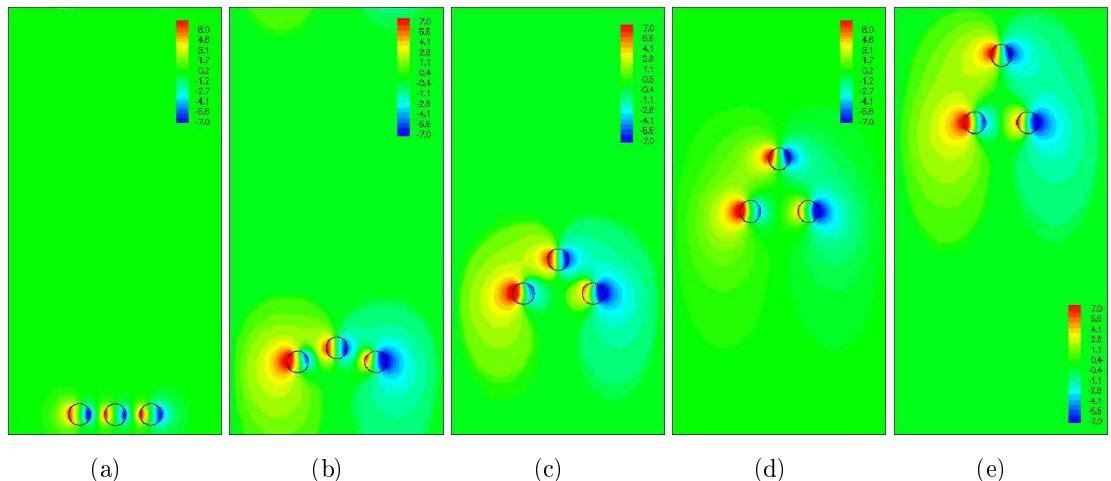


Figura 6.75: Evolução temporal do campo de vorticidade em uma malha composta $64 \times 128L5$ para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$. (a) $t^* = 1,06$; (b) $t^* = 21,2$; (c) $t^* = 42,4$; (d) $t^* = 63,6$ e (e) $t^* = 100,0$

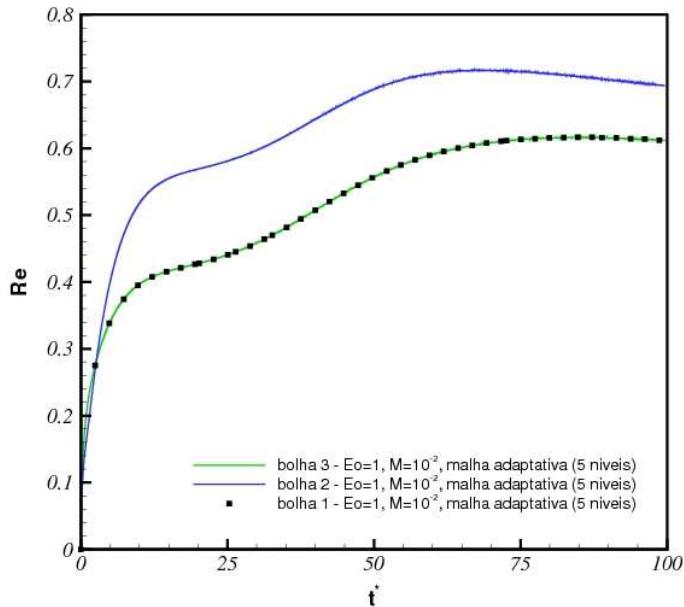


Figura 6.76: Evolução temporal do número de Re avaliado na malha composta $64 \times 128L5$, para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$ e múltiplas bolhas.

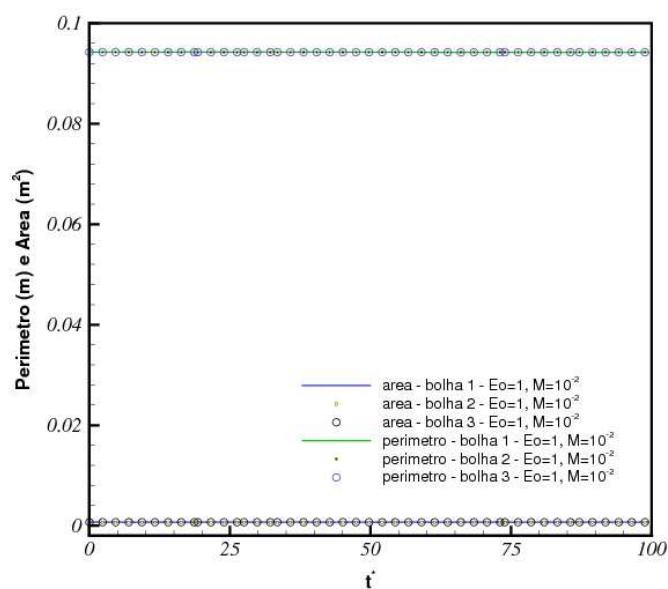


Figura 6.77: Avaliação da conservação das áreas para múltiplas bolhas e evolução do perímetro ao longo do tempo para $Eo = 1$ e $M = 10^{-2}$ na malha composta $64 \times 128L5$.

bolha ter sido capturada pela esteira de outra bolha. Interessantemente, Stewart observa que as bolhas nunca coalescem durante a coalisão inicial. Quando duas bolhas se tocam, as suas velocidades começam a decair e a deformação da última bolha aumenta em cerca de 50%, ou seja, quando a energia cinética do fluido é transformada em energia superficial na interface da bolha (BUNNER e TRYGGVASON, 2003). A deformação da bolha que foi arrastada também aumenta, mas instantes depois e com uma extensão menor que a última bolha.

Os resultados, permitindo visualizar a coalisão entre duas bolhas com $d_d = 0,025m$ e $d_d = 0,015m$, com os respectivos números de Eötvös iguais a 10 e 3,60, são apresentados nas Figs. 6.79 a 6.81. A simulação é realizada adotando $\Omega = [0;3] \times [0;3]$ e fração volumétrica $\alpha = 0,03$, em uma malha com 6 níveis de refinamento, onde $l_{base} = 64 \times 64$. A evolução da remalhagem, acompanhando a deformação da interface é visualizada na Fig. 6.78, onde os perfis das malhas são mostrados juntamente com a função indicadora. O passo de tempo é de $\mathcal{O}(10^{-5})$ com $\Delta x = \Delta y = 0,3/2.048$ no nível mais fino. O tempo característico t^* é calculado em função do diâmetro da maior bolha. A simulação ocorre até o ponto em que as interfaces estão distantes quatro células uma das outras, ou seja, até o ponto em que a função indicadora ainda contém 4 células de distância da outra interface.

A evolução temporal do campo de massa específica sobreposto pelas linhas de corrente são apresentados na Fig. 6.79, onde observa-se a influência da esteira da última bolha na bolha menor, arrastando-a e levando-a à coalisão. A Fig. 6.80, ilustra o campo de vorticidade, apresentando os vórtices internos e externos à bolha. A presença de alta vorticidade indica baixos campos de pressão, os quais são observado na Fig. 6.81. A variação do número de Reynolds ao longo do tempo é apresentado na Fig. 6.82, onde conforme relatado por Bunner e Tryggvason, observa-se que quando as duas bolhas se tocam as suas velocidades tendem a diminuir.

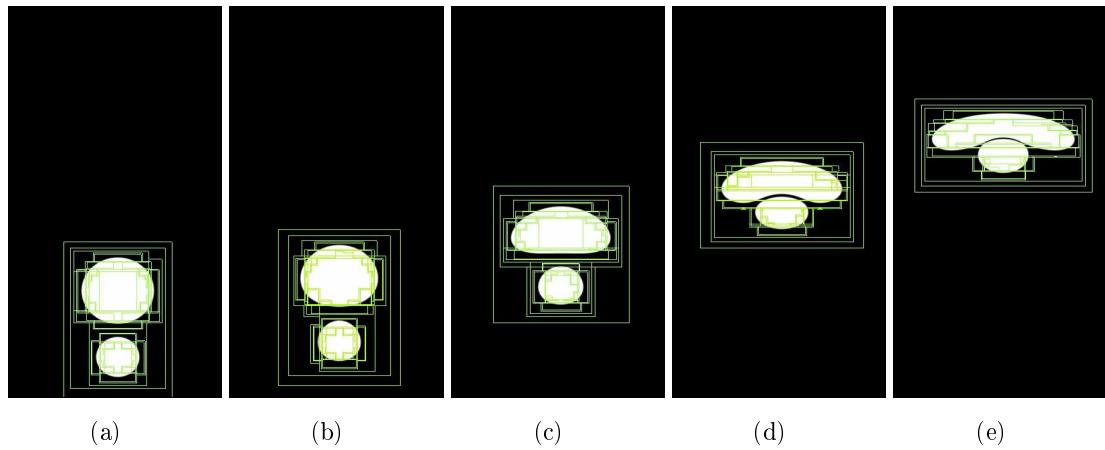


Figura 6.78: Evolução da remalhagem ao longo do tempo, utilizando malha adaptativa $64 \times 64L6$. (a) $t^* = 0, 21$; (b) $t^* = 1, 23$; (c) $t^* = 2, 87$; (d) $t^* = 4, 51$ e (e) $t^* = 6, 0$.

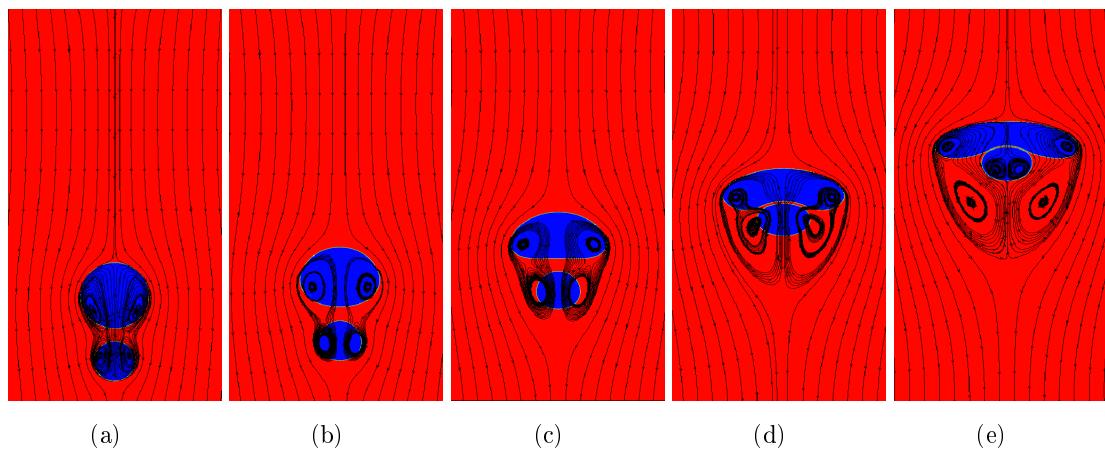


Figura 6.79: Evolução temporal do campo de massa específica sobreposto por linhas de corrente na malha composta $64 \times 64L6$. (a) $t^* = 0, 21$; (b) $t^* = 1, 23$; (c) $t^* = 2, 87$; (d) $t^* = 4, 51$ e (e) $t^* = 6, 0$.

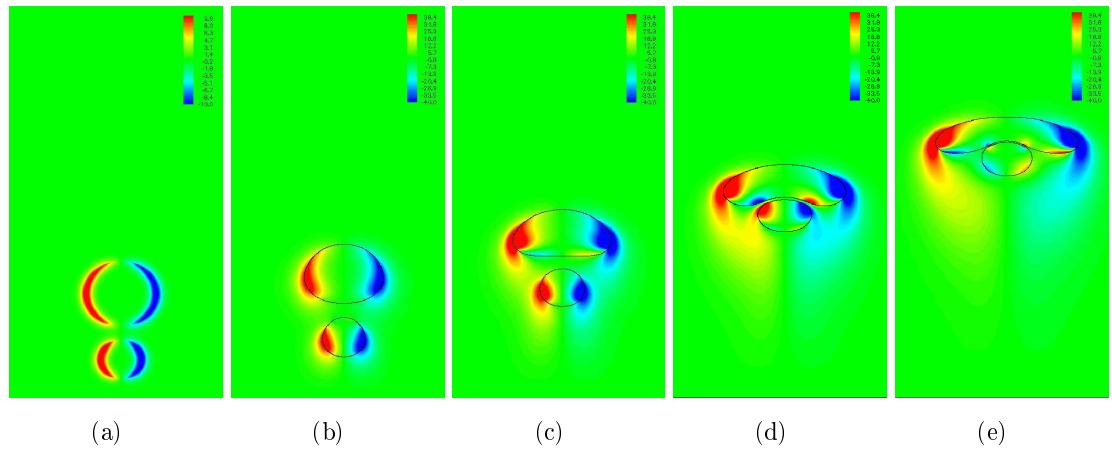


Figura 6.80: Evolução temporal do campo de vorticidade na malha composta $64 \times 64L6$.
(a) $t^* = 0,21$; (b) $t^* = 1,23$; (c) $t^* = 2,87$; (d) $t^* = 4,51$ e (e) $t^* = 6,0$.

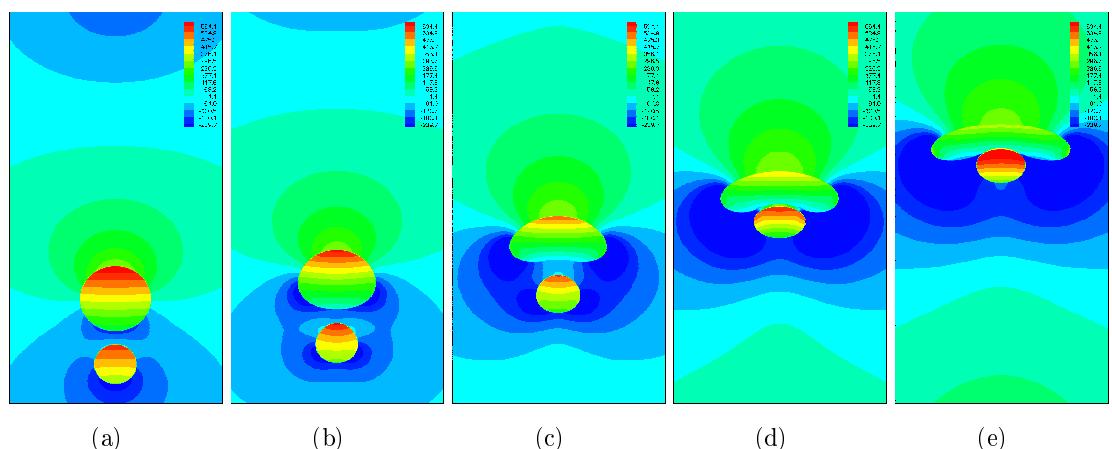


Figura 6.81: Evolução temporal do campo de pressão na malha composta $64 \times 64L6$. (a)
 $t^* = 0,21$; (b) $t^* = 1,23$; (c) $t^* = 2,87$; (d) $t^* = 4,51$ e (e) $t^* = 6,0$.

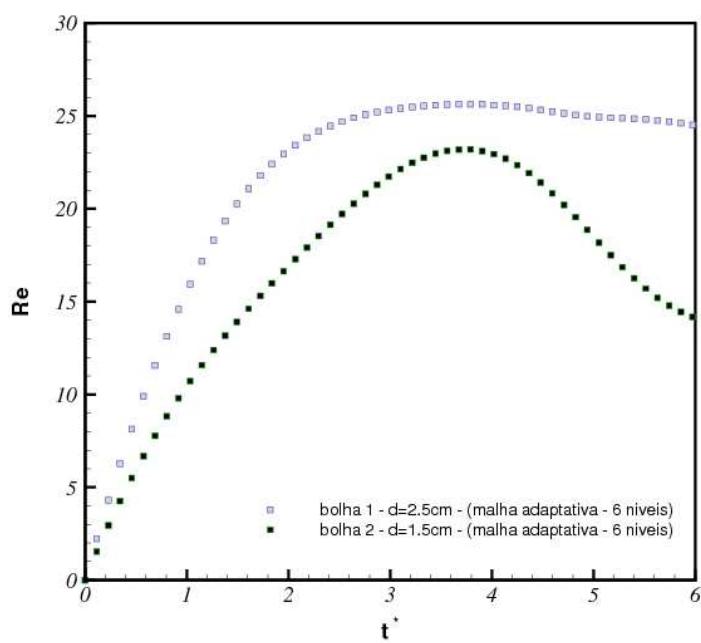


Figura 6.82: Evolução temporal do número de Reynolds avaliado na malha composta $64 \times 64L6$.

Capítulo 7

Conclusão e Perspectivas Futuras

No presente trabalho, foi apresentada uma estratégia computacional para a simulação bidimensional completamente adaptativa de escoamentos monofásicos e escoamentos bifásicos. A metodologia numérica empregada combinou malhas refinadas localmente com uma discretização temporal semi-implícita de segunda ordem e técnicas multigrid-multinível lineares para a solução de sistemas lineares. A discretização proposta é isenta de restrições severas de estabilidade e é menos onerosa do que os esquemas iterativos não lineares usados em discretizações completamente implícitas.

O principal objetivo que motivou a realização do presente trabalho foi contribuir com o desenvolvimento de uma nova metodologia de modelagem matemática de escoamentos bifásicos. Este tipo de escoamento exige um extenso domínio de discretização comparados com a dimensão da região de interesse (bolha/gota) e passos no tempo restritivos, quando metodologias de modelagem da turbulência são aplicadas. Para contornar estes desafios refinamentos localizados aplicados na região de interesse do escoamento e discretizações temporais que permitam trabalhar com largos passos no tempo são aplicados.

Os resultados apresentados no presente trabalho envolvem a análise de convergência do método, primeiramente na equação elíptica e posteriormente nas equações de Navier-Stokes, as quais apresentam segunda ordem de convergência para a velocidade e no mínimo primeira ordem de convergência para a pressão. Uma cavidade com tampa deslizante para diferentes números de Reynolds foi também simulada. O modelo sub-malha de Smagorinsky foi aplicado mostrando a potencialidade do código ao se trabalhar com

altos números de Reynolds, assegurando para todos os casos um restrição temporal da ordem de $\mathcal{O}(\Delta x)$.

Escoamentos com a presença de geometrias móveis e deformáveis foram simulados utilizando-se o Método Híbrido *Front-Tracking/Front-Capturing*, os quais envolveram a aplicação da função indicadora e formulações explícitas para a implantação da interface e técnicas de regularização da malha lagrangiana. Foram aplicados diversos níveis de refinamento, utilizando malha adaptativa bloco-estruturada refinadas localmente. Para estes casos, foram obtidos resultados como campos de velocidade, vorticidade e pressão, os quais permitiram identificar o comportamento do escoamento interno e externo às interfaces bifásicas, bem como visualizar a interação e o emparelhamento dos vórtices para altos números de Reynolds. Estes resultados foram obtidos na simulação de monobolhas submetidas à diversos regimes e comparados com o digrama de forma de Clift *et al.* (1978) e com a equação analítica de Young-Laplace. Estudos preliminares de múltiplas bolhas também foram apresentados, mostrando de interação entre si.

A principal conclusão do presente trabalho é que a metodologia apresentada é eficiente para a simulação numérica detalhada de escoamentos diversos, os quais podem ou não envolverem a presença de interfaces móveis e/ou deformáveis. A turbulência foi modelada mantendo-se, no entanto, uma restrição temporal mais flexível que o que se dispõem na literatura, sobretudo quando se leva em conta a modelagem da turbulência. Esta é uma contribuição original do presente trabalho.

Contudo, os autores entendem que essa estratégia numérica pode ser aperfeiçoada em vários aspectos. Nas técnicas multigrid-multinível, pode-se utilizar o Gradiente Conjugado Precondicionado visando melhorar o desempenho da metodologia ou ainda substituir o relaxador atual por uma relaxação por linha, o que implicaria na solução tridiagonal. Estas alterações permitiriam trabalhar com elevadas razões de massa específica além de melhorar o desempenho do código computacional perante a anisotropia introduzida por $\Delta x \neq \Delta y$. Também pode-se substituir a média simples por uma média ponderada (BRIGGS, 1987), a interpolação bilinear por uma interpolação bicúbica e o ciclo V e o ciclo W pelo *Full Multigrid*.

Dando continuidade a este trabalho, pretende-se estender esta metodologia para o domínio tridimensional, bem como implementar as formulações de coalescência e fragmentação em escoamentos bifásicos. Outros modelos de turbulência que permitam captar

com maior precisão os detalhes do escoamento tanto interno quanto externo à interface podem ser também implementado. O efeito de surfactantes também será analisado. O presente trabalho será objeto de continuidade para o desenvolvimento de uma ferramenta computacional para aplicação industrial. Em particular, esta ferramenta deve ser tridimensional com modelagem de fragmentação e coalescência de interfaces, assim como de efeitos tenso-ativos. As aplicações serão voltadas para a indústria de refino de petróleo brasileira.

Capítulo 8

Bibliografia

ALMGREN, A. S., BELL, J. B., COLELLA, P. e HOWELL, L. H. An Adaptive Projection Method for the Incompressible Euler Equations. *11th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, FL, Julho 6-9., 1993

ALMGREN, A. S., BELL, J. B. e SZYMCZAK, W. G., A Numerical Method for the Incompressible Navier-Stokes Equations Based on Approximate Projection. *SIAM J. Sci. Computational*, vol. 17, No. 2, 1996.

ALMGREN, A. S., BELL, J. B., COLELLA, P., HOWELL, L. H. e WELCOME, M. L. A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, vol. 142, p. 1-46, 1998.

ANNALAN, M. DENN, N. G. e KUIPERS J. A. M. Numerical Simulation of Gas Bubbles Behaviour Using a Three-Dimensional Volume of Fluid Method. *Chemical Engineering Science*, vol. 60, iss. 11, p. 2999-3011, 2005.

ASCHER, U. M., RUUTH, S. J. e WETTON, B. Implicit-Explicit Methods for Time-Dependent Pde's. *SIAM (Soc. Ind. Appl. Math.) J. Numer. Anal.*, vol. 32, p. 797, 1995.

AULISA, E., MANSERVISI, S., SCARDOVELLI, R. e ZALESKI, S. A Geometrical Area-Preserving Volume-of-Fluid Advection Method. *Journal of Computational Physics*, vol. 192, p. 355-364, 2003.

BADALASSI, V. E., CENICEROS, H. D. e BANERJEE, S. Computation of Multiphase Systems with Phase Filed Models. *Journal of Computational Physics*, vol. 190, p. 371-397, 2003.

BALARAS, E. Modeling Complex Boundaries Using an External Force Field on Fixed Cartesian Grids in Large-Eddy Simulations. *Computers & Fluids*, vol. 33, p. 375-404, 2004.

BAKHALOV N. S., On the Convergence of a Relaxation Method with Natural Constraints on the Elliptic Operator. *USSR Com. Math. Math. Phys*, vol. 6, p. 101-135, 1996.

BELL, J. B., BERGER, M. J., SALTZMAN J. S. e WELCOME M., Three-Dimensional Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Conservation Laws. *Technical Report UCRL-JC108794*, LLNL, 1991.

BELL, J. B., COLELLA, P., e GLAZ, H. M. A Second-Order Projection Method for Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, vol. 85, p. 257, 1989.

BENEK, J. A., BUNING, P. G. e STEGER, J. L. A 3-D Chimera Grid Embedding Technique, *AIAA*, 85-1523, 1985.

BERGER, M. J. e OLIGER, J. Adaptive Mesh Refinement for Hyperbolic Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics*, vol. 53, p. 484, 1984.

BERGER, M. J. e JAMESON, A. Automatic Adaptive Grid Refinement for the Euler Equations. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, vol. 23, no. 4, p. 561-568, 1985.

BERGER, M. J. Data Structures for Adaptive Grid Generation. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 7, no. 3, p. 904-916, 1986.

BERGER, M. J. On Conservation at Grid Interfaces. *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 24, no. 5, p. 967-984, 1987.

BERGER, M. J. Local Adaptive Mesh Refinement for Shock Hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, vol. 82, p. 64-84, 1989.

BERGER, M. J. e RIGOUDTSOS, I. An Algorithm for Hyperbolic Partial Differential

Equations. *IEE Trans. Systems Man and Cybernet*, vol. 21 p. 1278-1286, 1991.

BERGER, M. J. e LE VEQUE, R. J. Adaptive Mesh Refinement Using Wave Propagation Algorithms for Hyperbolic Systems. *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 35, no. 6, p. 2298-2316, 1998.

BISWAS, S., ESMAEELI, A. e TRYGGVASON, G. Comparisons of Results from DNS of Bubbly Flows with a Two-Fluid Model for Two-Dimensional Laminar Flows. *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 31, p. 1036-1048, 2005.

BRANDT, A. Multi-Level Adaptive Solutions to Boundary-Value Problems. *Math. Comp.* vol. 31, no. 38, p. 333-390, 1977.

BRIGGS, W. L. A Multigrid Tutorial. *SIAM - Society for Industrial and Applied Mathematics*, 3^a Edição, 1987.

BROWN, D. L., CORTEZ, R. e MINION, M. Accurate Projection Methods for the Incompressible Navier-Stokes Equations. *Journal of Computational Physics*, vol. 168, p. 464-499, 2001.

BRÜCKER, C. Structure and Dynamics of the Wake of the Bubbles and its Relevance for Bubble Interaction. *Physics of Fluids*, vol. 11, p. 1781-1796, 1999.

BUNNER, B. e TRYGGVASON, G. Dynamics of Homogeneous Bubble Flows. Part 1. Rise Velocity and Microstructure of the Bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 466, p. 17-52, 2002.

BUNNER, B. e TRYGGVASON, G. Dynamics of Homogeneous Bubble Flows. Part 2. Rise Velocity Fluctuations. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 466, p. 53-84, 2002.

BUNNER, B. e TRYGGVASON G. Effect of Bubble Deformation on the Properties of Bubbly Flows. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 495, p. 77-118, 2003.

CENICEROS, H. D. e ROMA, A. M. Study of the Long-Time Dynamics of a Viscous Vortex Sheet with a Fully Adaptive Nonstiff Method. *Physics of Fluids* vol. 16, no. 12, 2004.

CENICEROS, H. D. e ROMA, A. M. A Multi-Phase Flow Method with a Fast, Geometry-Based Fluid Indicator. *Journal of Computational Physics*, vol. 205, p. 391-400, 2005.

CHORIN, A. Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations. *Math. Comp.*, vol. 22, p. 745-762, 1968.

CHORIN, A.J.e MARSDEN, J.E. A mathematical introduction to uid mechanics. *3rd ed. New York: Springer-Verlag*, 1993.

CLIFT, R., GRACE, J. R. e WEBER, M. E. Bubbles, Drops and Particles. *Academic Press, Inc. (London) Ltd.*, 1978.

COLLIER, J. G. e THOME, J. R. Convective Boiling and Condensation. *Oxford Science Publications*, Walton St., Oxford OX2 6DP, 1995.

COUDER, Y., CHOMAZ, J. M., e RABAUD, M. *On the Hydrodynamics of Soap Films. Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 37, p. 384-405, 1989.

DATTA, R. L., NAPIER, D. H., e NEWITT, D. M. The Properties and Behavior of Gas Bubbles Formed at a Circular Orifice. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, vol. 28, p. 14-26, como citado por Clift et al. (1978), 1950.

DAVIDSON, J. F., e SCHULER, B. O. Bubble Formation at an Orifice in a Viscous Liquid. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, vol. 38, p. 144-154, 1960a.

DAVIDSON, J.F., e SCHULER, B.O. Bubble Formation at an Orifice in an Inviscid Liquid. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, vol. 38, p. 335-342, 1960b.

DI MARCO, P., GRASSI, W., MEMOLI G., TAKAMASA, T., TOMIYAMA, A. e HO-SOKAWA, S. Influence of Electric Field on Single Gas-Bubble Growth and Detachment in Microgravity. *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 29, p. 559-578, 2003.

DOUGLAS, C. C. Multigrid Methods in Science and Engineering. *IEEE Computational Science & Engineering*, vol. 3, no. 4, p. 55-68, 1996.

DOUGLAS, C., HU, J., RAY,J. THORNE, D. e TUMINARO, R. Cache Aware Multigrid for Variable Coefficient Elliptic Problems on Adaptive Mesh Refinement Hierarchies. *Numer. Linear Algebra Appl.*, vol. 11, p. 173-187, 2004.

DUDEK, S. A Structured-Grid Adaptive Mesh Refinement Multigrid Algorithm for Steady-State Flows. *PhD Thesis*, U.C., Berkeley, 1996.

- DURBIN, P. A e IACCARINO, G. An Approach to Local Refinement of Structured Grids, *Journal of Computational Physics*, vol. 181, p. 639-653, 2002.
- ELLINGSEN, K., e RISSO, F. On the Rise of an Ellipsoidal Bubble in Water: Oscilatory Paths and Liquid-Induced Velocity. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 440, p. 235-268, 2001.
- ENRIGHT, D., LOSASSO, F. e FEDKIW, R. A Fast and Accurate Semi-Lagrangian Particle Level Set Method. *Computers and Structures*, vol. 83, p. 479-490, 2005.
- ESMAEELI, A., ERVIN, E. e TRYGGVASON, G. Numerical Simulations of Rising Bubbles. *Blake, J.R., Boulton-Stone, J.M., Thomas, N.H. (Eds.), Bubble Dynamics and Interface Phenomena*. Kluwer, Dordrecht, p. 247-255, 1994.
- ESMAEELI, A. e TRYGGVASON, G. An Inverse Energy Cascade in Two-Dimensional, Low Reynolds Number Bubbly Flows. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 242, p. 655-700, 1996.
- ESMAEELI, A. e TRYGGVASON, G. Direct Numerical Simulations of Bubbly Flows Part 1. Low Reynolds Number Arrarys. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 377, p. 313-345, 1998.
- ESMAEELI, A. e TRYGGVASON, G. Direct Numerical Simulations of Bubbly Flows Part 2. Moderate Reynolds Number Arrarys. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 385, p. 325-358, 1999.
- FADLUN, E. A. VERZICCO, R., ORLANDI, P. e MOHD-YUSOF, J. Combined Immersed-Boundary Finite-Difference Methods for Three-Dimensional Complex Flow Simulation. *Journal of Computational Physics*, vol. 161, p. 35-60, 2000.
- FAVRE, A. Equations des Gaz Turbulents Compressibles. *Journal de Mecanique*, vol. 4, no. 3, p. 361-390, 1965.
- FORTUNA, A. O. Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações. *Editora da Universidade de São Paulo*, SP, Brasil, 2000.
- FRACOIS, M., UZGOREN, E., JACKSON, J. e SHYY, W. Multigrid Computations with the Immersed Boundary Technique for Multiphase flows. *International Journal of*

- Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, vol. 14, no. 1, p. 98-115, 2003.
- GEAR, C.W. The numerical integration of ordinary differential equations. *Math. Comp.*, vol. 21, no. 2, p. 146-156, 1967.
- GEAR, C.W. The automatic integration of stiff ordinary differential equations. *Information Processing*, vol. 68, p. 187-193, 1969.
- GEAR, C.W. The automatic integration of ordinary differential equations. *Communications of the ACM*, vol. 14, no. 3, p. 176-179, 1971.
- GERMANO, M., A Proposal for a Redefinition of the Turbulent Stresses in Filtered Navier-Stokes Equations. *Physics of Fluids*, vol. 27, no. 7, p. 2323-2324, 1986.
- GHIA, U., GHIA, K. N. e SHIN, C. T. High-Reynolds Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method. *Journal of Computational Physics*, vol. 48, p. 387-411, 1982.
- GOZ, M. F., BUNNER, B., SOMMERFELD, M., e TRYGGVASON, G. The Unsteady Dynamics of Two-Dimensional Bubbles in a Regular Array. *ASME FEDSM00*, no. 11151, 2000.
- GRIGORIADIS, D. G. E., BARTZIS, J. G. e GOULAS, A. An Efficient Treatment of Complex Geometries for Large Eddy Simulations of Turbulent Flow. *Computer & Fluids*, vol. 33, p. 201-222, 2004.
- GUPTA, M. M., KOUATCHOU, J. e ZHANG J. Comparison of 2nd. and 4th. Order Discretizations for Multigrid Poisson Solvers. Department of Mathematics, The George Washington University, Washington, USA, 1995.
- HACKBUSH, W. Multi-Grid Methods and Applications. *Springer-Verlag*, Berlin, 1985.
- HAN, J. e TRYGGVASON G. Secondary Breakup of Axisymmetric Liquid Drops I. Acceleration by a Constant Body Force. *Physics of Fluids*, vol. 11, no. 12, p. 3650, 1999.
- HAN, X., XU, C. e PRINCE, J. L. A 2D Moving Grid Geometric Deformable Model. *IEEE Computer Society Conference on Computer Vision Pattern Recognition*, 2003.
- HARLOW, F. H. e WELCH, J. E. Numerical Calculation of Time-Dependent of Viscous

Incompressible Flow of Fluids with Free Surfaces. *Physics of Fluids*, vol. 8, no. 12, p. 251-263, 1965.

HARPER, J. F. Bubbles Rising in Line: Why is the First Approximation so Bad?. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 351, p. 298-300, 1997.

HORTMANN, M., PERIC, M., e SCHEUERER, G. A. Finite Volume Multigrid Prediction of Laminar Natural Convection: Bench-Mark Solutions. *Int. J. Num. Meth. Fluids*, vol. 11, p. 189-207, 1990.

HOWELL, L. H. e BELL, J. B. An Adaptive-Mesh Projection Method for Viscous Incompressible Flow. *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 18, p. 996, 1997.

KHURANA, A. K. e KUMAR, R. Studies in Bubble Formation. *III. Chem. Eng. Sci.*, vol. 24, p. 1711-1723, 1969.

KIM, D. e LU, W. Three-Dimensional Model of Electrostatically Induced Pattern Formation in Thin Polymer Films. *Physical Review, B* 73, 035206 B, 2006.

LEBRÓN, S. C., A Técnica de Multi Grelha na Solução de Problemas de Lubrificação Elasto-Hidrodinâmica. *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal de Uberlândia, MG, 2001.

LEGENDRE, D., MAGNAUDET, J. e MOUNGIN, G. Hydrodynamic Interactions Between Two Spherical Bubbles Rising Side by Side in a Viscous Liquid. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 497, p. 133-166, 2006.

LESIEUR, M. Turbulence in Fluids. *Kluwer Academic Publishers*, 3^O Edição, 1997.

LIMA E SILVA, A. L. F. Desenvolvimento e Implementação de Uma Nova Metodologia para Modelagem de Escoamentos sobre Geometrias Complexas: Método da fronteira Imersa com Modelo Físico Virtual. *Tese de Doutorado*. Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil, 2002.

LIU, Z., ZHENG, Y., JIA, L. e ZHANG, Q. Study of Bubble Flow Structure Using PIV. *Chemical Engineering Science*. vol 60, p. 3537-3552, 2005.

LU, J. e TRYGGVASON, G. Effect of Bubble Size in Turbulent Bubbly Downflow in a Vertical Channel. *Chemical Engineering Science*, In Press, Accepted Manuscript, Availa-

ble on line, 2007.

LU, J., BISWAS, S. e TRYGGVASON, G. A DNS study of laminar bubbly flows in a vertical channel. *International Journal of Multiphase Flow*, vol. 32, iss. 6, p. 643-660, 2006.

MAGNAUDET, J., e EAMES, I. The Motion of High-Reynolds-Number Bubbles in Inhomogeneous Flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 32, 659-708, 2000.

MALISKA, C. R. Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional. *Ed. LTC-Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.*, Rio de Janeiro, 2004.

MARTIN, D. F. An Adaptive Cell-Centered Projection Method For the Incompressible Euler-Equations. *Ph.D. Thesis*, University of California, Berkeley, 1998.

MARTIN, D. e CARTWRIGHT, D. Solving Poisson's Equation Using Adaptive Mesh Refinement. *Technical Report M96/66*, University of California, Berkeley, Electronic Research Laboratory, <http://citeseer.ist.psu.edu/article/martin96solving.html>, 2006.

MAUCH, S. Efficient Algorithms for Solving Static Hamilton-Jacobi Equations. *PhD. Thesis*, California Institute of Technology, 2003

MCCORMICK, S. F. Multigrid Methods. *Frontiers in Applied Mathematics: 3*. Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987.

MIN, C. e Gibou, F. A Second Order Accurate Level Set Method on Non-Graded Adaptive Cartesian Grids. A ser publicado no *Journal of Computational Physics*, 2006.

MINION, M. L. A Projection Method for Locally Refined Grids. *Journal of Computational Physics*, vol. 127, p. 158, 1996.

MIYASHITA, H. e YAMADA, Y. Practical Improvements of Multigrid Iteration for Adaptive Mesh Refinement Method. *Fluid Dynamics Research*, vol. 36, no. 3, p. 137-152, 2005.

MITTAL, R. e IACCARINO, G. Immersed Boundary Methods. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 37, p. 239-261, 2005.

OLIVEIRA, J. E. S. Método de Fronteira Imersa Aplicado à Modelagem Matemática e

- Simulação Numérica de Escoamentos Turbulentos sobre Geometrias Móveis Deformáveis. *Tese de Doutorado*, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil, 2006.
- PADILHA, E. Simulação de Grandes Escalas da Transição à Turbulência em Sistemas Rotativos com Transferência de Calor. *Tese de Doutorado*, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil, 2004.
- PEEBLES, F. e GARBER, H. Studies on the Motion of Gas Bubbles in Liquid. *Chem. Eng. Prog.*, vol. 49, p. 88-97, 1953.
- PEHLIVAN, K. HASSAN, I. e VAILLANCOURT, M. Experimental Study on Two-Phase Flow Next Term and Pressure drop in Millimeter-Size Channels. *Applied Thermal Engineering*, vol. 26, iss. 14-15, p. 1506-1514, 2006.
- PESKIN, C. S. Numerical Analysis of Blood flow in the Heart. *Jounal of Computatinonal Physics*, vol. 25, p. 220, 1977.
- PESKIN, C. S. e MCQUEEN, D. M. Modeling Prosthetic Heart Valves for Numerical Analysis of Blood Flow in the heart. *Journal of Computational Physics*. vol. 37, 113, 1980.
- PESKIN, C. S. e MCQUEEN, D. M. A General Method for the Computer Simulation of Biological Systems Interacting with Fluids. *SEB Symphosium on Biological Fluid Dynamics*, Leeds, England, July 5-8, 1994.
- PINHO, A. Z. P. Simulação Numérica de Grandes Escalas em Cavidades Tridimensionais com Tampa Deslizante Utilizando Modelagem Dinâmica. *Tese de Doutorado*, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil, 2006.
- PUCKETT, E. G., ALMGREN, A. S., BELL, J. B., MARCUS, D. L. e RIDER, W. A High-Order Projection Method for Tracking Fluid in Variable Density Incompressible Flows. *Journal of Computational Physics*, vol. 130, p. 269-282, 1997.
- RABI, J. A. Aplicação do Método Multigrid na Solução Numérica de Problemas Simples de 2-D de Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor. *Tese de Doutorado*, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São José do Campos, SP, Brasil, 1998.
- RAMAKRISHNAN, S., KUMAR, R., e KULOOOR, N. R. Studies in Bubble Formation

- I Bubble Formation Under Constant Flow Conditions. *Chemical Engineering Science*, vol. 24, p. 731 – 747., 1969.
- RIBEIRO JR, C. P. e LAGE, P. L. C. Population Balance Modeling of Bubble Size Distributions in a Direct Contact Evaporator using a Sparger Model. *Chemical Engineering Science*, vol. 59, no. 12, p. 2363-2377, 2004.
- ROMA, A. M. A Multilevel Self Adaptive Version of the Immersed Boundary Method. *PhD Thesis*, New York University, 1996.
- ROMA, A. M., PESKIN C. S., e BERGER M. J. An Adaptive Version of the Immersed Boundary Method. *Journal of Computational Physics*, vol. 153, p. 509-534, 1999.
- ROMA, A. M. Notas Pessoais. Universidade de São Paulo - IME-USP, romा@ime.usp.br, 2006.
- SATYANARAYAN, A., KUMAR, R., e KULOOR, N. R. Studies in Bubble Formation - II Bubble Formation Under Constant Pressure Conditions. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 24, p. 749 – 761, 1969.
- SILVA, A. R., Simulação Numérica de Escoamentos em Transição sobre Cilindros Imersos. *Dissertação de Mestrado*, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil, 2004.
- SILVA FREIRE, A. P., PHILIPPE, P., MENUT P. e SU, J. Turbulência: Anais da I Escola de Primavera em Transição e Turbulência. *ABCM*, 2002.
- SILVEIRA-NETO, A. Relatório de Atividades - Pós Doutorado - Processo CNPq 200.754/87 – 4, 1997.
- SILVEIRA-NETO, A. e MANSUR, S. S. Turbulência. Universidade Federal de Uberlândia, *Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas*, 2003.
- SKAMAROCK W. C. e KLEMP J. B. Adaptive Grid Refinement for Two-Dimensional and Three-Dimensional Nonhydrostatic Atmospheric Flow. *Mon. Weather Re.*, vol. 121, p. 788, 1993.
- SMOLIANSKI, A. Finite-Element/Level-Set/Operator-Splitting (FELSOs) Approach for Computing Two-Fluid Unsteady Flows with Free Moving Interfaces, *Int. J. Numer. Meth.*

Fluids, vol. 48, p. 231-269, 2005.

SMOLIANSKI, A., HAARIO, H. e LUUKKA, P., 2004. Vortex Shedding Behind a Rising Bubble and Two-Bubble Coalescence: A Numerical Approach. *Applied Mathematical Modelling*, vol. 29, p. 615-632, 2004.

SMOLIANSKI, A., HAARIO, H. e LUUKKA, P. Numerical Study of Dynamics of Single Bubbles and Bubble Swarms. *Applied Mathematical Modeling*, Manuscrito Aceito, 10.1016/j.apm.2007.01.004, 2007.

SMAGORINSKY, J. General Circulation Experiments with Primitive Equations. *Monthly Weather Review*, vol. 91, p. 99-164, 1963.

SOUZA, F. S., MANGIAVACCHI, N., NONATO, L. G., CASTELO, A., TOMÉ, M. F., FERREIRA, V. G., CUMINATO, J. A. e MCKEE, S. A Front-Tracking/Front-Capturing Method for the Simulation of 3D Multi-Fluid Flows with Free Surfaces. *Journal of Computational Physics*, vol. 198, p. 469-499, 2006.

SOUZA, F. Simulação de Grandes Escalas de Escoamentos em um Hidrociclone. *Tese de Doutorado*. Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil, 2003.

STEINTHORSSON, E., MODIANO, D., CRUTCHFIELD, W. Y., BELL, J. B. e COLELLA, P. An Adaptive Semi-Implicit Scheme for Simulations of Unsteady Viscous Compressible Flow. *12th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, Orlando, FL, 1995.

STEWART, C. W. Bubble Interaction in Low-Viscosity Liquids. *Int. J. Multiphase Flow*, vol 21, p. 1037-1046, 1995.

SUSSMAN, M., ALMGREN, A., BELL, J., COLELLA, P., HOWELL, L. e WELCOME, M. An Adaptive Level-Set Approach for Incompressible Two-Phase Flows. *J. Comput. Phys.*, vol. 148, p. 81-124, 1999.

SUSSMAN , M., SMEREKA, P. e OSHER, S. A Level-Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow, *Journal of Computational Physics*, vol. 114, p. 146-159, 1994.

STRICKWERDA, J. C. Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations. *New York: Chapman & Hall*, 1989.

THORNBURG, H., SONI, B. K. e BOYALAKUNTAL, R. H. A Structured Grid Based Solution-Adaptive Technique for Complex Separated Flows. *Appl. Math Comput.* vol. 89, p. 259, 1998.

TERASAKA, K., e TSUGE, H. Bubble Formation Under Constant-Flow Conditions. *Chemical Engineering Science*, vol. 48, p. 3417-3422, 1993.

TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., JURIC, D., AL-RAWAHI, N., TAU-BER, W., HAN, J., NAS, S. e JAN, Y. J. A Front-Tracking Method for Computations of Multiphase Flow. *Journal of Computational Physics*, vol. 169, p. 708-759, 2001.

TRYGGVASON, G. ESMAELLI, A., LU, J. e BISWAS, S. Direct Numerical Simulations of Gas/Liquid Multiphase Flows. *Fluid Dynamics Research*, vol. 38, iss. 9, p. 660-681, 2006.

TRYGGVASON, G., ESMAEELI, A. e AL-RAWAHI, N. Direct Numerical Simulations of Flows with Phase Change. *Computers & Structures*, Vol. 83, Iss. 6-7, pp. 445-453, 2005.

UNVERDI, S. O. e TRYGGVASON, G. A Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multifluid Flows. *Journal of Computational Physics*, vol. 100, pp. 25-37, 1992.

VATSA, V. N., SANETRICK, M. D. e PARLETTE, E. B. Block Structured Grids for Complex Aerodynamic Configuration. *Proceedings of the Surface Modeling, Grid Generation and Related Issues in Computational Fluids Dynamics Workshop*, NASA Conference Publication, vol. 3291, p. 163, 1995.

WEINAN, E. e LIU, J. Projection Method I: Convergence and Numerical Boundary Layers. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, vol. 32, no. 4, p. 1017-1057, 1995.

WHITE, F. M. Viscous Fluid Flow. *McGraw-Hill*, 1991.

WHITE, F. M. Fluid Mechanics. *McGraw-Hill College*, 2002.

WINNIKOW, S., e CHAO, B. T. Droplet Motion in Purified Systems. *Physics of Fluids*, vol. 9, p. 50-61, 1996.

WÖNER, M. A Compact Introduction to the Numerical Modeling of Multiphase Flows.

Institut für Reaktorsicherheit Program Nukleare Sicherheitsforschung, 2003.

WRAITH, A. E. Two-Stage Bubble Growth at a Submerged Orifice. *Chem. Eng. Sci.*, vol. 26, p. 1659-1671, 1971.

YANG, J. C. e SONI, B. Structured Adaptive Grid Generation. *Appl. Math. Comput.*, vol. 65, p. 265, 1994.

YANH, J. e BALARAS, E. An Embedded-Boundary Formulation for Large-Eddy Simulation of Turbulent Flows Interacting with Moving Boundaries. *Journal of Computational Physics*, vol. 215, p. 12-40, 2006.

ZHANG, J. A Cost-Effective Multigrid Projection Operator. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 76, p. 325-333, 1996.

202

Apêndice A

Mapas Lagrangiano e Euleriano

Para que seja assegurado um suporte finito para a função Delta de Dirac a medida que a interface se move, *mapas* que identificam a localização da interface no nível l_{top-1} são criados. Tais mapas guardam as informações sobre onde estão localizados cada ponto lagrangiano na malha euleriana, ou seja, para um dado ponto k da interface identifica-se a qual malha este ponto pertence. Estes mapas consistem apenas de informações que são usadas a todo instante de tempo no processo de simulação numérica. Um outra finalidade, consiste em identificar se a interface está se movendo para fora do nível l_{bot} perdendo assim a configuração do suporte da função de Delta de Dirac. Para que isto seja possível uma borda denominada por *região proibida*, a qual contém ponteiros nulos, é criada ao redor das malhas projetadas do nível l_{top} no nível l_{top-1} .

À medida que a interface se desloca e toca a *região proibida* um ponteiro nulo é retornado acionando o algoritmo de remalhagem. A largura da borda ou da *região proibida* não deve ser menor que o suporte para a função Delta de Dirac. A Fig. A.1 ilustra a configuração do segundo mapa. Neste uma borda com duas células hachuradas é definida ao longo de todas as malhas do nível l_{top} que foram projetadas no nível l_{top-1} .

Os mapas aqui gerados são definidos em dois mapas “eulerianos” e um mapa “lagrangiano”. Estes mapas são consultados a todo instante de tempo no processo de simulação numérica, pois são eles que identificam em qual malha euleriana um determinado ponto lagrangiano se encontra. Os mapas eulerianos são matrizes de ponteiros com a quantidade de células do nível l_{bot} dividido por 2, pois isto advém da projeção das malhas pertencen-

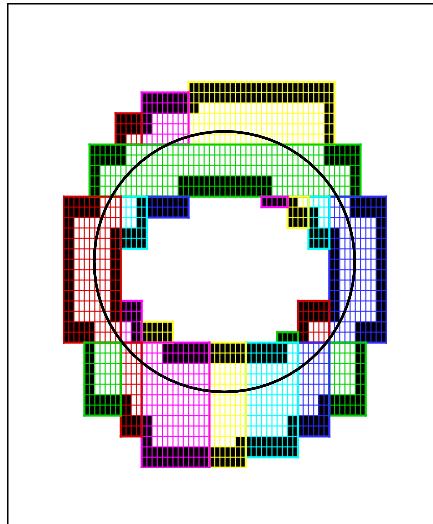


Figura A.1: Identificação da remalhagem para a presença da interface. Mapa com a região proibida definida por duas células no nível l_{top-1} .

tes ao nível l_{bot} no nível l_{bot-1} . O mapa lagrangiano por sua vez, é também um vetor de ponteiros de dimensão Nl , onde Nl é a quantidade de pontos lagrangianos.

Ambos os mapas armazenam em seu interior os ponteiros correntes, os quais guardam os dados de cada malha pertencente ao nível l_{bot} . O segundo mapa euleriano se difere do primeiro apenas pelo fato de não ser definido uma *região proibida* onde os ponteiros são nulos. É um mapa que apenas tem como função armazenar informações para uma eventual consulta. Os mapas eulerianos são atualizados a cada remalhagem, enquanto que o mapa lagrangiano é atualizado a todo passo no tempo, pois a todo passo no tempo a interface altera sua posição.

O algoritmo para a montagem dos mapas eulerianos é mostrado em A.1. O algoritmo A.2 apresenta a varredura para o mapa lagrangiano.

A.1: Mapa euleriano - algoritmo para a montagem da *região proibida*.

for $l = G_{top,1}, G_{top,n}$ **do**

 Projetar o nível l_{top} no nível l_{top-1} .

 Nulificar todos os ponteiros.

 Preencher cada célula com o seu próprio endereço (ponteiro corrente).

 Preencher as células fantasmas com o endereço das células pertencentes as malhas irmãs.

 Identificar as bordas com uma largura superior ao suporte da função Delta de Dira.

 Preencher as células das bordas com ponteiro nulo.

end for

A.2: Mapa lagrangiano

for $k = 1, Nl$ **do**

for $l = G_{top,1}, G_{top,n}$ **do**

if $k \in l$ **then**

 Armazenar o ponteiro corrente.

end if

end for

end for

Apêndice B

Estrutura de Dados

A estrutura de dados que compõe a malha adaptativa refinada localmente muitas vezes pode tomar dimensões indesejáveis para os processadores atuais. Assim, uma estrutura de dados dinâmica, robusta e simples de ser manipulada deve ser utilizada. Pelo fato da malha composta ser um conjunto hierárquico de malhas, ou seja, as malhas mais finas estão completamente inseridas nas malhas grossas, permite que o acesso a cada malha e consequentemente a cada nível seja seqüencial. Devido a estes fatores, o uso de listas ligadas simplesmente encadeadas é aqui aplicado para armazenagem dos dados e acesso seqüencial.

Uma lista ligada é uma estrutura de dados dinâmica, flexível, que permite a fácil inserção e remoção dos seus elementos. Cada elemento da lista ligada é chamado de nó e contém dois campos: dados (para armazenar a informação do elemento) e próximo nó - um apontador que contém uma referência de memória sobre onde está armazenado o próximo nó da lista. Tanto a inserção quanto a remoção de um dado nó é permitido pela lista ligada desde que esse acesso seja seqüencial. A figura B.1 apresenta um esquema representativo de uma lista ligada.

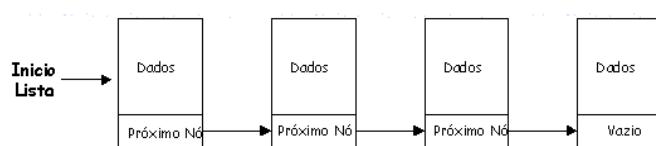


Figura B.1: Esquema representativo de uma lista ligada.

Para percorrer à lista é preciso definir um apontador *InícioLista* que aponta para o primeiro nó da lista. O “próximo nó” do último nó da lista é um apontador VAZIO (NULL) que não aponta para lugar nenhum, indicando o fim da lista.

Pode-se dizer que para cada nível l existe uma lista ligada, onde cada nó desta lista guarda as informações de uma malha. Uma malha é então caracterizada pelas seguintes informações armazenadas em cada nó da lista ligada:

- valor para o indice i da primeira célula correspondente ao espaçamento do nível em análise (ig),
- valor para o indice j da primeira célula correspondente ao espaçamento do nível em análise (jk),
- número de células na direção horizontal (nx),
- número de células na direção vertical (ny),
- posição que uma variável localizada na primeira célula ocupa em um vetor (iu).

A Figura B.2 permite exemplificar os dados contidos em uma malha composta com 3 níveis de refinamento.

<i>dados</i>	$G_{1,1}$	$G_{2,1}$	$G_{2,2}$	$G_{3,1}$
<i>ig</i>	1	5	3	11
<i>jk</i>	1	3	7	9
<i>nx</i>	6	6	6	4
<i>ny</i>	6	4	4	8
<i>iu</i>	1	37	61	85

Figura B.2: Malha composta (direita) contendo informações a serem armazenadas em uma lista ligada (esquerda).

Todo o processo computacional é simulado usando a linguagem FORTRAN90, o qual contém a estrutura de ponteiros e tipos de dados derivados, permitindo a montagem da lista ligada. Um exemplo de como é realizado no código a varredura das malhas é mostrada pelo Algoritmo B.1, onde *curr* identifica o ponteiro corrente.

B.1: Leitura de dados utilizando lista ligada

```
for  $L = l_{bot}, l_{top}$  do
    curr $\Rightarrow$ InicioLista( $L$ )
     $\Delta x = curr\%hx$ 
     $\Delta y = curr\%hy$ 
    curr  $\Rightarrow curr\%next$ 
loop
    ig = curr%grid%ix
    jg = curr%gridi%iy
    nx = curr%grid%mx
    ny = curr%grid%my
    iu = curr%gridi%iug
    :
    if (.not.associated(curr%next)) then
        exit
    end if
    curr $\Rightarrow curr\%next$ 
end loop
end for
```
