

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ENGENHARIA MECÂNICA**

**MODELAGEM NUMÉRICA DE PARÂMETROS DA  
INTERFACE E SUA APLICAÇÃO NA SIMULAÇÃO DO  
EFEITO JAMIN**

**Tese submetida à**

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA**

**para a obtenção do grau de**

**DOUTOR EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**KARIME LOUISE ZENEDIN GLITZ**

**Florianópolis, outubro de 2012**

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Glitz, Karime Louise Zenedin

Modelagem Numérica de Parâmetros da Interface e sua  
Aplicação na Simulação do Efeito Jamin [tese] / Karime  
Louise Zenedin Glitz ; orientador, Antônio Fábio Carvalho  
da Silva ; co-orientador, Clovis Raimundo Maliska. -  
Florianópolis, SC, 2012.

303 p. ; 21cm

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa  
Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. VOF. 3. Curvatura da  
interface. 4. escoamento multifásico. 5. Efeito Jamin. I.  
Silva, Antônio Fábio Carvalho da. II. Maliska, Clovis  
Raimundo. III. Universidade Federal de Santa Catarina.  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV. Título.

Karime Louise Zenedin Glitz

**MODELAGEM NUMÉRICA DE PARÂMETROS DA  
INTERFACE E SUA APLICAÇÃO NA SIMULAÇÃO DO  
EFEITO JAMIN**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: António Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.  
Coorientador: Clovis Raimundo Maliska, Ph.D

Florianópolis

2012



Karime Louise Zenedin Glitz

**MODELAGEM NUMÉRICA DE PARÂMETROS DA  
INTERFACE E SUA APLICAÇÃO NA SIMULAÇÃO DO  
EFEITO JAMIN**

Esta tese foi julgada aprovada para a obtenção do título “Doutor em Engenharia Mecânica”, e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Florianópolis, 8 de outubro de 2012

---

Prof. Júlio César Passos, Dr. - Coordenador do Curso

**Banca Examinadora:**

---

Prof. Antônio Fábio Carvalho da Silva, Dr. Eng.  
Orientador - Presidente

---

Prof. Clovis Raimundo Maliska, Ph.D.  
Coorientador

---

Prof. Aristeu da Silveira Neto, Dr. - Relator

---

Prof. João Flávio Vieira de Vasconcellos, Dr. Eng.

---

Prof. Emilio Ernesto Paladino, Dr. Eng.

---

Prof. Fabiano Gilberto Wolf, Dr. Eng.

---

Prof. Jader Riso Barbosa Junior, Ph.D.



Ao meu marido e aos meus pais.



## AGRADECIMENTOS

Ao Professor Antônio Fábio Carvalho da Silva pela orientação, pelas discussões proporcionadas, pelo tempo despendido conferindo linhas de código computacional comigo quando algum problema parecia insolúvel e, principalmente, pela paciência e dedicação acompanhando à distância a conclusão desta tese. Agradeço também ao Professor Clovis Raimundo Maliska pelas sugestões e ideias em alguns momentos cruciais desta tese.

Aos colegas e amigos do SINMEC, em especial aos engenheiros Bruno Terêncio e Arthur Soprano pelo auxílio no projeto FINEP-Magnesita, aos engenheiros Jaime Ambrus, Elisa Formentin, Fernando Hurtado, Gustavo G. Ribeiro, Umberto Sansoni Jr., Aymar Pescador Jr. e Mauricio Tada pelo apoio, convívio e discussões técnicas.

À secretária Tatiane C. M. Schweitzer e ao pesquisador visitante Axel Dihlmann, cujos trabalhos são indispensáveis para proporcionar um ambiente propício ao desenvolvimento de todas as teses e dissertações do SINMEC e também pelo apoio à distância nos últimos meses de desenvolvimento deste trabalho.

À Petrobras e aos colegas de empresa, pelos ensinamentos, incentivo e companheirismo. Agradeço em especial à minha gerente, Flávia Pacheco, por acreditar na conclusão desta tese e apoiá-la e ao engenheiro e consultor Régis Kruehl Romeu pela motivação em momentos difíceis, pela leitura desta tese, sugestões e discussões, pelos ensinamentos diários e, principalmente, pela amizade.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica pela oportunidade de qualificação e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) por financiar a maior parte desta tese.

Aos meus pais e ao meu irmão pelo amor, apoio incondicional e paciência. E ao meu marido Carlos Newmar Donatti pelo amor, motivação, apoio em todos os aspectos e por me acompanhar nessa jornada.



# SUMÁRIO

<b>1.</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1.	MOTIVAÇÃO	5
1.2.	OBJETIVO	6
1.3.	ESTRUTURA DA TESE	7
<b>2.</b>	<b>TEORIA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>9</b>
2.1.	ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS	9
2.2.	EFEITOS INTERFACIAIS	11
2.2.1.	<i>Delta de Dirac</i>	17
2.2.2.	<i>Vetor normal à interface</i>	17
2.2.3.	<i>Curvatura da interface</i>	19
2.3.	ÂNGULO DE CONTATO ESTÁTICO E DINÂMICO	29
2.3.1.	<i>Modelagem da curvatura da interface na linha de contato</i>	37
2.4.	EFEITO JAMIN	42
<b>3.</b>	<b>MODELO COMPUTACIONAL</b>	<b>51</b>
3.1.	MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	52
3.2.	TRATAMENTO NUMÉRICO DA INTERFACE: MÉTODO VOF	62
3.3.	CONDIÇÕES DE CONTORNO	71
3.3.1.	<i>Condição de parede impermeável sem escorregamento (no-slip)</i>	71
3.3.2.	<i>Condição de parede impermeável com escorregamento (free-slip)</i>	71
3.3.3.	<i>Condição de contorno periódica</i>	72
3.3.4.	<i>Condição de abertura (opening)</i>	72
3.4.	VALIDAÇÃO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL	73
3.4.1.	<i>Rompimento de uma barragem (broken dam)</i>	73
3.4.2.	<i>Rompimento de uma barragem com obstáculo (broken dam with an obstacle)</i>	77
3.4.3.	<i>Instabilidade de Rayleigh-Taylor</i>	81
3.5.	CONCLUSÕES	85
<b>4.</b>	<b>TRATAMENTO NUMÉRICO DOS EFEITOS INTERFACIAIS</b>	<b>87</b>
4.1.	MÉTODO HF2	87
4.2.	COMPONENTES DA FORÇA DEVIDA À TENSÃO INTERFACIAL	92
4.3.	AVALIAÇÃO DOS MODELOS DE CURVATURA	93
4.3.1.	<i>Gota estática</i>	93

4.3.2.	<i>Bolha ascendente em um fluido em repouso</i>	106
4.3.3.	<i>Onda capilar</i>	121
4.4.	CONCLUSÕES	125
<b>5.</b>	<b>MODELAGEM NUMÉRICA DO ÂNGULO DE CONTATO</b>	<b>128</b>
5.1.	GOTA ESTÁTICA	128
5.2.	GOTA EM DESEQUILÍBRIO	153
5.3.	CONCLUSÕES	161
<b>6.</b>	<b>PARALELIZAÇÃO</b>	<b>162</b>
6.1.	ROMPIMENTO DE UMA BARRAGEM COM OBSTÁCULO (BROKEN DAM WITH AN OBSTACLE):	170
6.2.	ROMPIMENTO DE UMA BARRAGEM SEM OBSTÁCULO (BROKEN DAM)	177
6.3.	BOLHA ASCENDENTE	183
6.4.	CONCLUSÕES	190
<b>7.</b>	<b>MODELO NUMÉRICO DO EFEITO JAMIN</b>	<b>192</b>
7.1.	MODELO NUMÉRICO	192
7.1.1.	<i>Dinâmica do escoamento</i>	195
7.1.2.	<i>Força de adesão</i>	225
7.2.	SIMULAÇÕES NUMÉRICAS, RESULTADOS E VALIDAÇÃO	229
<i>A evolução dos</i>		231
7.2.1.	<i>Configuração padrão do modelo</i>	232
7.2.2.	<i>Evolução das forças e dos ângulos de contato</i>	234
7.2.3.	<i>Velocidade terminal</i>	239
7.2.4.	<i>Diferença de pressão crítica</i>	243
7.2.5.	<i>Gota desacelerando</i>	256
7.2.6.	<i>Dificuldades presentes na simulação do efeito Jamin</i>	258
7.3.	CONCLUSÕES	263
<b>8.</b>	<b>CONCLUSÕES E CONTRIBUIÇÕES</b>	<b>268</b>
8.1.	CONTRIBUIÇÕES	273
8.2.	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	274
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>276</b>
	SOLUÇÕES BASEADAS EM ROY (2005)	295

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 1.</b> Gota de água sobre uma folha. ....	11
<b>Figura 2.</b> Comparação entre os resultados de duas simulações bidimensionais de uma bolha ascendente: (a) considerando e (b) desprezando a tensão interfacial. ....	12
<b>Figura 3.</b> Forças de coesão agindo sobre as moléculas de um líquido (ISENBERG, 1992). ....	13
<b>Figura 4.</b> Valores de alguns parâmetros da interface para um domínio com dois fluidos. ....	15
<b>Figura 5.</b> Componentes do vetor normal à interface. ....	18
<b>Figura 6.</b> Comportamento do núcleo de sexta ordem utilizado na operação de convolução. ....	22
<b>Figura 7.</b> Campo de fração volumétrica e estêncil utilizado para o cálculo da função altura. ....	25
<b>Figura 8.</b> Limites do volume (i,j). ....	27
<b>Figura 9.</b> Gota em equilíbrio termodinâmico. ....	30
<b>Figura 10.</b> Estênceis para o cálculo da função altura no volume fantasma ( $H_{\text{fantasma}}$ ). A região verde indica o fluido 1. ....	39
<b>Figura 11.</b> Classificação dos volumes vizinhos à parede. A cor verde indica o campo de fração volumétrica do fluido 1 e as linhas tracejadas indicam volumes fantasmas abaixo da superfície. ....	41
<b>Figura 12.</b> Dois canais interligados: a diferença de pressão que causa o escoamento do fluido 2 provoca a deformação das interfaces da gota do fluido 1, que se encontra presa às paredes do canal. ....	43
<b>Figura 13.</b> Deformação da gota, que adquire diferentes ângulos de contato, conduzindo à geração de uma diferença de pressão capilar. Nesta situação, $P_W > P_E$ . ....	44
<b>Figura 14.</b> Pressão em alguns pontos ao longo do canal para uma situação hipotética. Os ângulos de contato de recuo e de avanço valem $110^\circ$ e $120^\circ$ , respectivamente, e equivalem aos valores críticos dessa variável. ....	46
<b>Figura 15.</b> Componente do dispositivo gerador de gotas atuando como válvula capilar por meio do efeito Jamin (BOUKELLAL et al., 2009). O fluido escuro é água. ....	47
<b>Figura 16.</b> (a) Foto da gota em repouso e (b) variação da velocidade da gota com a $\Delta P$ aplicada: pontos vermelhos indicam a injeção de óleo FC3283 e os pontos azuis indicam a injeção de uma mistura desse óleo com surfactante (BOUKELLAL et al., 2009). ....	48

<b>Figura 17.</b> Malha para as variáveis $P$ , $f_1$ , $f_2$ , $\rho$ e $\mu$ .....	53
<b>Figura 18.</b> Malhas para (a) a componente horizontal da velocidade e (b) para a componente vertical.....	54
<b>Figura 19.</b> Algoritmo para a determinação de $u$ , $v$ e $P$ .....	61
<b>Figura 20.</b> Pontos empregados na determinação do vetor normal à interface no vértice inferior esquerdo do volume.....	64
<b>Figura 21.</b> Aproximação da interface por segmentos de reta. ...	65
<b>Figura 22.</b> Procedimento de determinação da fração volumétrica do fluido 1 que será advectada pela fronteira leste do volume de controle. ....	66
<b>Figura 23.</b> Algoritmo de mapeamento da interface.....	69
<b>Figura 24.</b> Fluxograma da solução do escoamento acoplado ao campo de fração volumétrica. ....	70
<b>Figura 25.</b> Variáveis a que são atribuídas as condições expressas em (3.29). ....	71
<b>Figura 26.</b> Configuração inicial do problema da <i>broken dam</i> ...	74
<b>Figura 27.</b> Resultados para o escoamento da <i>broken dam</i> : (a) Posição da frente de água e (b) Altura máxima da camada de água em função do tempo.....	76
<b>Figura 28.</b> Configuração inicial do problema da <i>broken dam</i> com obstáculo. ....	77
<b>Figura 29.</b> Configuração inicial dos fluidos para a simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor. Esta figura está fora de escala.....	82
<b>Figura 30.</b> Desenvolvimento da instabilidade de Rayleigh-Taylor. A sequência superior de imagens mostra os resultados obtidos com o código próprio, enquanto que os resultados obtidos com o <i>software ANSYS CFX® 11.0</i> são apresentados na sequência inferior.	84
<b>Figura 31.</b> Comparação da forma e da posição da interface em 0,4 s.....	85
<b>Figura 32.</b> (a) Campo de velocidades espúrias e (b) Campo de erros da curvatura para o caso da gota estática utilizando o método HF para avaliar a curvatura da interface (malha com 160x160 volumes)...	89
<b>Figura 33.</b> Exemplos de volumes em que a condição para a função altura não é satisfeita. ....	90
<b>Figura 34.</b> Gota estática em equilíbrio. ....	94
<b>Figura 35.</b> Normas dos erros para o caso Invíscido 1 após um passo de tempo: (a) norma $L_2$ e (b) norma $L_\infty$ da velocidade, (c) Erro $\Delta P_{\text{total}}$ , (d) erro $\Delta P_{\text{parcial}}$ e (e) norma $L_2$ da curvatura avaliada nas faces do volume. ....	98

<b>Figura 36.</b> Norma $L_2$ dos erros da velocidade: Casos (a) Viscoso 1, (b) Invíscido 2 e (c) Viscoso 2. ....	101
<b>Figura 37.</b> Evolução temporal de TKE para os casos (a) Invíscido 1 e (b) Viscoso 1 após 500 passos de tempo e (c) para o caso Invíscido 1 após 2000 passos de tempo.....	103
<b>Figura 38.</b> Campo de $f$ após 500 passos de tempo para o caso Invíscido 1: (a) método HF e (b) técnica da convolução ( $d=1,9\Delta x^{0,5}$ ). ....	105
<b>Figura 39.</b> Bolha ascendente.....	106
<b>Figura 40.</b> Interface da bolha do caso Francois obtida com (a) método HF, (b) HF2 ( $R_{\text{filtro}} = 0,15$ ), (c) técnica da convolução ( $d=3\Delta x$ ), (d) HF-fc ( $d=6\Delta x$ ), (e) HF-fc ( $d=1,9\Delta x^{0,5}$ ) e (f) HF-fc modificado ( $d=6\Delta x \exp[-10t]$ ).....	109
<b>Figura 41.</b> Comparação entre os resultados obtidos com o método HF (linha contínua) e com o <i>software</i> ANSYS CFX® 12.0 (linha tracejada): (a), (c) e (e) malha com 40 x 60 volumes; (b), (d) e (f) malha com 80 x 120 volumes.....	111
<b>Figura 42.</b> Comparação entre a forma final da interface da bolha ascendente obtida neste trabalho (linha contínua) e por Ginzburg e Wittum (linha vermelha tracejada). Cada letra corresponde a um dos casos listados na Tabela 4-3. ....	113
<b>Figura 43.</b> Linhas de corrente do caso Ginzburg/Unverdi.....	116
<b>Figura 44.</b> Bolha do caso E em $t = 0,09$ s obtida com (a) método HF e (b) técnica da convolução ( $d=3\Delta x$ ).....	120
<b>Figura 45.</b> Configuração inicial do escoamento de uma onda capilar.....	121
<b>Figura 46.</b> Evolução temporal do módulo da amplitude: (a) modelo HF e (b) modelo HF-fc modificado.....	125
<b>Figura 47.</b> Volumes em que há a determinação da curvatura da interface junto à parede. ....	128
<b>Figura 48.</b> Caso-teste da gota estática adaptado para o problema do ângulo de contato. ....	129
<b>Figura 49.</b> Norma $L_2$ da curvatura da interface nos volumes vizinhos à parede. Resultados obtidos após um único passo de tempo. ....	132
<b>Figura 50.</b> Módulo do erro da curvatura para os volumes que contêm a interface e são vizinhos à parede após um único passo de tempo: erros para $\text{volume}_{\text{cl}}$ , $\text{volume}_{\text{adjacente}}$ e $\text{volume}_{\text{parede}}$ . ....	136
<b>Figura 51.</b> Situação em que $H_{\text{cl}}$ não respeita os limites da malha. Os limites são indicados por $h_{\text{inf}}$ e $h_{\text{sup}}$ . ....	138

<b>Figura 52.</b> Fluxograma modificado proposto neste trabalho para o cálculo da curvatura no <b>volume<sub>cl</sub></b> .....	139
<b>Figura 53.</b> Fluxograma modificado proposto neste trabalho para o cálculo da curvatura no <b>volume<sub>adjacente</sub></b> .....	140
<b>Figura 54.</b> Norma $L_2$ da curvatura dos volumes vizinhos à parede e que contêm a interface. Resultados obtidos após um único passo de tempo para o algoritmo antigo (linhas tracejadas) e para o algoritmo modificado (linhas contínuas).....	141
<b>Figura 55.</b> Módulo do erro da curvatura para os volumes que contêm a interface e são vizinhos à parede após um passo de tempo: erros para volume <sub>cl</sub> , volume <sub>adjacente</sub> e volume <sub>parede</sub> . Comparação entre os resultados do algoritmo antigo (linhas tracejadas) e os resultados do algoritmo modificado (linhas contínuas). .....	144
<b>Figura 56.</b> Módulo das velocidades espúrias após um $\Delta t$ .....	145
<b>Figura 57.</b> Comportamento da Energia Cinética Total (TKE) ao longo do tempo ( $\Delta t = 10^{-3}$ ).....	148
<b>Figura 58.</b> Comportamento da Energia Cinética Total (TKE) ao longo do tempo para um ângulo igual a $150^\circ$ e malha com $160 \times 160$ volumes. ....	149
<b>Figura 59.</b> Norma $L_1$ da velocidade espúria para a gota estática ao longo de 100 mil passos de tempo para malha com $\Delta x = 0,0125$ m. ....	151
<b>Figura 60.</b> Norma $L_1$ do erro da curvatura da interface nos volumes vizinhos utilizando o algoritmo modificado (linha preta) e o status da alteração do estêncil para a determinação das funções altura para o volume <sub>adjacente</sub> (linha vermelha): valor unitário indica que a inversão do estêncil foi efetuada.....	152
<b>Figura 61.</b> Configuração inicial do segundo teste: a uma gota inicialmente em equilíbrio é imposto um novo ângulo de contato.....	154
<b>Figura 62.</b> Forma da gota em diferentes instantes de tempo após a imposição de novos valores de $\theta$ . ....	155
<b>Figura 63.</b> Forma da gota em equilíbrio após imposição de novos ângulos de contato.....	156
<b>Figura 64.</b> Norma $L_1$ do erro no campo de fração volumétrica após a imposição de um novo ângulo de contato. ....	157
<b>Figura 65.</b> Norma $L_1$ da velocidade após a imposição de um novo ângulo de contato. ....	159
<b>Figura 66.</b> Posição da linha de contato para diferentes tamanhos de malha e $\theta = 60^\circ$ .....	160

<b>Figura 67.</b> Interface da gota após 40 mil passos de tempo. Foi imposto um novo ângulo igual a $60^\circ$ .....	160
<b>Figura 68.</b> Particionamento de um domínio para um problema bidimensional. ....	164
<b>Figura 69.</b> Algoritmo do programa serial. ....	165
<b>Figura 70.</b> Algoritmo do programa paralelo (GLITZ; SILVA; DONATTI; MALISKA, 2010). ....	167
<b>Figura 71.</b> Configuração inicial do problema do rompimento da barragem com obstáculo.....	170
<b>Figura 72.</b> Particionamento do domínio para o problema da <i>broken dam</i> com obstáculo.....	172
<b>Figura 73.</b> Campo de fração volumétrica em $t = 1,25$ s e linhas de referência para os gráficos das comparações entre os resultados obtidos serial e paralelamente. ....	173
<b>Figura 74.</b> Comparação de valores da pressão obtidos nas simulações em paralelo e em serial em $t = 1,25$ s. ....	174
<b>Figura 75.</b> Comparação de valores da componente horizontal da velocidade obtidos nas simulações em paralelo e em serial em $t = 1,25$ s. ....	175
<b>Figura 76.</b> Comparação de valores da componente vertical da velocidade obtidos nas simulações em paralelo e em serial em $t = 1,25$ s. ....	176
<b>Figura 77.</b> Configuração inicial do problema da <i>broken dam</i> sem obstáculo. ....	177
<b>Figura 78.</b> Particionamento do domínio do problema da <i>broken dam</i> sem obstáculo. ....	178
<b>Figura 79.</b> Tempo total de computação e fator de <i>speed-up</i> em função do número de processadores para o problema da <i>broken dam</i> sem obstáculo. ....	180
<b>Figura 80.</b> Algoritmo serial alternativo. ....	182
<b>Figura 81.</b> Configuração inicial do problema da bolha ascendente. ....	184
<b>Figura 82.</b> Particionamento do domínio do problema da bolha ascendente. ....	186
<b>Figura 83.</b> Tempo total de computação e fator de <i>speed-up</i> em função do número de processadores para o problema da bolha ascendente. ....	188
<b>Figura 84.</b> Comparação entre os fatores de <i>speed-up</i> limitando a dez iterações no ciclo de paralelização (linha preta) e sem limitação (linha vermelha). ....	189

<b>Figura 85.</b> Fluxogramas das estratégias adotadas na modelagem dos ângulos de contato quando: (a) a gota permanece presa e (b) a gota é liberada.....	194
<b>Figura 86.</b> Esquema do efeito Jamin. ....	195
<b>Figura 87.</b> Perfil de pressão ao longo do canal em alguns instantes para um aumento infinitesimal de $P_w$ . ....	196
<b>Figura 88.</b> Regiões à montante e à jusante da gota. ....	198
<b>Figura 89.</b> Comportamento do perfil de pressão ao longo do tempo para a situação em que a gota é desprendida do canal quando o fluido em seu interior está acelerando.....	202
<b>Figura 90.</b> Distribuição da pressão à montante e à jusante da gota ao longo de $y$ .....	203
<b>Figura 91.</b> Campos das componentes da velocidade (em m/s) em diferentes instantes para $\Delta P=300$ Pa.....	205
<b>Figura 92.</b> Comportamento do perfil de pressão ao longo do tempo para a situação em que a gota é desprendida do canal quando o fluido em seu interior está desacelerando. ....	210
<b>Figura 93.</b> Campos das componentes da velocidade (em m/s) em diferentes instantes para $\Delta P=120$ Pa.....	214
<b>Figura 94.</b> Velocidade média do fluido na gota em função do tempo. ....	216
<b>Figura 95.</b> Instante de tempo em que a gota é liberada em função da $\Delta P$ aplicada ao canal.....	217
<b>Figura 96.</b> Comportamento do perfil de pressão ao longo do tempo para a situação em que a gota permanece presa. ....	221
<b>Figura 97.</b> Comportamento da velocidade média do fluido no interior da gota até 20 mil $\Delta t$ e perfis de pressão em alguns instantes. ....	222
<b>Figura 98.</b> Comportamento das forças de adesão e devido à diferença de pressão aplicada ao canal. Também são ilustrados os comportamentos dos ângulos de contato em função do tempo. As linhas tracejadas cinzas correspondem aos ângulos de contato críticos ( $111^\circ$ e $138^\circ$ ).....	223
<b>Figura 99.</b> Esquema de diferentes momentos em que a gota pode ser desprendida.....	224
<b>Figura 100.</b> Forças devido à tensão interfacial atuando nas linhas de contato de uma gota deformada. A componente na horizontal da resultante dessas forças corresponde à força de adesão, que se contrapõe ao movimento da gota. ....	226
<b>Figura 101.</b> Esquema de uma gota simétrica em equilíbrio. As pressões à montante e à jusante da gota são iguais. ....	227

<b>Figura 102.</b> Campos de fração volumétrica ( $f$ ) e da componente horizontal da força devida à tensão interfacial ( $F_{sv,x}$ ) calculada pelo método CSF para cada volume de controle. A área colorida ilustra uma parte da gota, que abrange metade da primeira interface. ....	228
<b>Figura 103.</b> Configuração do problema do efeito Jamin. A simulação é inicializada com uma gota simétrica. ....	230
<b>Figura 104.</b> Evolução dos ângulos de contato ao longo do tempo para $\Delta P$ igual a 300 Pa. Quando os ângulos críticos são atingidos, as linhas de contato são liberadas. ....	231
<b>Figura 105.</b> Domínio e configuração inicial do problema. ....	234
<b>Figura 106.</b> Evolução ao longo do tempo das forças de adesão (em módulo) e devido à diferença de pressão na gota para a situação em que ela permanece presa às paredes do canal. Nesta situação, foi aplicada uma diferença de pressão no canal de 50 Pa. Nessa figura também são mostradas as formas inicial e final da gota.....	235
<b>Figura 107.</b> Comportamento dos ângulos de contato ao longo do tempo para a mesma simulação da Figura 106.....	236
<b>Figura 108.</b> Evolução ao longo do tempo das forças de adesão (em módulo) e devido à diferença de pressão na gota para a situação em que ela é deslocada pelo óleo injetado quando uma diferença de pressão de 300 Pa é aplicada no canal.....	237
<b>Figura 109.</b> Volume de controle envolvendo a gota.....	238
<b>Figura 110.</b> Volumes em que a pressão à montante da gota é avaliada para o cálculo da força devida à diferença de pressão. Nesta figura, “f” indica a fração volumétrica de água no volume e “P” indica a pressão em Pa. O perfil de pressão ilustrado corresponde ao perfil ao longo da linha traço-ponto no esquema da gota. ....	239
<b>Figura 111.</b> Comparação entre a velocidade média da gota obtida do programa desenvolvido neste trabalho (linha vermelha) e a velocidade terminal da gota calculada pela equação (7.10) (linha preta). ....	241
<b>Figura 112.</b> Comparação entre a forma inicial (linha vermelha) e a forma final da gota quando a velocidade terminal é atingida (linha preta) para diferentes valores da diferença de pressão aplicada ao canal. ....	242
<b>Figura 113.</b> Comportamento dos ângulos de contato (linhas tracejadas) e da velocidade média da gota (linhas contínuas) para o modelo de ângulo de contato dinâmico original (em vermelho) e para o modelo modificado (em preto). Esses resultados foram obtidos de	

simulações com uma malha com 800 x 20 volumes e uma diferença de 300 Pa aplicada ao canal. .... 243

**Figura 114.** Velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão no canal. A  $\Delta P$  crítica vale 103 Pa. .... 245

**Figura 115.** Velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão no canal para três tamanhos de malha. .... 247

**Figura 116.** Campos das componentes (a) horizontal e (b) vertical da velocidade e (c) de pressão. Esses resultados foram obtidos na simulação empregando uma malha com 1600 x 40 volumes e uma diferença de 300 Pa aplicada ao canal. A linha preta indica a interface da gota..... 248

**Figura 117.** Linhas de corrente considerando um referencial se deslocando à velocidade média da gota. Esse resultado foi obtido na mesma simulação da Figura 116. A linha azul indica a interface. .... 249

**Figura 118.** Calotas da gota..... 250

**Figura 119.** Velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão aplicada no canal. Os resultados para as diferentes aproximações para o balanço de forças no canal são ilustrados: desprezando a dissipação viscosa nas calotas da gota (linha tracejada azul) e considerando-a (linhas preta e verde)..... 252

**Figura 120.** Contribuições das forças de adesão e viscosas na dissipação de energia do escoamento em regime permanente em função de diferentes valores de  $\Delta P$  aplicados ao canal. .... 252

**Figura 121.** Contribuições na dissipação viscosa dos efeitos viscosos no óleo (linha preta), na gota (linha azul) e em suas calotas (linha vermelha). No eixo das ordenadas à direita, o subscrito *i* indica uma das três parcelas mencionadas..... 253

**Figura 122.** Comportamento da velocidade média da gota em função do tempo para uma diferença de (a) 300 Pa e (b) 500 Pa aplicada ao canal: solução da equação (7.15) (preto) *versus* resultados da simulação (vermelho)..... 255

**Figura 123.** Evolução dos ângulos de contato ao longo do tempo para o caso em que a gota é desacelerada. .... 257

**Figura 124.** Comportamento da velocidade média da gota (linha vermelha) e do ângulo de avanço (linha tracejada preta) para o caso da gota sendo desacelerada. .... 258

**Figura 125.** Oscilação do ângulo de contato de avanço a partir de 135°. Nesta simulação foi considerado um ângulo de contato inicial de 130° e uma diferença de pressão no canal de 150 Pa. Considerou-se um

canal com comprimento de 1,4184 mm (oito vezes maior que sua altura). .....	259
<b>Figura 126.</b> Salto não-físico na força de adesão e na força devido à diferença de pressão em $4,95 \times 10^{-4}$ s, quando a gota já foi liberada. Este resultado corresponde à mesma simulação da Figura 125. Considerou-se que os ângulos de contato são mantidos constantes após a liberação das linhas de contato. Essa figura foi obtida empregando-se o algoritmo original, sem qualquer inversão do estêncil para corrigir as oscilações no ângulo de avanço.....	260
<b>Figura 127.</b> Fluxograma da solução do problema serial.....	262
<b>Figura 128.</b> Efeito Jamin em um canal convergente.....	275
<b>Figura 129.</b> Fluxograma para a determinação da curvatura e das componentes do vetor normal à interface no volume <sub>cl</sub> . .....	287
<b>Figura 130.</b> Fluxograma para a determinação da curvatura e das componentes do vetor normal à interface para o volume <sub>adjacente</sub> . .....	289
<b>Figura 131.</b> Estêncil perpendicular à parede para o cálculo da função altura do volume <sub>adjacente</sub> ( $H_1$ ). .....	290
<b>Figura 132.</b> Estênceis para o cálculo das funções altura envolvendo o volume <sub>parede</sub> . .....	290
<b>Figura 133.</b> Fluxograma para a determinação da curvatura e das componentes do vetor normal à interface para o volume <sub>parede</sub> . .....	291



## LISTA DE SIGLAS

CSF	: Continuum Surface Force
HF	: Height Functions (Funções Altura)
HF-fc	: Método HF com filtro por convolução
MMS	: Method of Manufactured Solutions (Método das Soluções Manufaturadas)
PDMS	: Dimetil polissiloxano
PLIC	: Piecewise-linear interface calculation
PRIME	: Pressure Implicit Momentum Explicit
TDMA	: Tri-diagonal matrix algorithm
VOF	: Volume of fluid



## LISTA DE SÍMBOLOS

### Arábicos

$a_0$	Amplitude inicial da perturbação	$m$
$A_0$	Amplitude inicial da perturbação	$m$
$A$	Coeficiente da matriz	
$b$	Componente da força de corpo	
$\mathbf{b}$	Forças de corpo	
$B$	Termo fonte	
$d$	Comprimento de atuação do núcleo da operação de convolução	$m$
$D$	Diâmetro da bolha	$m$
$D_h$	Diâmetro da gota	$m$
$f$	Diâmetro hidráulico Fator de fricção	
$F_{adesão}$	Força de adesão	$N$
$F_{QM}$	Taxa de variação da quantidade de movimento	$N$
$\mathbf{F}_{sv}$	Força devido à tensão interfacial	$N$
$g$	Componente da aceleração da gravidade	$m/s^2$
$\mathbf{g}$	Aceleração da gravidade	$m/s^2$
$h$	Função altura	$m$
$h_{inf}$	Limite inferior da malha, que deve ser respeitado pela função altura	$m$
$h_{sup}$	Limite superior da malha, que deve ser respeitado pela função altura	$M$
$H$	Função altura Altura do domínio	$m$ $m$
$H$	Altura do domínio	$m$
$H_0$	Altura inicial da coluna de água no problema da <i>broken dam</i> Posição inicial da bolha na direção vertical	$m$ $m$
$H_{cl}$	Função altura na linha/coluna que contém a linha de contato	$m$
$H_{fantasma}$	Função altura na linha/coluna fantasma	$m$
$H_1$	Função altura na linha/coluna adjacente à linha/coluna contendo a linha de contato	

<b>I</b>	Tensor identidade	
<b>K</b>	Núcleo da operação de convolução	
<b>L</b>	Comprimento do domínio	$m$
<b>L</b>	Comprimento do domínio	$m$
<b>L<sub>0</sub></b>	Comprimento inicial da coluna de água no problema da <i>broken dam</i>	$m$
	Posição inicial da bolha na direção horizontal	$m$
<b>L<sub>gota</sub></b>	Comprimento da gota em contato com a parede do canal	$m$
<b>M</b>	Massa	$kg$
<b><math>\dot{m}</math></b>	Fluxo de massa	$kg/s$
<b>M</b>	Massa	$kg$
<b>M</b>	Número de Morton	
<b>N</b>	Componente do vetor normal à interface	$m^{-1}$
<b>N</b>	Vetor normal à interface	$m^{-1}$
<b>N</b>	Número de volumes	
<b>N<sub>wall_int</sub></b>	Número de volumes vizinhos à parede que contêm a interface	
<b><math>\hat{n}</math></b>	Componente do vetor unitário normal à interface	
<b><math>\hat{n}</math></b>	Vetor unitário normal à interface	
<b>P</b>	Pressão	$Pa$
	Ordem de precisão	
<b>P</b>	Pressão	$Pa$
<b>P<sub>E</sub></b>	Pressão na saída do canal	$Pa$
<b>P<sub>W</sub></b>	Pressão na entrada do canal	$Pa$
<b>P<sub>montante</sub></b>	Pressão à montante da gota	$Pa$
<b>P<sub>jusante</sub></b>	Pressão à jusante da gota	$Pa$
<b>P</b>	Tensor tensão viscoso	
<b>R</b>	Razão de refino da malha	
<b>r<sub>c</sub></b>	Raio do canal	$m$
<b>R</b>	Raio da gota	$m$
	Raio da bolha	$m$
<b>S<sub>n</sub></b>	Fator de <i>speed-up</i>	
<b><math>\dot{\Sigma}_m</math></b>	Termo fonte da equação de conservação da massa	
<b><math>\dot{\Sigma}_u</math></b>	Termo fonte da equação de conservação da quantidade de movimento na direção x	
<b><math>\dot{\Sigma}_v</math></b>	Termo fonte da equação de conservação da quantidade de movimento na direção y	

$t$	Tempo	$s$
$T$	Tempo adimensionalizado	
$T_n$	Tempo computacional consumido pela simulação em paralelo com $n$ processadores	$S$
$T_s$	Tempo computacional consumido pela simulação serial	$S$
$\mathbf{T}$	Tensor tensão	
$u$	componente da velocidade na direção $x$	$m/s$
$\mathbf{u}$	Vetor velocidade	$m/s$
$U$	Velocidade característica do escoamento	$m/s$
$U_{gota}$	Velocidade média da gota	$m/s$
	Velocidade terminal da gota	$m/s$
$\mathbf{U}$	Vetor velocidade	$m/s$
$v$	Componente da velocidade na direção $y$	$m/s$
$\bar{v}^{2D}$	Velocidade do nariz de uma bolha bidimensional	$m/s$
$V$	Volume	$m^3$
$w$	Dimensão na direção perpendicular ao plano do papel	$m$
$x$	Coordenada na direção horizontal	
$x_0$	Posição do centro da gota	$m$
$x_{LC}$	Posição da linha de contato	$m$
$y$	Coordenada na direção vertical	

### Especiais

$Ca$	Número capilar	
$Co$	Número de Courant	
$Eo$	Número de Eötvös	
$Oh$	Número de Ohnesorge	
$Pe$	Número de Peclet	
$Re$	Número de Reynolds	
$We$	Número de Weber	
$C_{calota}$	Constante de proporcionalidade	
$R_{filtro}$	Raio de atuação do filtro	$m$
$R_{gota}$	Raio da gota	$m$
$\bar{U}_{gota}$	Velocidade média da gota	$m/s$
$TKE$	Energia cinética total	$J$
$\Delta$	Dimensão do volume de controle	$m$
$\Delta P$	Diferença de pressão	$Pa$
$\Delta P_c$	Diferença de pressão capilar	$Pa$

$\Delta P_{c,cr}$	Diferença de pressão capilar crítica	<i>Pa</i>
$\Delta P_{gota}$	Diferença de pressão na gota	<i>Pa</i>
$\Delta P_{calota}$	Diferença de pressão nas calotas da gota	<i>Pa</i>
$\Delta x$	Dimensão do volume de controle na direção x	<i>m</i>
$\Delta y$	Dimensão do volume de controle na direção y	<i>m</i>
$\Delta t$	Passo no tempo	<i>s</i>
$\Delta V$	Volume do volume de controle	<i>m<sup>3</sup></i>
$\langle f \rangle$	Fração volumétrica presente na porção advectada do volume	
*	Operação de convolução	
$\  \ $	Módulo de um vetor	

### Gregos

$\alpha$	Fator do esquema WUDS	
$\beta$	Fator do esquema WUDS	
	Gradiente de pressão imposto na condição de contorno periódica	<i>Pa/m</i>
$\delta$	Delta de Dirac	
$\varphi$	Variável genérica	
$\gamma$	Constante da reta	
$\kappa$	Curvatura da interface	<i>m<sup>-1</sup></i>
$\mu$	Viscosidade dinâmica	<i>Pa s</i>
$\rho$	Massa específica	<i>kg/m<sup>3</sup></i>
$\bar{\rho}$	Massa específica média	<i>kg/m<sup>3</sup></i>
$\sigma$	Coefficiente de tensão interfacial	<i>N/m</i>
$\sigma_{sg}$	Energia da interface sólido-fluido 1	
$\sigma_{sl}$	Energia da interface sólido-fluido 2	
$\theta$	Ângulo de contato	°
$\theta_0$	Ângulo de contato inicial	°
$\theta_d$	Ângulo de contato dinâmico	°
$\theta_{a,d}$	Ângulo de contato dinâmico de avanço	°
$\theta_{r,d}$	Ângulo de contato dinâmico de recuo	°
$\theta_e$	Ângulo de contato estático	°
$\theta_{a,lib}$	Ângulo de contato de avanço após a liberação da gota	°
$\theta_{r,lib}$	Ângulo de contato de recuo após a liberação da gota	°

$\theta_{a,cr}$	Ângulo de contato crítico de avanço	◦
$\theta_{r,cr}$	Ângulo de contato crítico de recuo	◦

### Subscritos

a	Avanço
e	Fronteira leste
E	Variável avaliada no centro do volume a leste
<i>i</i>	Índice que indica o fluido Índice da coluna da malha
<i>j</i>	Índice da linha da malha
<i>I</i>	Interface
<i>m</i>	Mistura
n	Fronteira norte
nb	Vizinho
N	Variável avaliada no centro do volume a norte
<i>old</i>	Relativo à iteração anterior
overlap	Relativo à região de sobreposição
P	Variável avaliada no centro do volume de controle de sua respectiva malha
R	Recuo
s	Fronteira sul
S	Variável avaliada no centro do volume a sul
w	Fronteira oeste
W	Variável avaliada no centro do volume a oeste
x	Coordenada na direção horizontal Diferenciação em relação a x
xx	Derivada segunda em relação a x
xxx	Derivada terceira em relação a x
y	Coordenada na direção vertical Diferenciação em relação a y
yy	Derivada segunda em relação a y
1	Relativo ao fluido 1
2	Relativo ao fluido 2

### **Sobrescritos**

$\sim$	Variável resultante da operação de convolução
0	Tempo anterior
$N$	Tempo anterior
$n+1$	Novo instante de tempo
P	Relativo à equação de conservação da massa
U	Relativo à equação da conservação da quantidade de movimento em x
V	Relativo à equação da conservação da quantidade de movimento em y

## RESUMO

O objetivo desta tese é o estudo de modelos de parâmetros da interface que permitam uma correta consideração dos efeitos interfaciais em escoamentos bidimensionais bifásicos e sua aplicação na modelagem de um problema prático: o efeito Jamin.

Em escoamentos multifásicos, a presença da interface pode alterar significativamente a dinâmica do escoamento. Esta interferência no comportamento do escoamento é ditada pelos efeitos interfaciais, podendo ser pronunciada em situações em que o coeficiente de tensão interfacial entre os fluidos é alto ou ainda quando o escoamento ocorre em um domínio com pequenas dimensões.

Pode-se prever o comportamento de tais escoamentos por meio de sua simulação numérica. Nessas simulações, os efeitos da tensão interfacial são contabilizados por meio de uma força adicionada às equações de conservação da quantidade de movimento. Como será mostrado ao longo desta tese, essa força depende da modelagem da curvatura da interface. Além disso, para uma correta aplicação dos efeitos da tensão interfacial é necessário conhecer a forma e a posição da interface ao longo do tempo.

Neste estudo foi desenvolvido um código computacional próprio capaz de prever a posição e a forma da interface empregando os métodos *Volume of fluid* (VOF) e *Piecewise-linear Interface Calculation* (PLIC) para a captura da interface. Foram então avaliados três modelos publicados na literatura para descrever a curvatura da interface no seio dos fluidos: o método de Funções Altura (*Height Functions* – HF), a técnica da Convolução e o método HF com filtro por convolução (HF-fc). Constatou-se nessa avaliação que, a partir do quarto nível de refino da malha, os erros obtidos com o método HF aumentaram. Uma análise mais detalhada desses resultados permitiu identificar que esse crescimento do erro, consequente da geração de correntes espúrias, está relacionado a uma anisotropia local do campo de curvatura.

Visando à redução de tais erros, dois novos métodos são propostos neste trabalho. Seus desempenhos são avaliados em termos do comportamento do erro da curvatura e da capacidade de amortecimento de correntes espúrias.

Estudou-se também a modelagem da curvatura da interface em situações em que há o seu contato com uma superfície sólida. Nesta

etapa foi proposta uma modificação ao método HF para novamente combater o crescimento do erro com o refino da malha.

Tendo em vista os altos tempos computacionais das simulações desenvolveu-se um algoritmo de paralelização, que resolve o escoamento pelo particionamento do domínio.

Por fim, aplicou-se a metodologia aqui estudada na reprodução de um fenômeno de suma importância para a Engenharia de Reservatórios de Petróleo: o efeito Jamin.

Dentre outras conclusões extraídas da simulação do efeito Jamin, verificou-se que uma expressão elaborada a partir de um balanço de forças no canal permite a determinação do comportamento da velocidade média da gota ao longo do tempo, até que seja atingido o seu valor terminal. Essa expressão foi validada pelos resultados numéricos obtidos nesta tese.

**Palavras-chaves:** VOF, curvatura da interface, escoamento multifásico, Volumes Finitos, paralelização, efeito Jamin.

## ABSTRACT

This thesis aims to model some of the interface parameters which affect the capillary effects in two-phase flows, and to reproduce the Jamin effect by applying these models to its simulation.

Interfacial effects play an important role in multiphase flows in micro-domains like the micro-fluidic devices or when the magnitude of the interfacial tension coefficient is high. These effects can be modelled in numerical simulations by the addition of a body force to the momentum equations. This force depends on the interface's curvature among other parameters, and in order to faithfully predict its effects, the position and shape of the interface should be well known.

In order to carry out this study a numerical code was developed. This code can track the position of the interface by employing the *Volume of fluid* (VOF) and the *Piecewise-linear Interface Calculation* (PLIC) methods. The performance of three curvature models reported in the literature was deemed: the Height Functions (HF) method, the Convolution technique and the Height Functions filtered by a convolution kernel (HF-fc). These models are able to evaluate the curvature of the interface in the bulk fluid.

In this study it was found that there is an increasing tendency in the  $L_2$  error norm of the velocity and curvature for the HF method when fine meshes are used. This behaviour is due to the generation of spurious currents, which is associated to the local anisotropy of the curvature field. In order to mitigate the generation of such currents two new models are proposed in this work.

The evaluation of the curvature of the interface in the neighbourhood of a wall as a function of the contact angle was also studied. Again it was observed that the curvature error increases with finer meshes when the HF method is employed. This observation leads to the development of a modified algorithm which deals with this increasing error.

Another contribution of this thesis is the development of a parallelized algorithm which solves the flow by dividing the domain into sub-domains.

Lastly the methodology studied in this work is applied in the simulation of a usual problem in Oil Reservoir Engineering: the Jamin effect.

It was verified in the study of the Jamin effect that an expression derived from a balance of forces acting on the channel where the flow

occurs can predict the temporal behavior of the drop's velocity, as well as the value of its terminal velocity. These results were validated by the results obtained by the simulations.

**Keywords:** VOF, curvature of the interface, multiphase flows, Finite Volumes, parallelization, Jamin effect.

# 1. INTRODUÇÃO

As forças interfaciais desempenham papel fundamental em vários problemas. Os efeitos causados pela presença de uma interface estão presentes em uma enorme diversidade de processos industriais, nos segmentos têxtil, aeroespacial, petrolífero, agrícola, siderúrgico, maquinaria, impressão gráfica e muitos outros. Esses efeitos podem ser benéficos ou prejudiciais ao processo, dependendo do caso.

Um exemplo bem conhecido de processo que tira partido de efeitos capilares é a confecção de roupas impermeáveis. Nesse caso, o princípio do método está intimamente relacionado ao ângulo de contato do fluido que molha o tecido e à rugosidade deste. Já na agricultura, pode interessar não a impermeabilização, mas, ao contrário, a rápida absorção e espalhamento de produtos pulverizados sobre as plantas, e isso também é ditado pelas forças capilares. A própria técnica de pulverização de um líquido em pequenas gotas depende da tensão interfacial, com aplicações também nos processos de revestimento e pintura. Outro exemplo, impossível mais próximo e palpável, é a impressão a jato de tinta das letras deste texto.

Por outro lado, há situações em que os efeitos capilares são indesejáveis e prejudiciais ao processo. É o caso, por exemplo — desta vez muito distante da visão e do tato, mas com especial interesse para esta tese — da recuperação secundária de petróleo em reservatórios molháveis a água. Injeta-se água para manter a pressão do reservatório e deslocar o óleo na direção dos poços produtores. Porém, como os canais que formam o meio poroso são muito estreitos, com tamanhos da ordem das dezenas de micro-metros<sup>1</sup>, as forças capilares tornam-se significativas, e a deformação das interfaces das gotas resulta no aprisionamento de uma parte do óleo dentro da rocha (ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006; LI, 2011). A água só será capaz de deslocar esse óleo residual caso a pressão de injeção supere os efeitos da tensão interfacial. Esse fenômeno de resistência capilar ao escoamento é denominado efeito Jamin. Segundo esse efeito, as interfaces de uma gota de óleo presa a um poro da rocha-reservatório se deformam devido à diferença de pressão aplicada aos extremos do poro<sup>2</sup>. Essa deformação da interface gera então uma diferença de pressão capilar que se opõe ao

---

<sup>1</sup> O tamanho dos poros depende do tipo de rocha, da seleção dos grãos e de outros fatores.

<sup>2</sup> Para o efeito Jamin ocorrer, é necessário que haja contato entre as interfaces da gota e as paredes do poro.

escoamento. Devido à histerese do ângulo de contato estático entre outros fatores, as linhas de contato da gota permanecem fixas às paredes do poro, fazendo com que a diferença de pressão na gota aumente. Isso resulta em uma nova deformação da interface e um novo aumento da diferença de pressão capilar. Essa dinâmica só será interrompida caso a diferença de pressão aplicada ao canal seja suficiente para provocar a deformação da gota até seu estado crítico, quando os ângulos de contato estáticos atingem seus valores críticos.

Uma alternativa para melhorar a eficiência de deslocamento do óleo após a recuperação secundária de petróleo é o emprego de surfactantes, que reduzem a tensão interfacial e a resistência capilar ao escoamento.

Entretanto, na própria indústria do petróleo é possível encontrar exemplos em que a ação capilar é benéfica ao processo. Uma dessas situações é o emprego de fluidos de perfuração com micro-bolhas, as quais tamponam os poros da rocha durante o processo. Neste caso, os efeitos capilares impedem que a bolha seja transportada pelo fluido de perfuração para dentro da rocha, reduzindo a invasão de fluido de perfuração e o dano à formação que a migração deste fluido causa (BJORNDALLEN et al., 2009).

Outro exemplo favorável ainda nesta área é a injeção de surfactante no reservatório numa tentativa de produção do óleo residual, no que se denomina recuperação terciária de petróleo. Como mencionado anteriormente, o surfactante reduz a tensão interfacial do óleo, facilitando sua remoção. Porém, há um segundo papel que pode ser desempenhado pelo surfactante: esta substância pode se combinar com o óleo, formando gotas de óleo emulsionado. Essas gotas então tamponam os canais por onde a água escoava preferencialmente, forçando-a a passar por regiões ainda não varridas (WANG et al., 2010). Esse tamponamento é resultado da ação dominante das forças capilares.

Esses exemplos ilustram a relevância do estudo do comportamento de escoamentos bifásicos de fluidos imiscíveis com foco mais específico na dinâmica de sua interface e nos efeitos capilares originados pela ação da sua curvatura e da tensão interfacial.

Esse tipo de estudo pode ser realizado de duas formas: experimentalmente, em laboratórios; ou por meio de simulações computacionais. Em geral, os experimentos necessitam de equipamentos caros e de longo tempo de planejamento, montagem da bancada e execução. Além disso, eles são capazes de reproduzir apenas escoamentos sujeitos a condições muito específicas, para as quais a

bancada de ensaio foi projetada. Caso seja necessário avaliar outras condições, pode ser necessária a construção de uma nova bancada. Há ainda condições que podem ser muito difíceis, praticamente impossíveis, de se reproduzir em laboratório.

A simulação numérica é mais versátil. Ela é capaz de reproduzir uma variedade muito mais ampla de condições de escoamento, bastando apenas alterar a definição de suas condições de contorno, com custo bastante menor. Além disso, como outras vantagens, podem-se citar a ausência de influência do ambiente externo nos resultados e a facilidade do estudo da sensibilidade da solução em relação à variação de parâmetros.

Entretanto, é importante salientar que no estudo de escoamentos bifásicos transientes em geometrias complexas, em que é necessário identificar a posição e a forma da interface, a simulação numérica ainda apresenta muitos desafios. E, portanto, experimentos sempre devem ser realizados, pois eles são insubstituíveis para validar os modelos matemáticos e os códigos numéricos. Além disso, nem todo problema existente na natureza pode ser modelado por equações diferenciais e, conseqüentemente, ser simulado numericamente. Este fato ressalta a importância da realização de experimentos.

Nesta tese usam-se métodos de simulação numérica para estudar escoamentos bifásicos imiscíveis em que os efeitos capilares são pronunciados. Quando tais efeitos são importantes, a correta modelagem dos parâmetros da interface é crucial para o sucesso da simulação numérica. Os efeitos capilares advêm da existência de uma interface deformável, sujeita a uma tensão tangencial, que age no sentido de minimizar a área superficial da interface. Isto é, as forças interfaciais dependem tanto da tensão interfacial quanto da curvatura que a interface adquire ao se deformar.

Numericamente, a força devida à tensão interfacial pode ser modelada como uma força de corpo, que é inserida nas equações de Navier-Stokes. Ela pode ser definida pelo produto:

$$\mathbf{F}_{sv} = \int_{\Gamma} \sigma \kappa(\mathbf{X}, t) \mathbf{n}_i(\mathbf{X}, t) \delta_i(\mathbf{x} - \mathbf{X}) d\mathbf{x} \quad (1.1)$$

onde  $\sigma$  é o coeficiente de tensão interfacial,  $\kappa$  é a curvatura da interface,  $\mathbf{n}_i$  é o vetor unitário normal a ela,  $\delta_i$  corresponde ao delta de Dirac e  $\mathbf{X}$  é um ponto sobre a interface  $\Gamma$ . Este último fator tem como função restringir os efeitos da força à região da interface. Esse

tratamento numérico foi elaborado por Brackbill, Kothe e Zemach (1992) em seu método denominado *Continuum Surface Force* (CSF).

Analisando este modelo constata-se que a modelagem dos efeitos capilares depende exclusivamente de um tratamento numérico adequado para a curvatura e o vetor normal à interface. Além disso, a força devido à tensão interfacial constitui uma não-linearidade nas equações de Navier-Stokes. Isto porque os campos de velocidade e pressão dependem dela e, a curvatura e o vetor normal à interface são determinados a partir do campo de fração volumétrica, o qual, por sua vez, depende das componentes da velocidade. Portanto, uma estimativa incorreta desses parâmetros da interface influenciará diretamente no comportamento da solução do escoamento, podendo mesmo gerar resultados espúrios. Isto é o que acontece, por exemplo, no caso de uma gota estática na ausência da gravidade. Como será mostrado adiante, uma avaliação inadequada da curvatura da interface dá origem a um campo de velocidades espúrias, que podem levar a uma deformação irreal da gota.

A modelagem do escoamento fica ainda mais complexa quando há contato entre os fluidos e uma superfície sólida. Nesta situação, a força devida à tensão interfacial exerce efeitos de adesão à superfície, que se contrapõem aos efeitos inerciais, dificultando o deslocamento da interface. A força de adesão gerada por esse contato dependerá do ângulo formado entre o sólido e a reta tangente à interface, pois é este ângulo que determina a curvatura da interface e o vetor normal a ela na linha de contato<sup>3</sup>. Logo, nesse caso, devem ser corretamente modelados tanto o ângulo de contato quanto a curvatura da interface determinada a partir desse ângulo.

Este forte acoplamento entre os parâmetros da interface e a solução do escoamento em problemas onde os efeitos interfaciais são significativos gera a necessidade de uma modelagem satisfatória dos parâmetros da interface, visando à minimização de erros nas suas estimativas, de forma que a solução final do escoamento não sofra com eles. Este é o foco desta tese: o estudo de modelos de estimativa de parâmetros da interface, bem como a solução do transporte da interface para uma correta definição de cada fase.

---

<sup>3</sup> Linhas de contato são definidas pela interseção da interface com a superfície sólida em contato com os fluidos.

## 1.1. MOTIVAÇÃO

A motivação inicial deste trabalho surgiu de um projeto de pesquisa do SINMEC (Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor, do Departamento de Engenharia Mecânica da UFSC), financiado pela FINEP e pela Magnesita, fabricante de refratários para a indústria siderúrgica (GLITZ et al., 2009). Naquele projeto, desejava-se estudar o comportamento fluidodinâmico da interface entre o aço fundido e a escória em moldes de lingotamento contínuo, de forma a determinar parâmetros críticos do escoamento de aço que levassem ao arraste de parte da escória para o interior do banho de aço fundido. A determinação desses parâmetros possibilita a alteração de variáveis operacionais do processo de lingotamento contínuo no sentido de aumentar a produção, sem que a qualidade do produto final seja prejudicada, uma vez que a presença de escória neste produto — chapas, tarugos, lingotes — é considerada um defeito.

Ao longo do projeto foi desenvolvido um código computacional que descreve o escoamento bifásico de fluidos imiscíveis e mapeia a interface entre eles. Após o término deste projeto, foram estudados e implementados modelos que descrevem a curvatura da interface e o acoplamento da força interfacial com os campos de pressão e velocidade.

Mais tarde, com o ingresso da autora na Petrobras, a autora teve contato com problemas em que os efeitos capilares são importantes. Com o apoio desta empresa na conclusão do doutoramento e, por ser o tratamento dos efeitos interfaciais o tema desta tese, decidiu-se incluir neste trabalho a modelagem do ângulo de contato e aplicar os métodos aqui estudados na simulação de um problema fundamentalmente correlato e de bastante importância na Engenharia de Reservatórios de Petróleo: o efeito Jamin.

Além de relevante para a indústria do petróleo, o efeito Jamin e suas consequências são significativos também no escoamento em trocadores de calor (LEE; LEE, 2010), em sistemas de lubrificação e na geração de micro-gotas — que constituem micro-reatores para o controle de reações químicas (WANG; DIMITRAKOPOULOS, 2012) e que são utilizadas nas indústrias farmacêutica e alimentícia (BAROUD; GALLAIRE; DANGLA, 2010).

## 1.2. OBJETIVO

Este trabalho tem como objetivo o estudo e modelagem numérica de escoamentos bifásicos de fluidos imiscíveis, onde os efeitos interfaciais são relevantes. Seu principal foco é a modelagem de parâmetros da interface: transporte da interface, estimativa da curvatura, determinação da força devido à tensão interfacial e modelagem do ângulo de contato estático e dinâmico. O estudo se restringiu a escoamentos bidimensionais com baixos números de Reynolds e baixos números Capilares. Não foram abordados escoamentos turbulentos, nem a transição para esse tipo de escoamento. Além disso, não são consideradas variações no coeficiente de tensão interfacial, que originariam o efeito Marangoni.

Para a realização desse estudo, desenvolveu-se um código numérico, que foi validado analiticamente e também por meio da comparação com resultados experimentais e de outros programas. O código implementado contemplou diferentes condições de contorno e diferentes modelos de estimativa da curvatura. Além disso, propuseram-se melhorias para um desses modelos de curvatura e também para o modelo que descreve o ângulo de contato entre os fluidos e uma superfície sólida.

Tendo em vista os altos tempos computacionais envolvidos na solução desses escoamentos, outro objetivo desta tese foi a elaboração e avaliação de um algoritmo de paralelização da solução do problema pelo método PRIME (MALISKA, 2004).

Por fim, os métodos estudados nesta tese foram aplicados na modelagem de um problema de interesse prático da área de engenharia de reservatórios de petróleo: o efeito Jamin. Neste item, visou-se à determinação de um parâmetro crítico do problema por meio de simulações sucessivas do escoamento. A identificação desse parâmetro crítico e mesmo a simulação de tal fenômeno empregando-se algum *software* comercial não é possível, dadas as peculiaridades do efeito Jamin. Por exemplo, a tentativa de simular esse efeito utilizando-se o *software* ANSYS CFX® resultou no desprendimento da gota do canal logo no primeiro passo de tempo e o ângulo de contato permaneceu constante ao longo de toda a simulação. Ou seja, os *softwares* comerciais não são capazes de reproduzir esse fenômeno.

Além disso, procurou-se elaborar, com base em modelos publicados na literatura para situações análogas, um modelo simples, baseado em um balanço de forças, que descreve o escoamento após a

superação do efeito Jamin. Este modelo, validado pelos resultados das simulações numéricas, permite a previsão do comportamento da velocidade da gota com o tempo e de seu valor terminal.

### 1.3. ESTRUTURA DA TESE

A tese está estruturada em oito capítulos. Este primeiro capítulo tratou da importância prática do tipo de escoamento que será modelado, da motivação da tese e dos seus objetivos. Já no segundo capítulo, baseado numa revisão bibliográfica, apresenta-se a teoria da modelagem matemática de escoamentos multifásicos, da ação da tensão interfacial, dos ângulos de contato estático e dinâmico e do efeito Jamin. O terceiro capítulo aborda a modelagem computacional do escoamento bifásico, incluindo uma validação dos resultados obtidos nesta etapa. Em seguida, discute-se o tratamento numérico dos efeitos da interface, com a introdução de modelos de estimativa da curvatura da interface e a inserção da força devida à tensão interfacial nas equações de Navier-Stokes. Como antes, diversos modelos são avaliados e seus resultados são validados. Isso permitiu a seleção de um único modelo de curvatura para o prosseguimento da tese. No quinto capítulo, é apresentada a modelagem da curvatura da interface a partir dos ângulos de contato estático e dinâmico, com validação e discussão de resultados de casos-teste. Um algoritmo de paralelização da solução do escoamento é proposto no sexto capítulo, cuja formulação foi motivada pelos altos tempos computacionais envolvidos nas simulações. Os métodos estudados nos capítulos anteriores são então aplicados à modelagem do efeito Jamin, apresentado no sétimo capítulo juntamente com o modelo proposto. Por fim, o último capítulo reúne as conclusões e revisa as contribuições deste trabalho, além de propor sugestões para trabalhos futuros.



## 2. TEORIA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo, estruturado em quatro seções, apresenta a teoria e uma revisão bibliográfica dos seguintes assuntos: modelagem de escoamentos multifásicos empregando-se o modelo de mistura; efeitos interfaciais; ângulo de contato estático e dinâmico; e efeito Jamin. Esse material é importante para a leitura dos capítulos posteriores.

### 2.1. ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

Um sistema multifásico é um sistema composto por duas ou mais fases, onde o termo *fase* é utilizado para designar fluidos (na condição de fase contínua ou de fase dispersa) ou sólidos (na condição de fase dispersa). Mais propriamente, um sistema multifásico é um sistema contendo, no mínimo, uma fase fluida contínua e outra fase contínua ou dispersa na fase fluida. Como exemplos de sistemas multifásicos, podem-se citar:

- Leitos fluidizados: nessa aplicação, a fase contínua é um fluido (geralmente gás), e a fase dispersa é um sólido;
- Oleodutos: onde escoam três fases (gás, água e óleo), sendo possíveis diversas configurações de escoamento;
- Atomizadores: um gás constitui a fase contínua, e as gotas de um líquido formam a fase dispersa.

Dependendo de sua morfologia, os escoamentos multifásicos podem ser descritos pelo modelo heterogêneo ou pelo modelo de mistura. Para uma discussão da morfologia de escoamentos multifásicos bem como da obtenção das equações de ambos os modelos referenciam-se os trabalhos de Paladino (2005) e Enwald, Peirano e Almstedt (1996).

#### Modelo de mistura

O modelo de mistura pode ser aplicado quando as fases estão completamente separadas, como é o caso do escoamento estratificado, ou quando as partículas num escoamento disperso são suficientemente pequenas, sendo arrastadas pela fase contínua à mesma velocidade desta. Assim, considera-se apenas um conjunto de equações de conservação da massa de cada fase e da quantidade de movimento da mistura na solução do escoamento. A distinção entre as fases é feita a partir das propriedades físicas dos fluidos.

Logo, considerando um campo de pressão  $P$  e um único campo de velocidade  $U$  para todas as fases, as equações para um sistema bifásico empregando o modelo de mistura adquirem a seguinte forma:

$$\frac{\partial(f_i \rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (f_i \rho_i \mathbf{U}) = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial(\rho_m \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U} \mathbf{U}) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho_m \mathbf{b} + \mathbf{F}_{sv}. \quad (2.2)$$

O último termo desta equação é a força devida à tensão interfacial, cuja expressão é apresentada na equação (1.1).

A equação (2.2) expressa a conservação da quantidade de movimento linear para uma mistura de duas fases. Essa equação é obtida somando-se as equações de conservação da quantidade de movimento para cada fase. Nessa equação, as propriedades da mistura são expressas por médias ponderadas pelas frações volumétricas. Ou seja, a massa específica da mistura,  $\rho_m$ , que aparece na equação (2.2), é dada por

$$\rho_m = f_1 \rho_1 + (1 - f_1) \rho_2. \quad (2.3)$$

Considerando fluidos newtonianos, o tensor tensão, representado por  $\mathbf{T}$  na equação (2.2), é expresso por

$$\mathbf{T} = -P\mathbf{I} - \frac{2}{3}\mu_m(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{I} + \mu_m[\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T], \quad (2.4)$$

onde assume-se que a viscosidade da mistura é dada por

$$\mu_m = f_1 \mu_1 + (1 - f_1) \mu_2. \quad (2.5)$$

Como pode ser constatado das equações (2.3) e (2.5), as frações volumétricas das fases estão relacionadas entre si pela equação da conservação volumétrica, segundo a qual

$$f_2 = 1 - f_1. \quad (2.6)$$

Utilizando o modelo de mistura, o problema do escoamento de duas fases é, portanto, descrito pelas equações de conservação da massa de uma das fases, de conservação da quantidade de movimento linear da mistura e de conservação volumétrica. Considerando que as propriedades físicas das fases são constantes, as incógnitas desse problema são: campos de velocidade ( $\mathbf{U}$ ), de pressão ( $P$ ) e de fração volumétrica ( $f_1$  e  $f_2$ ). Logo, é necessária mais uma equação para fechar o problema, uma vez que há mais incógnitas do que equações. Tal

equação é a de conservação da massa da mistura, obtida somando as equações de conservação da massa de cada uma das fases:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U}) = 0, \quad (2.7)$$

que, para fluidos incompressíveis, reduz-se a  $\nabla \cdot \mathbf{U} = 0$ .

Esta tese adotou o modelo de mistura (e não o modelo heterogêneo), pois as fases dos escoamentos simulados encontravam-se separadas, com uma interface bem definida. Em conjunto às equações deste modelo, empregou-se um método de mapeamento da interface, como será visto no próximo capítulo.

## 2.2. EFEITOS INTERFACIAIS

Conforme mencionado anteriormente, o último termo da equação (2.2) corresponde à força gerada pelos efeitos da tensão interfacial. A tensão interfacial<sup>4</sup> atua entre um líquido e um segundo fluido (líquido ou gás), e age no sentido de reduzir a área de interface entre esses fluidos. A Figura 1 ilustra a atuação da tensão interfacial em uma gota, fazendo com que ela adquira a forma aproximadamente esférica, que minimiza a área superficial.



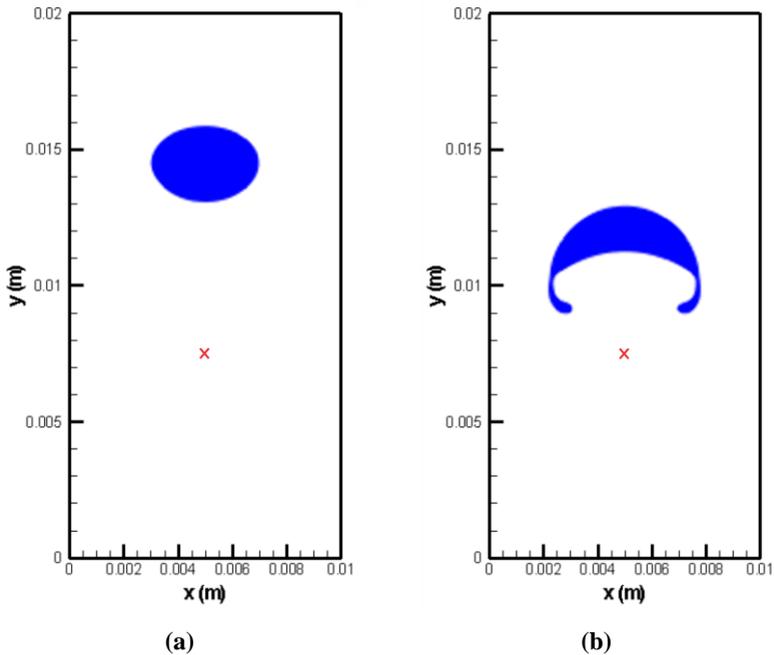
**Figura 1.** Gota de água sobre uma folha<sup>5</sup>.

---

<sup>4</sup> O termo “tensão superficial” é comumente utilizado em problemas que envolvem superfícies livres.

<sup>5</sup> Fonte: <http://www.hyd-masti.com/2008/12/exceptionally-beautiful-photographs.html>

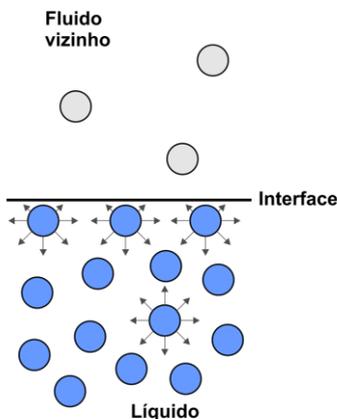
Já a Figura 2 compara os resultados de duas simulações bidimensionais realizadas durante o desenvolvimento desta tese para uma bolha de um fluido movendo-se em um reservatório repleto de outro fluido mais denso. A tensão interfacial foi considerada na situação (a), mas desprezada na situação (b). Ambas as figuras exibem a posição e a forma da bolha no instante igual a 0,06 s. À exceção da tensão interfacial, todos os demais parâmetros das simulações são idênticos.



**Figura 2.** Comparação entre os resultados de duas simulações bidimensionais de uma bolha ascendente: (a) considerando e (b) desprezando a tensão interfacial.

Como pode ser observado, a ausência da tensão interfacial conduziu a uma maior deformação da bolha, resultando num aumento de sua largura e na formação de uma saia. Conseqüentemente, o arrasto de forma sobre a bolha da Figura 2 (b) é maior, impedindo-a de atingir a mesma altura da situação em que a tensão interfacial foi considerada. Já nesta situação, a bolha manteve um formato elipsoidal devido aos efeitos da tensão interfacial.

O motivo pelo qual a gota da Figura 1 e a bolha da Figura 2 (a) adquirem uma forma mais próxima da esférica está relacionado às interações moleculares e pode ser mais facilmente entendido analisando-se o caso de uma gota de água em contato com ar: enquanto que as moléculas no interior do líquido estão sujeitas a forças de atração de todos os lados, sendo a força resultante nula, as moléculas na superfície deste líquido sofrem a ação de uma força mais fraca das moléculas do fluido vizinho a essa superfície. Assim, a força resultante nessas moléculas superficiais agirá no sentido de “puxar” as moléculas para o interior do líquido, reduzindo sua área superficial. Essa situação é ilustrada na Figura 3.



**Figura 3.** Forças de coesão agindo sobre as moléculas de um líquido (ISENBERG, 1992).

Nas equações de conservação da quantidade de movimento linear, os efeitos relativos à tensão interfacial são considerados por meio de dois termos: um termo devido à variação do coeficiente de tensão interfacial ao longo da direção tangente à interface ( $\nabla_s \sigma$ ) e um segundo termo, que considera a força que age na direção normal à interface ( $\sigma \kappa \mathbf{n}_i \delta_i$ ). O primeiro termo é responsável pelo efeito de Marangoni e é significativo quando há gradientes de temperatura ou de concentração, que causam a variação da tensão interfacial. Uma vez que essa tese aborda escoamentos imiscíveis e isotérmicos, tal termo é desprezado.

Um dos métodos mais usados para modelar numericamente as contribuições da tensão interfacial, expressas pelo termo  $\sigma \kappa \mathbf{n}_i \delta_i$  é o método *Continuum Surface Force* (CSF), desenvolvido por Brackbill, Kothe e Zemach (1992). Esse método permite a consideração dos efeitos da tensão interfacial quando o Método de Volumes Finitos – que foi o método utilizado nesta tese – é aplicado na solução do escoamento.

Um dos grandes problemas na modelagem desse termo é a transição abrupta de variáveis do escoamento na interface. O modelo CSF lida com esse problema interpretando os efeitos da tensão interfacial como efeitos contínuos, atuantes ao longo de uma faixa que envolve a interface, em vez de concentrar os efeitos numa região estreita (KOTHE; MJOLSNESS, 1992).

Segundo esse modelo, a contribuição da tensão interfacial é inserida na equação de conservação da quantidade de movimento sob a forma de uma força de corpo, expressa por

$$\mathbf{F}_{sv} = \int_{\Gamma} \sigma \kappa(\mathbf{X}, t) \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{X}, t) \delta_s(\mathbf{x} - \mathbf{X}) d\mathbf{x} \quad (2.8)$$

onde  $\kappa$  é a curvatura da interface,  $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{n}/|\mathbf{n}|$  com  $\mathbf{n}$  é o vetor normal à interface e  $\delta_s$  representa uma distribuição, que corresponde ao delta de Dirac.

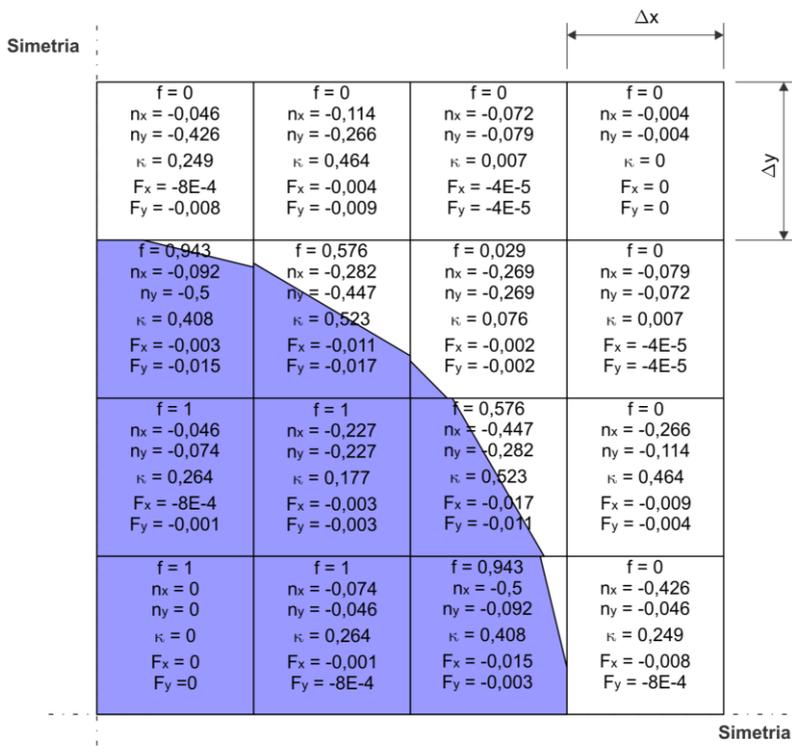
Um exemplo da forma como esse modelo atua é ilustrado na Figura 4<sup>6</sup>. Nessa figura é mostrado um domínio discretizado ocupado por dois fluidos. Um desses fluidos (fluido 1) ocupa uma região compreendida por um quarto de circunferência (região escura), cuja interface está aproximada por segmentos de reta<sup>7</sup>. Os valores ilustrados nessa figura correspondem à fração volumétrica do fluido 1 ( $f$ ), à componente do vetor normal à interface na direção horizontal ( $n_x$ , em  $m^{-1}$ ), à componente do vetor normal na direção vertical ( $n_y$ , em  $m^{-1}$ ), à curvatura da interface ( $\kappa$ , em  $m^{-1}$ ), às componentes da força devido à tensão interfacial na direção horizontal ( $F_x$ , em  $N/m^3$ ) e na direção vertical ( $F_y$ , em  $N/m^3$ ). Esses valores foram obtidos empregando-se as

---

<sup>6</sup> Os valores das componentes do vetor normal à interface nessa figura foram obtidos por meio da aproximação por diferenças finitas do gradiente da fração volumétrica empregando um estêncil com 3 x 3 volumes. Já os valores da curvatura foram obtidos utilizando a aproximação por diferenças finitas proposta por Brackbill e colaboradores (1992).

<sup>7</sup> Essa aproximação foi utilizada para fins meramente ilustrativos, lembrando que uma interface reta possui curvatura nula.

equações (44) e (40) do artigo de Brackbill e colaboradores (1992) para o cálculo das componentes do vetor normal à interface e da curvatura, respectivamente. Considerou-se, neste exemplo, que  $\Delta x = \Delta y = 1 \text{ m}$  e  $\sigma = 0,073 \text{ N/m}$ . E, apesar de a figura sugerir o contrário, as componentes da força são avaliadas no centro das faces e não no centro dos volumes.



**Figura 4.** Valores de alguns parâmetros da interface para um domínio com dois fluidos.

Para o problema ilustrado na Figura 4, sabe-se que as componentes da força resultante que atua em toda a interface são dadas por

$$\begin{aligned} F_x &= -\sigma w \\ F_y &= -\sigma w, \end{aligned} \tag{2.9}$$

onde  $w$  é o comprimento na direção perpendicular ao plano do papel.

Assim, o somatório das forças obtidas com o modelo CSF em cada volume de controle deve ser igual à força resultante, cujas componentes são expressas pela equação (2.9). Somando-se todos os valores de  $F_x$  e todos os valores de  $F_y$  ilustrados na Figura 4 e multiplicando-os pelo volume do volume de controle ( $\Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot w$ ), obtêm-se  $F_x = -0,074 \text{ N}$  e  $F_y = -0,074 \text{ N}$ . Neste cálculo foi considerado que  $w$  valia 1 m. Esses valores são aproximadamente iguais aos obtidos a partir da equação (2.9).

A partir dos resultados para o exemplo apresentado aqui, verifica-se que o modelo CSF considera que a força devido à tensão interfacial não atua apenas nos volumes que apresentam valores da fração volumétrica maiores do que zero e menores do que um – valores que caracterizam a presença da interface. Por este modelo, os efeitos dessa força são distribuídos por uma região que cerca a interface, conforme mencionado anteriormente.

Por tratar os efeitos da tensão interfacial de forma explícita<sup>8</sup>, o modelo CSF apresenta uma restrição ao passo de tempo de forma a garantir a estabilidade do modelo. Essa condição de estabilidade é expressa por

$$\Delta t < \left[ \frac{\bar{\rho}(\Delta x)^3}{2\pi\sigma} \right]^{\frac{1}{2}}, \tag{2.10}$$

onde  $\Delta x$  é o menor valor de alguma das dimensões do volume de controle e  $\bar{\rho}$  é a média aritmética das massas específicas dos dois fluidos (BRACKBILL; KOTHE; ZEMACH, 1992; KOTHE et al., 1996).

Ao empregar o modelo CSF para inserir os efeitos da tensão interfacial nas equações de conservação da quantidade de movimento

---

<sup>8</sup> A força de corpo que representa a contribuição da tensão interfacial só é atualizada após a solução do escoamento. Então, para o novo valor da força, novos valores das variáveis do escoamento são calculados. Este procedimento iterativo é realizado até a convergência.

deve-se definir como serão calculados o vetor normal à interface ( $\mathbf{n}$ ), a curvatura da interface ( $\kappa$ ) e o delta de Dirac discreto ( $\delta_s$ ).

### 2.2.1. Delta de Dirac

Essa distribuição tem por finalidade restringir a atuação de  $\mathbf{F}_{sv}$  aos volumes da região da interface.

Normalmente, considera-se que  $\delta_s = |\nabla f|$ . Williams, Kothe e Puckett (1998) estudaram três aproximações diferentes para o delta de Dirac: na primeira aproximaram a variável por uma função degrau; na segunda, fizeram  $\delta_s = 4\tilde{f}(1 - \tilde{f})$  e, por fim, calcularam o delta de Dirac a partir do gradiente do campo de fração volumétrica convoluído<sup>9</sup> ( $\delta_s = |\nabla \tilde{f}|$ ). Esta última aproximação foi empregada também por Brackbill, Kothe e Zemach (1992).

Nesta tese empregou-se um delta de Dirac igual a  $|\nabla f|$ , sendo devotada maior atenção ao estudo de diferentes aproximações para a curvatura da interface.

### 2.2.2. Vetor normal à interface

Aproximações para o vetor normal à interface foram exploradas por alguns autores utilizando a definição de que esse vetor é igual ao gradiente da fração volumétrica. Os métodos citados nesta seção referem-se ao vetor que dá origem ao vetor unitário que multiplica o termo  $\sigma\kappa\delta_s$  em (2.8).

Williams, Kothe e Puckett (1998), por exemplo, fazem uso de uma das propriedades da convolução, segundo a qual as derivadas de  $\tilde{f} = \mathbf{K} * f$  (onde  $*$  indica a operação de convolução e  $\mathbf{K}$  é o núcleo, ou *kernel*) podem ser determinadas ao se efetuar a convolução de  $f$  com as derivadas do núcleo  $\mathbf{K}$ . Assim, o vetor normal à interface é calculado a partir da convolução do campo de fração volumétrica. Essa mesma aproximação também é empregada por Lafaurie e colaboradores (1994).

No artigo em que Brackbill e colaboradores (1992) apresentam o método CSF, o vetor normal à interface é calculado como sendo o gradiente de um campo  $\tilde{c}(\mathbf{x})$ , definido como sendo igual ao campo de massa específica. Esse gradiente então é aproximado por diferenças

---

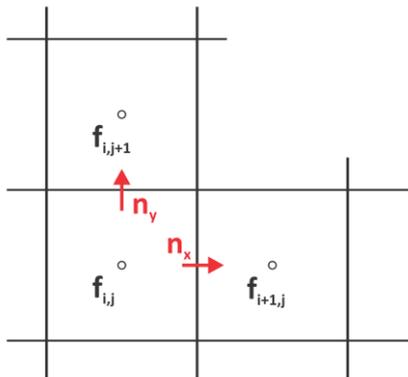
<sup>9</sup> A operação de convolução será apresentada adiante.

finitas. Tal aproximação também é utilizada por Kothe e Mjolsness (1992), Cummins, Francois e Kothe (2005), Francois et al. (2006), Hernández et al. (2008) e López et al. (2009).

Malik, Fan e Bussmann (2007), por sua vez, empregam uma aproximação baseada em funções altura (*Height Functions*, HF)<sup>10</sup>, sendo as componentes do vetor normal à interface expressas para uma malha uniforme por  $n_x = (h_{i+1} - h_i) / \Delta x$  e  $n_y = -1$ . Na primeira expressão,  $h_i$  corresponde ao valor da função altura na coluna  $i$  de um estêncil.

Assim como para o delta de Dirac, nesta tese não foi realizado um estudo de diferentes formas de se avaliar o vetor normal à interface, sendo adotada para esse parâmetro a aproximação por diferenças finitas do campo original de fração volumétrica.

Aqui cabe observar que, por ter sido o escoamento resolvido empregando-se um arranjo desencontrado das variáveis, para o cálculo da componente da força devido à tensão interfacial na direção  $x$ , avaliou-se a componente horizontal do vetor  $\mathbf{n}$  nas faces laterais dos volumes de controle para a pressão: ou seja, para uma malha uniformemente espaçada,  $n_x = (f_{i+1,j} - f_{i,j}) / \Delta x$ . Analogamente, para a componente  $y$ , tem-se que  $n_y = (f_{i,j+1} - f_{i,j}) / \Delta y$ . Essas componentes do vetor normal à interface estão ilustradas na Figura 5.



**Figura 5.** Componentes do vetor normal à interface.

<sup>10</sup> O método HF será apresentado no próximo item.

### 2.2.3. Curvatura da interface

A maioria dos trabalhos na área de modelagem numérica da tensão interfacial foca em um estudo mais detalhado das aproximações para a curvatura da interface, do que em métodos de avaliação dos dois parâmetros citados nos itens anteriores. Esta tese também segue essa tendência e comparará alguns métodos de determinação da curvatura da interface.

Como foi mostrado no trabalho de Brackbill, Kothe e Zemach (1992), a curvatura da interface é expressa por

$$\kappa = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (2.11)$$

lembrando que  $\hat{\mathbf{n}}$  representa o vetor unitário normal à interface.

Portanto, uma boa estimativa da curvatura depende de uma aproximação satisfatória para  $\hat{\mathbf{n}}$ .

Alguns métodos de estimativa de  $\hat{\mathbf{n}}$  são estudados por Kothe et al. (1996), visando tanto à reconstrução da interface pelo método VOF, que será apresentado no próximo capítulo, quanto ao cálculo da curvatura dessa interface. Dentre os métodos analisados por eles pode-se citar o método dos mínimos quadrados, método de minimização de gradiente e uma aproximação por diferenças finitas. Detalhes sobre tais aproximações podem ser encontrados no trabalho de Kothe et al. (1996) e também em Puckett et al. (1997) e em Pilliod e Puckett (2004).

Um método interessante para a avaliação da curvatura é apresentado por Ginzburg e Wittum (2001). Esses pesquisadores aproximaram a interface por uma *spline* cúbica, possibilitando o cálculo da curvatura e, conseqüentemente, a força devida à tensão interfacial a partir da função *spline*. Porém, trata-se de um método bastante trabalhoso, cuja implementação computacional é complicada por envolver a construção de algumas *splines*, além de ser oneroso computacionalmente.

A seguir são apresentados três métodos de cálculo da curvatura da interface. O primeiro método foi proposto por Brackbill, Kothe e Zemach (1992), após verificarem que uma simples aproximação por diferenças finitas da equação (2.11) fornecia resultados inadequados, que se deterioravam com o refino da malha. Eles então propuseram que a curvatura fosse estimada pela técnica da convolução, a qual resultava num melhor tratamento da curvatura do que uma aproximação por diferenças finitas. O método das funções altura (*Height Functions* - HF) é o segundo método detalhado a seguir, juntamente com uma variante sua: o método HF com filtro por convolução (HF-fc).

### Técnica da Convolução

A técnica da convolução foi abordada por Brackbill, Kothe e Zemach (1992), já que os mesmos constataram que a solução por diferenças finitas se deteriorava com o refino da malha devido à transição abrupta nos valores da fração volumétrica na interface.

A convolução do campo de fração volumétrica é realizada visando à suavização desse campo na região em torno da interface. Trata-se de uma espécie de operação para difundir a interface.

A técnica da convolução consiste em aplicar uma operação de convolução entre o campo de fração volumétrica original e um núcleo de convolução suave (*kernel*), obtendo um campo suavizado de fração volumétrica ( $\tilde{f}$ ). Essa operação é expressa por

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{K} * f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_k} f(\mathbf{x}') \mathbf{K}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}', \quad (2.12)$$

onde  $\mathbf{K}$  é o núcleo e  $\Omega_k$  denota os pontos  $\mathbf{x}$  para os quais  $\mathbf{K}(\mathbf{x}) \neq 0$ . Numericamente, essa integral pode ser estimada empregando-se a seguinte aproximação:

$$\tilde{f}(x,y) = \sum_i \mathbf{K}(\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}) \cdot f(\mathbf{x}'_i) \Delta \mathbf{x}'_i, \quad (2.13)$$

onde  $\mathbf{x}'_i = (x'_i, y'_i)$  corresponde às coordenadas do centro do volume de controle que pertencem a  $\Omega_k$ .

A escolha do núcleo de convolução deve considerar algumas propriedades que tal núcleo deve possuir e que são listadas por Williams, Kothe e Puckett (1998).

Uma propriedade da operação de convolução bastante útil e que já foi mencionada anteriormente neste texto é a de que as derivadas de  $\tilde{f} = \mathbf{K} * f$  podem ser determinadas ao se realizar a convolução do campo original  $f$  com as derivadas do núcleo:

$$\frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial (\mathbf{K} * f)}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}) = \left( \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \mathbf{x}} * f \right)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_k} f(\mathbf{x}') \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}'. \quad (2.14)$$

Esta propriedade é importante porque permite que sejam calculadas as componentes do vetor unitário normal à interface ( $\hat{\mathbf{n}}$ ) a partir da convolução do campo de fração com as derivadas do núcleo.

Por sua vez, a curvatura da interface poderia ser obtida da convolução de  $f$  com as derivadas segundas do núcleo. Porém, em seu

trabalho, Williams, Kothe e Puckett (1998) desaconselham essa forma de cálculo da curvatura, pois o erro associado à discretização dessa convolução pode ser uma ordem de magnitude maior do que o erro associado à discretização da convolução de  $f$  com as derivadas primeiras de  $\mathbf{K}$ . Assim, eles recomendam que a curvatura provenha de uma aproximação por diferenças finitas para o divergente de  $\hat{\mathbf{n}}$ , sob a forma:

$$\kappa_{i,j} = - \left[ \left( \frac{\hat{n}_{x_{i+1,j}} - \hat{n}_{x_{i-1,j}}}{2\Delta x} \right) + \left( \frac{\hat{n}_{y_{i,j+1}} - \hat{n}_{y_{i,j-1}}}{2\Delta y} \right) \right], \quad (2.15)$$

onde  $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{n}/|\mathbf{n}|$ . Já as componentes do vetor normal são dadas por

$$n_x = \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x} \text{ e } n_y = \frac{\partial \tilde{f}}{\partial y}. \quad (2.16)$$

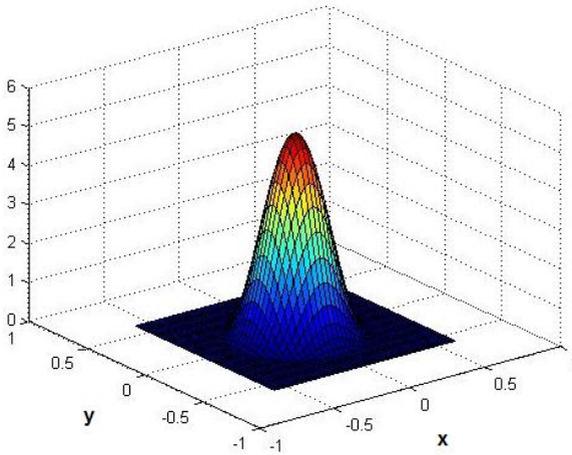
Nos testes realizados para a avaliação dos diferentes métodos de determinação da curvatura e que serão apresentados no quarto capítulo, utilizou-se um núcleo de sexta ordem ( $\mathbf{K}_6$ ) igual ao empregado por Francois et al. (2006):

$$\mathbf{K}_6(r,d) = \begin{cases} A \left[ 1 - \left( \frac{r}{d} \right)^2 \right]^3, & \text{se } r < d \\ 0, & \text{se } r \geq d \end{cases}, \quad (2.17)$$

onde  $r = \sqrt{(x_k - x_{i,j})^2 + (y_k - y_{i,j})^2}$ ,  $(x_k, y_k)$  são as coordenadas do centro dos volumes pertencentes a  $\Omega_k$ ,  $(x_{i,j}, y_{i,j})$  são as coordenadas do centro do volume de controle onde  $\tilde{f}$  é avaliada e  $d$  é o raio de atuação do núcleo de convolução (eventualmente denominado nesta tese de “comprimento de convolução”). A constante  $A$  é determinada de forma a normalizar o núcleo de convolução:

$$\sum_i A \left[ 1 - \left( \frac{r_i}{d} \right)^2 \right]^3 \cdot \Delta \mathbf{x}_i = 1. \quad (2.18)$$

A Figura 6 ilustra o núcleo de sexta ordem para um comprimento de convolução  $d = 1,9\sqrt{\Delta x}$ , com  $\Delta x = 0,05$  m.



**Figura 6.** Comportamento do núcleo de sexta ordem utilizado na operação de convolução.

A técnica da convolução é muito utilizada na determinação da curvatura, porém, como alertam alguns autores, esse método deve ser empregado com cautela. Isto porque uma suavização<sup>11</sup> exagerada de  $f$  pode criar um campo de atuação da tensão interfacial muito maior do que o real, causando erros na pressão induzida por essa tensão e podendo propagar ondas capilares de alta frequência. Enquanto que, uma menor suavização do campo de fração, segundo Kothe et al. (1996), gera ruídos no campo de curvatura.

#### Método das Funções Altura (*Height Functions* - HF)

O método HF para avaliar a curvatura, ao contrário da técnica de convolução, é um método “localizado”, ou seja, ele não difunde a interface<sup>12</sup>, mas sim a aproxima por uma função altura  $\gamma=h(x)$  (SUSSMAN; OHTA, 2006).

<sup>11</sup> A suavização é dada pelo tipo do núcleo e o tamanho do seu raio de atuação (comprimento da convolução).

<sup>12</sup> Ou seja, que não espalha a interface por uma região, como ocorre quando da aplicação da convolução.

Seja a função  $g(x,y) = y - h(x)$ , então o vetor normal a essa função é expresso por

$$\mathbf{n} = \nabla g = \left( -\frac{\partial h}{\partial x}, 1 \right). \quad (2.19)$$

Logo, o vetor normal unitário é dado por

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla g}{|\nabla g|} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2}} \left( -\frac{\partial h}{\partial x}, 1 \right). \quad (2.20)$$

Conforme mencionado anteriormente, a curvatura da interface é igual a  $-\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$  e, portanto,

$$\kappa = -\frac{\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}}{\left[ 1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 \right]^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.21)$$

Logo, conhecendo-se a função  $h(x)$  (denominada de função altura – *height function*) e suas derivadas em relação a  $x$ , pode-se determinar o valor da curvatura.

Numericamente, pode-se definir uma função altura a partir do campo de fração volumétrica. Para tanto, deve-se determinar sua direção dominante, ou seja, a direção de maior variação da fração volumétrica.

Para um problema bidimensional, a direção dominante pode ser determinada considerando-se um estêncil de  $3 \times 3$  volumes em torno do volume  $(i,j)$  para o qual se deseja calcular a curvatura da interface<sup>13</sup>. A direção dominante será obtida por meio da comparação entre a variação da fração volumétrica nas colunas e nas linhas adjacentes ao volume  $(i,j)$ :

$$\text{Se } \left| \sum_{k=i-1}^{i+1} (f_{k,j-1} - f_{k,j+1}) \right| > \left| \sum_{k=j-1}^{j+1} (f_{i-1,k} - f_{i+1,k}) \right| \Rightarrow |n_y| > |n_x| \quad (2.22)$$

---

<sup>13</sup> Lembrando que só há sentido em se calcular a força devido à tensão superficial em um volume se pelo menos uma das componentes do vetor normal à interface nesse volume for diferente de zero.

Caso contrário,  $|n_x| > |n_y|$ .

Determinada a direção dominante, seleciona-se então o estêncil adequado para o cálculo da curvatura: se a direção dominante for a direção x, deve-se empregar um estêncil de 7 x 3 volumes em torno do volume em que se deseja avaliar a curvatura; caso contrário, seleciona-se um estêncil de 3 x 7 volumes. Esse estêncil será denominado  $\kappa$ -estêncil.

Tome-se como exemplo o campo de fração volumétrica ilustrado na Figura 7. Deseja-se calcular a curvatura do volume com  $f_{i,j} = 0,7283$ . Pelas condições expressas na equação (2.22), tem-se que  $|n_y| > |n_x|$  e, portanto, deve-se selecionar um estêncil de 3 x 7 volumes, conforme mostrado na figura.

A função altura é definida como sendo a soma das alturas ocupadas pelo fluido 1 (fluido em tom de cinza na Figura 7):

$$H_i = \sum_{k=j-3}^{j+3} f_{i,k} \cdot \Delta y_{i,k}, \text{ se } |n_y| > |n_x|;$$

$$H_j = \sum_{k=i-3}^{i+3} f_{k,j} \cdot \Delta x_{k,j}, \text{ se } |n_x| > |n_y|.$$
(2.23)

Como a função altura possui apenas um valor para cada valor da coordenada x (no caso de  $|n_y| > |n_x|$ ), deve-se garantir que o  $\kappa$ -estêncil compreenda uma única interface. Para tanto, deve ser assegurada a monotonicidade do campo de fração volumétrica no interior desse estêncil.

López et al. (2009) e Hernández et al. (2008) sugerem que a seguinte correção seja realizada para preservar a monotonicidade do campo de fração volumétrica (supondo que  $|n_y| > |n_x|$ ), substituindo o campo original<sup>14</sup> por um campo  $f^*$ :

$$\text{Se } \mathbf{sinal}(n_y) \cdot (f_{i+r,j+s} - f_{i+r,j+s+1}) > 0, \text{ para } s = -1, \dots, -3$$

$$\text{ou se } \mathbf{sinal}(n_y) \cdot (f_{i+r,j+s} - f_{i+r,j+s-1}) < 0, \text{ para } s = 1, \dots, 3$$
(2.24)

---

<sup>14</sup> Essa mudança no campo de fração volumétrica é momentânea e deve ser feita apenas para o cálculo da curvatura.



$$H_i = \sum_{k=j-t_{low}}^{j+t_{up}} f_{i,k} \cdot \Delta y_{i,k}, \text{ para } |n_y| > |n_x|, \quad (2.25)$$

onde  $0 \leq t_{up} \leq 3$  e  $0 \leq t_{low} \leq 3$  representam os limites do estêncil adaptado, os quais resultam da satisfação das seguintes condições:

$$\text{ sinal}(n_y) \cdot (\alpha_{k+t_{up}} - \alpha_{k+t_{up}-1}) > 0, \alpha_{k+t_{up}} \neq 0 \text{ e } \alpha_{k+t_{up}} \neq 3, \quad (2.26)$$

$$\text{ sinal}(n_y) \cdot (\alpha_{k-t_{low}} - \alpha_{k-t_{low}+1}) < 0, \alpha_{k-t_{low}} \neq 0 \text{ e } \alpha_{k-t_{low}} \neq 3. \quad (2.27)$$

Nas equações (2.26) e (2.27),  $\alpha_k = \sum_{r=-1}^1 f_{i+r,k}^*$ , com  $k = j-3, j-2, \dots, j+2, j+3$ .

Logo, para o caso ilustrado na Figura 7, tem-se que  $t_{up} = 1$  e  $t_{low} = 1$ , reduzindo o estêncil a um com  $3 \times 3$  volumes. Para esse novo estêncil, as funções altura adquirem os seguintes valores:  $H_{i-1} = 0,07686$ ,  $H_i = 0,17511$  e  $H_{i+1} = 0,26081$ . E a curvatura da interface no volume  $(i,j)$  pode ser obtida a partir dos valores das funções altura, da seguinte forma:

$$\kappa_{i,j} = -\frac{H_{xx}}{[1 + H_x^2]^{\frac{3}{2}}}, \text{ para } |n_y| > |n_x|, \quad (2.28)$$

onde os subscritos nas funções altura indicam derivada em relação a  $x$ . As equações (2.21) e (2.28) possuem sinais contrários devido à convenção adotada, segundo a qual o vetor normal à interface aponta para o fluido 1 e uma interface côncava no fluido 1 possui curvatura negativa.

As derivadas presentes na equação (2.28) podem ser calculadas utilizando-se uma aproximação por diferenças finitas. Desta forma, para uma malha uniforme:

$$H_x = \frac{H_{i+1} - H_{i-1}}{2\Delta x}, \quad (2.29)$$

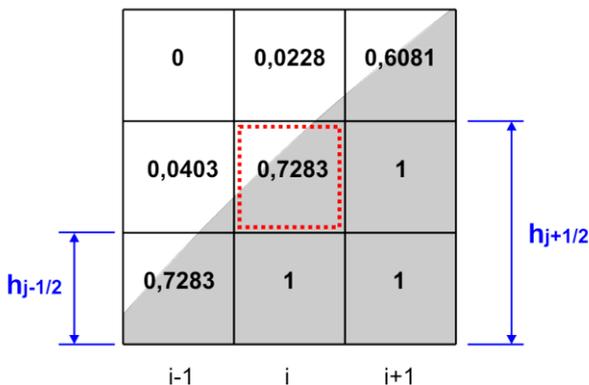
$$H_{xx} = \frac{H_{j+1} - 2H_i + H_{i-1}}{(\Delta x)^2}. \quad (2.30)$$

Retornando ao problema mostrado na Figura 7, tem-se que  $\kappa_{i,j} = 0,5004 \text{ m}^{-1}$ , sendo o valor exato da curvatura para esse caso igual a  $0,5 \text{ m}^{-1}$ .

Segundo Cummins e colaboradores (2005), a equação (2.28) só pode ser empregada no cálculo da curvatura se

$$h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}, \text{ para } |n_y| > |n_x|, \quad (2.31)$$

onde  $h_{j-1/2}$  e  $h_{j+1/2}$  correspondem, respectivamente, às distâncias das faces inferior e superior do volume (i,j) do início do estêncil no sentido decrescente da fração volumétrica, conforme ilustrado na Figura 8.



**Figura 8.** Limites do volume (i,j).

Quando a condição (2.31) não é satisfeita,  $\kappa_{i,j}$  deve assumir o mesmo valor da curvatura do volume mais próximo (com mesmo índice i, para o caso de  $|n_y| > |n_x|$  ou mesmo índice j, para o caso de  $|n_x| > |n_y|$ ), para o qual a condição é satisfeita.

Esta hipótese de mesma curvatura para volumes que não satisfaçam a condição (2.31) resulta em uma anisotropia da curvatura<sup>15</sup>,

<sup>15</sup> Não foram encontradas publicações que relatem este problema.

a qual favorecerá a propagação de correntes espúrias, como poderá ser visto nos resultados apresentados no quarto capítulo.

Uma importante desvantagem do método HF quando comparado à técnica da convolução é o crescente erro na avaliação da curvatura com a redução da resolução da malha e/ou com o aumento da curvatura da interface. Cummins, Francois e Kothe (2005) mostraram que o método HF só fornece valores precisos para a curvatura quando a interface é dita bem-resolvida, o que significa um baixo valor do produto entre  $\kappa$  e  $\Delta x$ . Caso contrário, o método gerará uma tensão interfacial numérica, a qual tenderá a suavizar regiões com alta curvatura.

Kothe e colaboradores (1996) afirmam que, para se obter uma interface bem definida, pequenos raios de curvatura da interface devem ser discretizados por ao menos três volumes de controle da malha computacional ( $\kappa \cdot \Delta x \leq 1/3$ ). Já Cummins, Francois e Kothe (2005) recomendam que o produto  $\kappa \cdot \Delta x$  possua valor menor do que 0,2 para assegurar a precisão do método HF.

#### Método HF com filtro por convolução (HF-fc)

Este método é apresentado por Francois et al. (2006) como um método para interpolar o valor da curvatura do centro dos volumes de controle para as suas faces. Nesta tese, ele foi utilizado como um filtro para atenuar os efeitos da anisotropia da curvatura resultante do método HF, como será mostrado no quarto capítulo.

Trata-se de uma combinação entre o método HF e a técnica de convolução: primeiramente são calculados os valores da curvatura empregando-se o método HF e então procede-se à filtragem do campo de curvatura por meio de uma convolução entre ele e um núcleo:

$$\kappa_{i,j} = \frac{\sum_k \mathbf{K}(\mathbf{x}'_k - \mathbf{x}) \cdot \kappa(\mathbf{x}'_k) \cdot \Delta \mathbf{x}'_k}{\sum_k \mathbf{K}(\mathbf{x}'_k - \mathbf{x}) \cdot \Delta \mathbf{x}'_k}, \quad (2.32)$$

para todo ponto  $\mathbf{x}'_k \in \Omega_k$ .

Essa simples filtragem reduz as correntes espúrias, como será visto no quarto capítulo.

Tendo estimado a curvatura da interface, além do vetor normal a ela e o delta de Dirac, determinam-se as componentes da força devida à

tensão interfacial. Suas componentes são não-nulas apenas onde há gradientes de fração volumétrica. Caso contrário, a componente do vetor normal à interface assume valor zero.

Francois et al. (2006) recomendam que as componentes dessa força sejam avaliadas no centro das faces do volume de controle, pois essa aproximação garantiria um balanço exato de forças interfaciais e devido ao gradiente de pressão numa situação estática.

Quando um arranjo desencontrado de variáveis é empregado, como é o caso deste trabalho, avaliar as componentes da força em outra posição que não os centros das faces dos volumes não faria sentido, pois as equações discretizadas da conservação da quantidade de movimento são resolvidas para essa posição:  $u$  e  $v$  são avaliadas nos centros das faces dos volumes de controle para a conservação da massa e, portanto, é necessário que os valores das componentes da força devido à tensão interfacial também estejam disponíveis nessas posições.

Nesta seção foi abordada uma situação em que não há contato entre a interface e uma superfície sólida. Portanto, a modelagem da curvatura aqui apresentada é válida apenas para volumes que não sejam vizinhos a uma parede. Na próxima seção, será abordada essa situação de contato e sua implicação no cálculo da curvatura da interface.

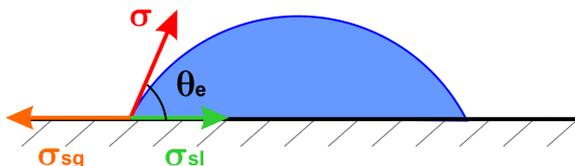
### 2.3. ÂNGULO DE CONTATO ESTÁTICO E DINÂMICO

O ângulo de contato é uma característica de um sistema composto por um líquido, um fluido (gás ou líquido) e uma fronteira sólida e depende das interações entre esses componentes. Em um sistema em equilíbrio termodinâmico, tem-se que a relação entre as energias das interfaces sólido-fluido 1 ( $\sigma_{sg}$ ), sólido-fluido 2 ( $\sigma_{sl}$ ) e fluido 1-fluido 2 ( $\sigma$ ) é descrita pela equação de Young e ilustrada na Figura 9:

$$\sigma_{sg} = \sigma \cos \theta_e + \sigma_{sl} \quad (2.33)$$

Na equação de Young,  $\sigma$  é a tensão interfacial entre os fluidos, ou seja, o mesmo parâmetro considerado na seção sobre os efeitos interfaciais. Já o ângulo  $\theta_e$  corresponde ao ângulo de contato estático, medido conforme indicado na Figura 9, e se manifesta apenas em situações de equilíbrio estático, ou seja, quando não há escoamento. Este parâmetro está relacionado ao conceito de molhabilidade de uma superfície: quando o sólido é molhável ao líquido da gota, este ângulo

possui valor menor do que  $90^\circ$ ; caso contrário, este ângulo adquire valor superior a  $90^\circ$ .



**Figura 9.** Gota em equilíbrio termodinâmico.

Quando há escoamento dos fluidos, a interface é submetida a forças inerciais, viscosas, gravitacional e interfaciais/adesivas e o seu ângulo com a superfície se altera, passando a corresponder ao ângulo de contato dinâmico ( $\theta_d$ ). Muitos modelos na literatura admitem que este ângulo é função do número Capilar, expresso por:

$$Ca = \frac{\mu \cdot U}{\sigma} \quad (2.34)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do líquido e  $U$  é uma velocidade característica.

Uma das questões concernentes ao ângulo de contato é o paradoxo do movimento da interface em uma parede cuja condição de contorno é a de não-eskorregamento: como pode haver deslizamento da interface em tal superfície se há a prescrição de uma condição de não-deslizamento nela?

Conforme explicado por Hirt (1999) e Hirt e Brethour (2001), este paradoxo ocorre quando o escoamento é analisado sob a ótica da teoria do contínuo. Na verdade, as interações das moléculas dos fluidos com a superfície sólida são as responsáveis pelo movimento da linha de contato (linha representada pela interseção da interface com a superfície sólida). E essas interações ocorrem ao longo de uma distância da parede da ordem de nanômetros e, portanto, não podem ser contempladas numa simulação baseada na teoria do contínuo. Esse paradoxo deixa de existir, por exemplo, quando se considera mecanismos de deslizamento como os regidos pela formação de um filme precursor ou por rolamento (DE GENNES, 1985).

Um artifício para o tratamento deste paradoxo nas simulações regidas pelas equações de Navier-Stokes é o emprego de um comprimento de *escorregamento* (*slip length*), que relaxa a condição de não-deslizamento até uma determinada distância (AFKHAMI; ZALESKI; BUSSMANN, 2009; YOKOI et al., 2009). Outros pesquisadores aplicam uma condição de escorregamento a uma região envolvendo a linha de contato em simulações utilizando o método dos Elementos Finitos, quando um nó da malha é situado sobre a linha de contato (HIRT, 1999).

Em simulações envolvendo o método VOF<sup>16</sup>, são comumente empregadas as componentes da velocidade avaliadas nas faces do volume de controle para a equação da conservação da massa para advectar a fração volumétrica do fluido. Essa estratégia impõe por si só um comprimento de escorregamento implícito ao problema da advecção da linha de contato. Tal comprimento é sensível ao tamanho da malha e vale  $\Delta y / 2$  (supondo uma parede horizontal).

O ângulo de contato estático é uma propriedade do sistema sólido-fluidos. Porém, esse ângulo só é atingido por um líquido puro (que não contém solutos) em condição de equilíbrio em uma superfície ideal (completamente livre de contaminantes e que não apresenta rugosidades). Na prática, observa-se que o valor do ângulo estático varia entre a faixa  $\theta_{r,cr} \leq \theta \leq \theta_{a,cr}$ , onde  $\theta_{r,cr}$  e  $\theta_{a,cr}$  correspondem aos ângulos de contato estáticos críticos na retração/recuo (*receding angle*) e no avanço (*advancing angle*) da gota, respectivamente. Acima do ângulo de contato crítico de avanço (ou abaixo do ângulo crítico de recuo), a linha de contato se move. Essa variação caracteriza o fenômeno da **histerese do ângulo de contato**, o qual é devido (WOLF, 2006):

- Às rugosidades da superfície: responsáveis pelo efeito de *pinning* (aprisionamento da linha de contato nas rugosidades), que resulta no comportamento *stick-slip* do deslocamento da linha de contato. Esse comportamento é caracterizado por uma sucessão de estados de equilíbrio meta-estável, quando a linha de contato desliza (*slip*) de uma posição de equilíbrio a outra, onde permanece brevemente em repouso (*stick*) até ser novamente perturbada;

---

<sup>16</sup> O método *Volume-of-fluid* (VOF) será apresentado no próximo capítulo.

- Aos contaminantes químicos presentes no sólido, que alteram a molhabilidade em diferentes regiões da superfície (GARDESCU, 1930);
- À adsorção de moléculas do líquido na superfície: esse fenômeno cria uma nova resistência ao movimento, dissipando energia do escoamento, afetando o ângulo de contato;
- À presença de solutos no líquido, cujo gradiente de concentração pode provocar a variação da tensão interfacial (efeito Marangoni);
- Ao histórico da superfície por onde o líquido desliza: a inclinação da superfície bem como os processos pelos quais ela passou influenciam nos valores críticos dos ângulos (YADAV et al., 2008; BOUKELLAL et al., 2009).

Conforme De Gennes (1985), a diferença  $\theta_{a,cr} - \theta_{r,cr}$  pode ser superior a  $10^\circ$  caso a superfície não seja devidamente limpa<sup>17</sup>. Esses ângulos podem ser medidos experimentalmente por meio do deslizamento de uma gota em uma superfície inclinada ou pela injeção/sucção de fluido em uma gota em uma superfície horizontal (EBATCO, 2012).

Após serem superados os efeitos adesivos da interface com o sólido, o líquido escoar e agora os ângulos assumidos pela interface não correspondem mais ao ângulo estático, mas sim aos ângulos de contato dinâmicos. Durante essa dinâmica, há duas situações possíveis: a de avanço da interface, que passa a molhar a superfície à jusante e é caracterizada por um ângulo de avanço ( $\theta_{a,d}$ ); e a de recuo da interface, que se desloca em direção à superfície já molhada e é caracterizada por um ângulo de recuo ( $\theta_{r,d}$ ).

Dependendo do método numérico utilizado na solução do escoamento, o ângulo de contato pode ser um resultado obtido naturalmente ao longo da simulação (WOLF, 2006). Quando isso não ocorre, deve-se aplicar algum modelo que seja capaz de estimar esse ângulo a partir de dados do escoamento. Como nesta tese foi utilizado o método dos volumes finitos associado ao método VOF, a adoção de tais modelos é imprescindível.

---

<sup>17</sup> Gardescu (1930) menciona uma diferença de até  $50^\circ$ .

Hoffman (1975) estudou o avanço da interface em um escoamento forçado de silicone ao longo de um capilar para diferentes valores do número Capilar. O aparato experimental empregado permitiu que a força gravitacional fosse desprezada e que as forças inerciais permanecessem a um nível desprezível, resultando em uma velocidade constante de avanço da interface. Para  $Ca$  tendendo a zero, Hoffman constatou que o ângulo de contato dinâmico de avanço está relacionado ao número Capilar por meio da seguinte expressão:

$$Ca = C \cdot \theta_{a,d}^m, \quad (2.35)$$

onde  $C$  é uma constante e  $m = 3 \pm 0,5$ .

Para valores do número Capilar entre  $10^{-5}$  e  $10^2$ , Hoffman mostrou que há uma relação entre o ângulo de contato dinâmico e o termo  $Ca + F(\theta_e)$ , onde  $F(\theta_e)$  é um *fator de translação*. Entretanto, em seu trabalho não é apresentada uma expressão para o cálculo desse fator.

Com a finalidade de estabelecer uma correlação entre  $\theta_{a,d}$  e  $Ca$ , Jiang, Oh e Slattery (1979) ajustaram uma curva aos dados obtidos pelos experimentos de Hoffman, obtendo a seguinte equação:

$$\frac{\cos \theta_e - \cos \theta_{a,d}}{\cos \theta_e + 1} = \text{tgh}(4,96 Ca^{0,702}). \quad (2.36)$$

Eles ainda compararam os resultados obtidos com essa equação aos reportados por outros pesquisadores em experimentos com diferentes geometrias e constataram que essa equação é válida para qualquer geometria desde que os efeitos gravitacionais, inerciais e de adsorção sejam desprezíveis. Concluíram também que o ângulo de contato dinâmico depende apenas de propriedades dos fluidos e da superfície envolvidos, além de depender da velocidade de deslocamento da linha de contato.

Segundo Seebergh e Berg (1992), a correlação obtida por Jiang e colaboradores não foi capaz de reproduzir os resultados experimentais obtidos por eles. Então esses pesquisadores propuseram uma nova correlação válida, ajustada aos seus resultados e aos resultados obtidos por Hoffman:

$$\frac{\cos \theta_e - \cos \theta_{a,d}}{\cos \theta_e + 1} = 2,24 Ca^{0,54}. \quad (2.37)$$

Em seu trabalho, Seebergh e Berg (1992) também conseguiram reproduzir o efeito *stick-slip*, introduzindo uma rugosidade artificial à superfície sólida e deslocando-a a baixas velocidades. Esse efeito se manifestou sob a forma de uma nuvem dispersa de pontos no gráfico  $\ln\left[\frac{\cos\theta_e - \cos\theta_{a,d}}{\cos\theta_e + 1}\right]$  versus  $\ln(Ca)$ . Com este resultado, eles afirmaram que o comportamento de  $\theta_{a,d}$  em função do número Capilar é imprevisível.

Vale ressaltar que tanto a correlação de Seebergh e Berg, quanto a de Jiang são válidas apenas para o avanço da interface e não para a sua retração.

Van Mourik, Veldman e Dreyer (2005) e Van Mourik (2002) aplicaram os modelos de Jiang e de Seebergh no estudo da evolução do ângulo de contato no escoamento em um capilar submetido a uma experiência de microgravidade, onde as forças capilares predominam. Aos resultados obtidos com esses modelos, foram comparados os obtidos com um terceiro modelo experimental (elaborado por Bracke [1989 apud VAN MOURIK; VELDMAN; DREYER, 2005]). Também comparou-se os resultados aos obtidos com um modelo teórico elaborado por Blake ([1993 apud VAN MOURIK; VELDMAN; DREYER, 2005]). Este último modelo, denominado de modelo de Blake, é baseado na cinética molecular e relaciona a velocidade da linha de contato com o cosseno do ângulo de contato dinâmico por meio da seguinte expressão:

$$U = A \cdot \sinh\left[B(\cos\theta_e - \cos\theta_{a,d})\right], \quad (2.38)$$

onde as constantes  $A$  e  $B$  são compostas por parâmetros moleculares do sistema de fluidos e sólido, que devem ser determinados para cada sistema; e  $U$  corresponde à velocidade da interface. Com essa comparação, os pesquisadores constataram que o modelo de Blake é mais preciso do que os demais modelos. Porém, recomendam que um modelo que descreva a histerese do ângulo de contato deva ser considerado concomitantemente à expressão obtida por Blake para valores altos de  $\theta_e$ . Por fim, eles ainda verificaram que as constantes  $A$  e  $B$  devem ser estimadas corretamente para um melhor desempenho do modelo.

Em geral, os modelos publicados na literatura descrevem o ângulo de contato dinâmico (tanto o de avanço, quanto o de recuo) como uma função do número Capilar, apresentando valores desse número

adimensional para os quais o comportamento de  $\theta_d$  se altera e também faixas de valores do número Capilar para as quais o modelo proposto é válido. Para valores de  $Ca$  inferiores a  $10^{-2}$ , por exemplo, Schäffer e Wong (2000) afirmam que a relação mais empregada para o ângulo de contato de avanço em problemas onde a superfície é molhável ao fluido é expressa por

$$\cos\theta_{a,cr} - \cos\theta_{a,d} = A \cdot Ca^{1/\beta}, \quad (2.39)$$

onde  $A$  é uma constante associada aos fluidos e à superfície e  $\beta$  é o expoente de fixação (*pinning exponent*), que depende das condições da superfície (presença de rugosidades e contaminantes).

Um dos principais trabalhos para a determinação de um modelo para o ângulo de contato dinâmico foi o realizado por Tanner (1979), que deu origem à lei homônima. Tanner estudou o escoamento de gotas de silicone em uma superfície horizontal. Aplicando a teoria da lubrificação, propôs um modelo que descreve o comportamento do ângulo de contato ao longo do tempo em problemas onde as forças viscosas competem com as forças interfaciais. Admitindo que os efeitos inerciais eram desprezíveis, ele concluiu que a velocidade da linha de contato é proporcional ao cubo do ângulo de contato. A Lei de Tanner é reconhecida até hoje como o modelo que rege o comportamento da gota nos estágios finais do espalhamento (WINKELS et al., 2012).

Yokoi et al. (2009) empregam um modelo baseado na lei de Tanner, segundo o qual o ângulo dinâmico de recuo também é uma função do número Capilar, porém, o modelo apresenta alguns parâmetros que são determinados apenas a partir de experimentos de impacto de uma gota contra uma superfície plana. Segundo eles, para o experimento mencionado, o comportamento do ângulo de contato dinâmico é adequadamente descrito por:

$$\theta(Ca) = \begin{cases} \min \left[ \theta_{a,cr} + \left( \frac{Ca}{k_a} \right)^{1/3}, \theta_{mda} \right], & \text{se } U \geq 0 \\ \max \left[ \theta_{r,cr} + \left( \frac{Ca}{k_r} \right)^{1/3}, \theta_{mdr} \right], & \text{se } U < 0 \end{cases}, \quad (2.40)$$

onde os subscritos  $a$  e  $r$  indicam “avanço” e “recuo” e correspondem respectivamente à situação de espalhamento e de retração da gota;  $U$  é a

velocidade da interface;  $k$  é uma constante determinada experimentalmente tanto para a situação de avanço da gota, quanto para a situação de recuo;  $\theta_{mda}$  e  $\theta_{mdr}$  correspondem ao máximo ângulo de contato dinâmico de avanço e ao mínimo ângulo de contato dinâmico de recuo, respectivamente. Todos esses quatro parâmetros ( $k_a$ ,  $k_r$ ,  $\theta_{mda}$  e  $\theta_{mdr}$ ) são obtidos experimentalmente, fato que expõe uma das limitações do modelo: se não for possível realizar um experimento, não é possível simulá-lo numericamente devido à ausência de parâmetros. Outra limitação, bastante clara quando se analisa a equação (2.40), é que o limite de aplicação deste modelo não é dado por um valor do número Capilar, mas sim por valores máximos e mínimos do ângulo de contato obtido experimentalmente.

Outro modelo que faz uso de constantes que devem ser determinadas experimentalmente é o apresentado por Afkhami, Zaleski e Bussmann (2009) em seu trabalho sobre a dependência da solução do escoamento do tamanho da malha. Essa dependência já havia sido discutida por Weinstein e Pismen (2008).

Segundo o modelo de Afkhami, o ângulo de contato ( $\theta_{num}$ ), que é empregado na solução das equações de Navier-Stokes, depende da resolução da malha computacional e da velocidade da interface. Este ângulo está relacionado a outro ângulo, dito aparente ( $\theta_{app}$ ), que, por sua vez, é uma função do número Capilar e do ângulo de contato estático. Trata-se de um modelo bastante complicado de se aplicar e necessita de calibrações para o caso analisado, de forma a se obter o valor de um dos ângulos de contato ( $\theta_{num}$  ou  $\theta_{app}$ ). Além disso, os pesquisadores demonstraram a validade do modelo apenas para escoamentos bifásicos em que os fluidos apresentavam os mesmos valores para a massa específica e para a viscosidade.

Por sua vez, Kim et al. (2002) estudaram experimentalmente o comportamento de uma gota deslizando sobre uma superfície inclinada e propuseram um modelo para descrever essa dinâmica. Em seu modelo, que vale para valores do número Capilar muito menores do que  $10^{-2}$ , supõe-se que a dissipação da energia potencial da gota é devida à adsorção das moléculas do líquido na superfície e ao atrito viscoso. Então, a expressão obtida após o balanço de energia relaciona a velocidade de deslocamento da gota ao ângulo crítico, a partir do qual ela começa a se deslocar, e ao ângulo de contato dinâmico.

A elaboração de um modelo universal que descreva satisfatoriamente os ângulos de contato dinâmicos, contemplando a sua

variação ao longo do tempo, esbarra na falta de total compreensão do mecanismo pelo qual a linha de contato se move sobre uma superfície sólida (SCHÄFFER; WONG, 2000). Outra dificuldade em se estabelecer um modelo universal é a falta de concordância entre os resultados experimentais reportados por diversos autores. Seebergh e Berg (1992) apresentam uma breve revisão de vários experimentos que resultaram em correlações entre o ângulo de contato dinâmico e o número Capilar muito discrepantes entre si. Neste sentido, a principal dificuldade reside em se estabelecer um experimento que não esteja sujeito aos efeitos da rugosidade da superfície e da presença de contaminantes e de solutos nos fluidos, além dos efeitos de outros parâmetros que possam afetar os resultados experimentais.

Um conjunto de teorias sobre os mecanismos que levam ao movimento das linhas de contato é apresentado por De Gennes (1985) e Schäffer e Wong (2000). Entretanto, ainda não há uma teoria robusta, de caráter universal e que agregue os efeitos de todos os fatores mencionados anteriormente.

### **2.3.1. Modelagem da curvatura da interface na linha de contato**

A modelagem do ângulo de contato é necessária, pois ele afeta duas propriedades da interface na linha de contato:

- A curvatura da interface, que impacta no cálculo da força devida à tensão interfacial, conforme discutido anteriormente;
- O vetor normal à interface, o qual também é considerado no cálculo dessa força, mas que também é empregado na etapa de reconstrução da interface no método VOF, como será apresentado no próximo capítulo.

Na literatura sobre a modelagem desses dois parâmetros a partir do ângulo de contato em simulações utilizando o método VOF, são encontrados trabalhos que empregam desde modelos baseados na equação de Young até implementações com Funções Altura.

Em um dos métodos empregados por Renardy, Renardy e Li (2001) para considerar o efeito do ângulo de contato nas simulações, a fração volumétrica é extrapolada para os volumes fantasmas, localizados atrás da superfície sólida. Então força-se que o vetor normal à interface – obtido a partir de uma aproximação por diferenças finitas – honre a inclinação imposta pelo ângulo de contato.

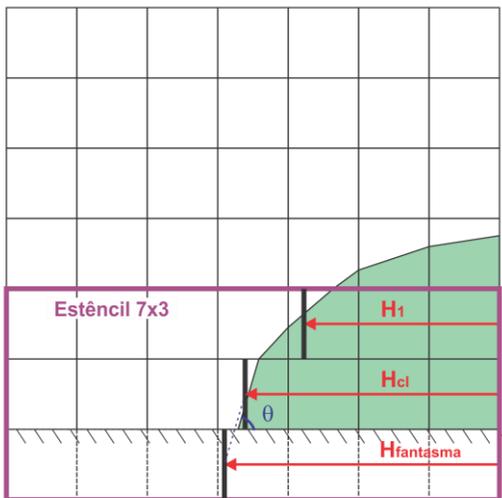
Já no trabalho de Yokoi et al. (2009), a interface é extrapolada por meio de uma equação de transporte para a função *level-set* (uma espécie de curva de nível baseada na magnitude da fração volumétrica). Nesta equação, é considerada uma “velocidade de extensão”, cujo valor depende do ângulo de contato e do vetor normal à parede.

Como demonstrado em alguns trabalhos publicados na última década (VAN MOURIK, 2002; AFKHAMI; BUSSMANN, 2007; VELDMAN et al., 2007; AFKHAMI; BUSSMANN, 2008; AFKHAMI; ZALESKI; BUSSMANN, 2009), o método de Funções Altura (*Height Functions* – HF) pode ser estendido para estimar a curvatura e o vetor normal à interface nos volumes próximos à fronteira sólida. Tendo em vista os resultados da avaliação dos diferentes modelos de curvatura na seção sobre o tratamento numérico deste parâmetro, optou-se por aplicar o método HF também à modelagem dos efeitos do ângulo de contato.

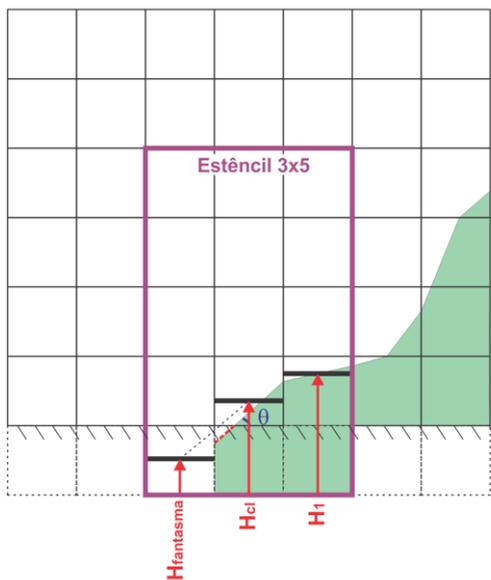
Neste método, o ângulo de contato é considerado na extrapolação da função altura para uma linha/coluna fantasma ( $H_{\text{fantasma}}$ ), vizinha imediata da superfície sólida. Como é feito para o cálculo da curvatura no restante do domínio, a direção do estêncil utilizado no cálculo da função altura é definida pela direção de maior variação da fração volumétrica. Ou seja, caso o ângulo de contato esteja entre  $45^\circ$  e  $135^\circ$ , será definido um estêncil paralelo à parede. Na situação ilustrada na Figura 10 (a), esse estêncil possui  $7 \times 3$  volumes, sendo a sua primeira linha composta por volumes fantasmas. Por outro lado, se o ângulo for menor do que  $45^\circ$  ou maior do que  $135^\circ$ , será selecionado um estêncil perpendicular à parede (para a situação ilustrada na Figura 10 (b), o estêncil possui  $3 \times 5$  volumes). Neste caso, para o cálculo da função altura do volume que contém a linha de contato será necessário extrapolar a interface para o volume fantasma imediatamente vizinho a ele, conforme mostrado nas Figura 10 (b) e Figura 11. Aos demais volumes fantasmas será atribuída fração volumétrica igual a 1 ou 0, dependendo da posição da interface.

Na Figura 10,  $H_{cl}$  é a função altura para o volume contendo a linha de contato (denominado volume<sub>cl</sub>) e  $H_{\text{fantasma}}$  é a função altura para o volume fantasma. No primeiro caso ilustrado nessa figura, a extrapolação de  $H_{cl}$  considerando o ângulo de contato resulta em

$$H_{\text{fantasma}} = H_{cl} + \frac{\Delta y}{\text{tg}\theta}. \quad (2.41)$$



(a)  $45^\circ \leq \theta \leq 135^\circ$ : estêncil paralelo à parede.



(b)  $\theta < 45^\circ$  ou  $\theta > 135^\circ$ : estêncil perpendicular à parede.

**Figura 10.** Estênceis para o cálculo da função altura no volume fantasma ( $H_{fantasma}$ ). A região verde indica o fluido 1.

Já para a segunda situação,

$$H_{\text{fantasma}} = H_{\text{cl}} - \Delta x \cdot \text{tg} \theta. \quad (2.42)$$

É importante destacar um aspecto no cálculo dessa função altura, que poderá impactar negativamente na sua estimativa. Quando um estêncil perpendicular à parede é tomado, duas aproximações são realizadas: a primeira consiste na extrapolação da interface do volume contendo a linha de contato para o volume fantasma (Figura 11) e a segunda é a própria extrapolação de  $H_{\text{cl}}$  para a determinação de  $H_{\text{fantasma}}$ . Ou seja, o erro resultante desta estimativa é maior do que o erro quando um estêncil paralelo à parede é empregado, uma vez que nesse caso apenas  $H_{\text{cl}}$  é extrapolada. Como será apresentado no quinto capítulo, essas duas aproximações para o estêncil perpendicular serão responsáveis pela geração de correntes espúrias de maior intensidade para uma faixa de valores do ângulo de contato. Estes resultados motivaram a proposição de uma modificação no método, apresentada neste trabalho no quinto capítulo.

Após a obtenção de  $H_{\text{fantasma}}$ , as derivadas de primeira e segunda ordens da função altura são calculadas aproximando-as por diferenças finitas. Para a Figura 10 (b), essas derivadas são expressas por:

$$H_x = \frac{H_1 - H_{\text{fantasma}}}{2\Delta x}, \quad (2.43)$$

$$H_{xx} = \frac{H_1 - 2H_{\text{cl}} + H_{\text{fantasma}}}{(\Delta x)^2}. \quad (2.44)$$

Essas derivadas participam, por sua vez, tanto do cálculo do vetor normal à interface quanto da curvatura da interface no volume contendo a linha de contato. Esses parâmetros, para a situação ilustrada na Figura 10 (b), são dados respectivamente por:

$$\mathbf{n} = (H_x, -1) \quad (2.45)$$

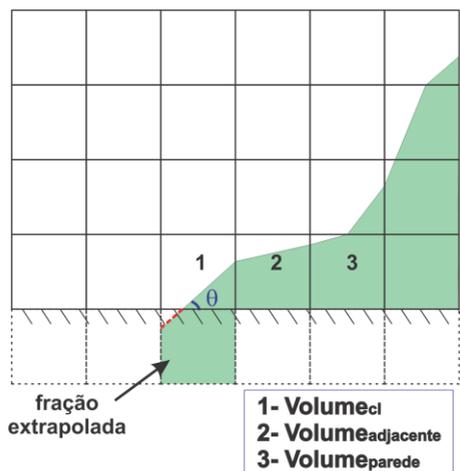
e

$$\kappa = -\frac{H_{xx}}{\left[1 + H_x^2\right]^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.46)$$

O algoritmo desse procedimento é mostrado no Apêndice A.

Como pode ser verificado da descrição apresentada do método, trata-se de uma abordagem bastante simples globalmente para estimar os parâmetros da interface nos volumes que contêm a linha de contato. Entretanto, tal visão é superficial e quando uma análise mais aprofundada do algoritmo é realizada, constata-se que suas dificuldades residem em detalhes do algoritmo, tais como:

- Discriminação entre os volumes que contêm a linha de contato (volumes<sub>cl</sub>) daqueles que contêm apenas a interface, mas que também são vizinhos à parede (Figura 11);
- Entre esses volumes que contêm a interface mas que não contêm a linha de contato, deve-se diferenciar aqueles que são imediatamente vizinhos aos volumes<sub>cl</sub> (volumes<sub>adjacente</sub>) e que são, portanto, afetados diretamente pelo ângulo de contato, daqueles que também contêm a interface mas que são apenas vizinhos à parede e não vizinhos imediatos do volume<sub>cl</sub> (volumes<sub>parede</sub>);
- Extrapolação da interface do volume<sub>cl</sub> para o volume fantasma, necessária quando o estêncil é perpendicular à parede.



**Figura 11.** Classificação dos volumes vizinhos à parede. A cor verde indica o campo de fração volumétrica do fluido 1 e as linhas tracejadas indicam volumes fantasmas abaixo da superfície.

Como mencionado anteriormente, deve-se estender a metodologia do cálculo da curvatura e do vetor normal à interface aos volumes que contêm a interface, são vizinhos à parede e vizinhos imediatos de volume<sub>cl</sub>. Tais volumes são denominados volume<sub>adjacente</sub>.

O procedimento de cálculo das funções altura para o volume<sub>adjacente</sub> é muito semelhante àquele para o volume<sub>cl</sub>, sendo que a única diferença entre eles ocorre quando o estêncil é perpendicular à parede: neste caso, a função altura do volume fantasma não é necessária. O algoritmo desse procedimento é explicado mais detalhadamente no Apêndice A.

Assim como para o volume<sub>cl</sub>, o cálculo de  $H_{cl}$  para o volume<sub>adjacente</sub> também exhibe maiores erros quando um estêncil perpendicular à parede é empregado, devido à extrapolação da interface mencionada anteriormente. A proposição de uma modificação, que será apresentada adiante, do método também visa a atenuar tal problema nos cálculos para o volume<sub>adjacente</sub>.

Por fim, há ainda um terceiro tipo de volume que contém a interface e que é vizinho à parede: o volume<sub>parede</sub>. Este volume é caracterizado por não possuir a linha de contato, nem ser vizinho imediato ao volume<sub>cl</sub> (Figura 11). O algoritmo para o cálculo dos parâmetros da interface para esse volume também é apresentado no Apêndice A.

Ao contrário dos dois volumes anteriores, quando um estêncil perpendicular à parede é utilizado, os erros são menores porque não há as duas extrapolações mencionadas anteriormente. Apenas quando um estêncil paralelo à parede é tomado é que se faz necessário extrapolar a interface.

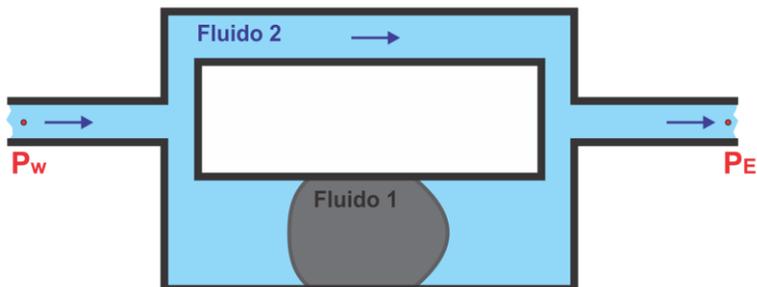
#### 2.4. EFEITO JAMIN

Conforme já mencionado, a curvatura da interface impacta diretamente no cálculo da força devida à tensão interfacial. Na situação abordada na seção anterior, onde há contato entre os fluidos e uma superfície, essa força passa a exercer efeitos adesivos, que se opõem às forças inerciais em um escoamento.

Visando à aplicação dos modelos estudados nesta tese, simulou-se um problema de grande importância na engenharia de reservatórios de petróleo: o efeito Jamin.

Tome-se a situação de um canal interligado a um segundo canal, ambos sujeitos a uma diferença de pressão que provoca o escoamento de um fluido molhante. No segundo canal, há uma gota de um fluido não-

molhante presa às paredes, cujas interfaces se deformam devido à diferença de pressão aplicada. Essa situação é ilustrada esquematicamente na Figura 12.



**Figura 12.** Dois canais interligados: a diferença de pressão que causa o escoamento do fluido 2 provoca a deformação das interfaces da gota do fluido 1, que se encontra presa às paredes do canal.

Devido à diferença de pressão, a gota se deforma, tendendo a assumir uma forma mais fluidodinâmica. A deformação das interfaces gera uma diferença de pressão capilar no sentido contrário à  $\Delta P$  aplicada, contrapondo-se ao escoamento. Essa resistência ao escoamento da gota oriunda de efeitos capilares é conhecida como Efeito Jamin. Atribui-se a esse efeito a presença de óleo residual em reservatórios de petróleo molháveis à água, após a injeção deste fluido (ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006; DANDEKAR; PATIL; KHATANIAR, 2008; LIJUAN; XIANG'NA; FENQIAO, 2008; LI, 2011).

A histerese do ângulo de contato ( $\theta_{a,cr} - \theta_{r,cr}$ ), mencionada na seção 2.3, é uma das responsáveis pelo Efeito Jamin<sup>18</sup>: devido a particularidades da superfície (heterogeneidades, presença de contaminantes químicos, rugosidade), a linha de contato pode entrar em equilíbrio metaestável para diferentes valores do ângulo de contato, variando entre  $\theta_{r,cr}$  e  $\theta_{a,cr}$ . E justamente a possibilidade de a interface assumir diferentes valores para o ângulo de contato estático faz com que seja criada uma diferença de pressão capilar.

<sup>18</sup> A ocorrência do efeito Jamin também é atribuída à variação do raio de um canal (GARDESCU, 1930).

Assumindo-se que as curvaturas de ambas as interfaces da gota sejam constantes e que não há variação do coeficiente de tensão interfacial, a diferença de pressão capilar entre as interfaces é expressa por

$$\Delta P_c = \sigma(\kappa_a - \kappa_r), \quad (2.47)$$

onde os subscritos *a* e *r* indicam, respectivamente, *avanço* (porção dianteira da gota) e *recuo* (porção traseira da gota).

A hipótese de curvaturas constantes permite que essa variável seja expressa por

$$\kappa = \frac{-\cos\theta}{r_c}, \quad (2.48)$$

onde  $\theta$  é o ângulo de contato e  $r_c$  representa o raio do canal.

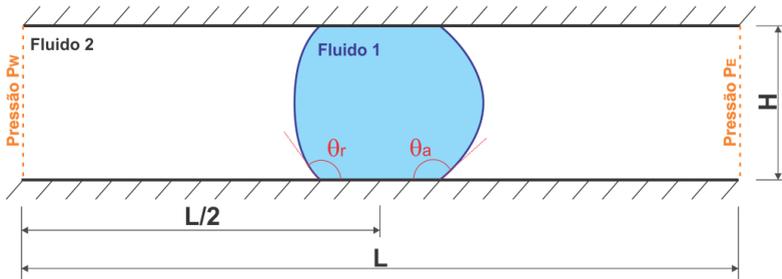
Nessa equação, o sinal negativo é devido ao fato de  $\theta$  assumir valores maiores do que  $90^\circ$ . Assim, a equação (2.47) adquire a seguinte forma:

$$\Delta P_c = \frac{\sigma}{r_c}(-\cos\theta_a + \cos\theta_r). \quad (2.49)$$

A equação (2.49) foi obtida em 1930 por Gardescu.

Os ângulos de contato da equação (2.49) são ilustrados na Figura

13.



**Figura 13.** Deformação da gota, que adquire diferentes ângulos de contato, conduzindo à geração de uma diferença de pressão capilar. Nesta situação,  $P_w > P_e$ .

Para melhor ilustrar a variação de pressão ao longo do canal onde a gota está presa, tome-se um caso hipotético em que o coeficiente de tensão interfacial vale 0,0474 N/m e o canal possui um raio igual a 50  $\mu\text{m}$ . Supondo que a gota se encontra deformada e no limite de entrar em movimento, então suas interfaces apresentam valores de ângulos iguais aos valores críticos. Admitindo que esses ângulos valham  $110^\circ$  (reco) e  $120^\circ$  (avanço), tem-se que a diferença de pressão capilar, calculada a partir da equação (2.49), é de aproximadamente 150 Pa. A Figura 14 ilustra algumas das pressões envolvidas nesse problema.

Nessa situação de equilíbrio, a pressão na interface de reco ( $P_r$ ) é igual à soma da pressão à montante da gota com a contribuição devida à tensão interfacial:

$$P_r = P_1 - \frac{\sigma}{r_c} \cos \theta_{r,cr} = P_1 + 324. \quad (2.50)$$

O sinal negativo à frente da contribuição da tensão interfacial é adotado devido ao ângulo ser maior do que  $90^\circ$ . Já a pressão na interface que avança ( $P_a$ ) é igual à soma da pressão à jusante da gota com a contribuição da tensão interfacial:

$$P_a = P_2 - \frac{\sigma}{r_c} \cos \theta_{a,cr} = P_2 + 474. \quad (2.51)$$

Como no equilíbrio  $P_r$  é igual a  $P_a$ , tem-se que:

$$P_1 - \frac{\sigma}{r_c} \cos \theta_{r,cr} = P_2 - \frac{\sigma}{r_c} \cos \theta_{a,cr}. \quad (2.52)$$

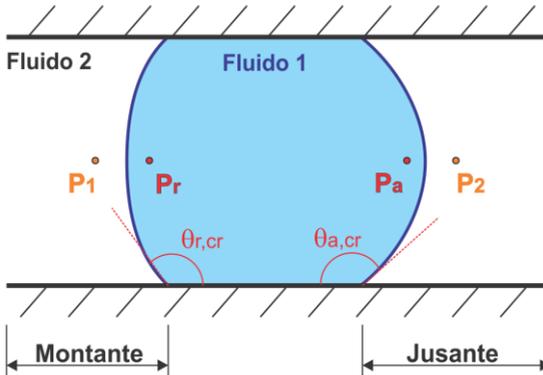
E, portanto,  $P_1 - P_2 = \Delta P_{c,cr} = 150 \text{ Pa}$ . Logo, a situação limite para que a gota se mantenha presa às paredes do canal corresponde a:

$$P_1 - P_2 = \Delta P_{c,cr} = \frac{\sigma}{r_c} (\cos \theta_{r,cr} - \cos \theta_{a,cr}), \quad (2.53)$$

onde o subscrito  $cr$  indica que essa diferença de pressão capilar corresponde à situação crítica em que os ângulos críticos foram atingidos. Repare que esta equação não contempla os efeitos viscosos e de aceleração no interior da gota que atuam durante a deformação da gota até seu estado crítico.

Considerando a equação (2.53), caso uma diferença de pressão maior do que  $\Delta P_{c,cr}$  (neste caso, 150 Pa) seja aplicada aos extremos do

canal, o equilíbrio não será mantido e a gota será carregada pelo fluido 2. Por outro lado, se uma diferença de pressão menor do que  $\Delta P_{c,cr}$  for aplicada, a gota permanecerá presa e seus ângulos críticos não serão atingidos.



**Figura 14.** Pressão em alguns pontos ao longo do canal para uma situação hipotética. Os ângulos de contato de recuo e de avanço valem  $110^\circ$  e  $120^\circ$ , respectivamente, e equivalem aos valores críticos dessa variável.

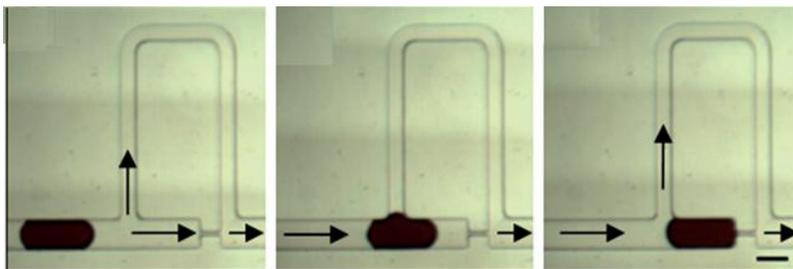
Como pode ser observado da equação (2.49), quanto menor o raio do capilar ou quanto maior a tensão interfacial entre os fluidos, maior a resistência ao escoamento. E, portanto, uma maior diferença de pressão deverá ser aplicada para que a gota seja deslocada. No caso da produção de petróleo pela injeção de água, esse fenômeno é um dos limitantes da recuperação de óleo, sendo necessárias maiores pressões de injeção para aumentar a produção. Porém, a máxima pressão de injeção é limitada tanto por questões operacionais (tamanho da planta de injeção, limitação do número de bombas), quanto por aspectos geomecânicos (para garantir a integridade física do reservatório, a pressão de injeção não pode ultrapassar a pressão de fratura da formação).

Enquanto que na recuperação secundária o efeito Jamin prejudica a produção de petróleo, em processos de recuperação terciária envolvendo a injeção de surfactantes a sua ocorrência pode ser benéfica. Isto porque a mistura entre o surfactante injetado e o óleo presente no reservatório pode formar emulsões, gerando gotas de óleo emulsionado suficientemente grandes para bloquear poros do reservatório. Esse tamponamento provoca o escoamento do fluido injetado por canais não-

preferenciais, aumentando a eficiência de varrido (TSAY; MENZIE, 1985; WANG et al., 2010).

Este mesmo bloqueio dos poros e a ocorrência do efeito Jamin é objetivo de alguns fluidos de perfuração que contêm micro-bolhas. Ao se tamponar poros da rocha na vizinhança do poço durante a sua perfuração, evita-se que parte do fluido de perfuração escoe para dentro do reservatório, reduzindo o dano à formação. Este é mais um exemplo das consequências favoráveis do efeito Jamin (BJORNDALLEN et al., 2009).

O efeito Jamin foi reproduzido em um dispositivo de geração de gotas projetado por Boukellal e colaboradores (2009). Nesse dispositivo, os pesquisadores empregaram um *by-pass* que, dependendo da pressão de injeção, atuava como uma válvula capilar baseada no efeito Jamin (Figura 15). Visando a estudar a influência da molhabilidade do dispositivo (fabricado em um polímero chamado Dimetil polissiloxano – PDMS), eles reproduziram o efeito Jamin em uma gota de água presa num canal onde havia injeção de óleo. Empregando a equação equivalente à (2.53) para a situação tridimensional<sup>19</sup>, concluíram que era necessária uma diferença de pressão de aproximadamente  $322 \pm 85$  Pa para deslocar a gota. Esse valor foi calculado utilizando os valores medidos dos ângulos de avanço e de recuo.

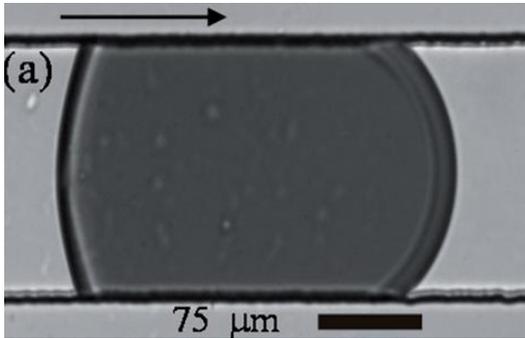


**Figura 15.** Componente do dispositivo gerador de gotas atuando como válvula capilar por meio do efeito Jamin (BOUKELLAL et al., 2009). O fluido escuro é água.

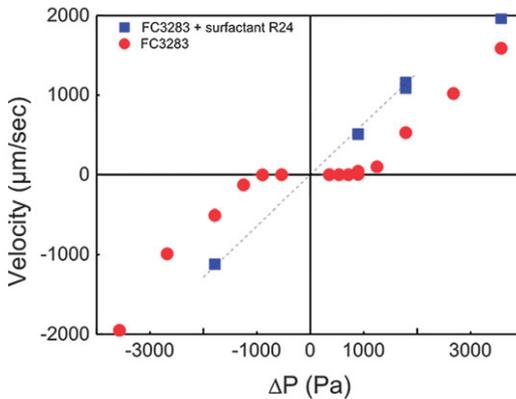
Numa série de experimentos em que a diferença de pressão do canal era variada, os pesquisadores verificaram que, para valores de  $\Delta P$  superiores a 350 Pa, a gota era deslocada pelo óleo. Ou seja, obtiveram um resultado bastante satisfatório quando comparado ao valor da

<sup>19</sup> Neste caso, basta multiplicar a equação por dois.

diferença de pressão previsto pela teoria. Um resumo dos resultados experimentais é apresentado no gráfico da velocidade atingida pela gota em função do  $\Delta P$  aplicado (Figura 16). Nessa figura também é mostrada uma foto da gota em repouso, que está sendo submetida a uma diferença de pressão, mas que não se desloca, pois os efeitos adesivos ainda não foram superados.



(a)



(b)

**Figura 16.** (a) Foto da gota em repouso e (b) variação da velocidade da gota com a  $\Delta P$  aplicada: pontos vermelhos indicam a injeção de óleo FC3283 e os pontos azuis indicam a injeção de uma mistura desse óleo com surfactante (BOUKELLAL et al., 2009).

Como pode ser observado dos pontos vermelhos da Figura 16 (b), a gota atinge velocidades mais expressivas para diferenças de pressão superiores a 1000 Pa. Outro aspecto que pode ser verificado nesta figura é que, quando uma mistura de óleo e surfactante é injetada no canal (pontos azuis), a gota de água é carregada pelo fluido injetado, independentemente da diferença de pressão aplicada ao canal. Esse comportamento ocorre graças à formação de um filme de óleo entre a gota e a parede, fazendo com que a gota deslize por sobre esse filme. Nesta situação, o efeito Jamin não ocorre.

Neste capítulo foram apresentadas as teorias de escoamentos multifásicos, da modelagem de parâmetros da interface para situações envolvendo ou não o contato da interface com um sólido, e do efeito Jamin. Dois modelos utilizados na descrição de escoamentos bifásicos foram apresentados, bem como alguns modelos para a estimativa da curvatura e do vetor normal à interface.

Tendo em vista que neste trabalho será abordada uma série de escoamentos bidimensionais bifásicos em que a interface entre os fluidos é bem definida e os mesmos se encontram totalmente separados, adotar-se-á o modelo de mistura para descrever cada fase. O tratamento numérico empregado para mapear a interface nestes escoamentos será apresentado no próximo capítulo.

Em relação aos parâmetros da interface, os três modelos para determinação da curvatura apresentados neste capítulo serão avaliados em diferentes problemas e modificações para o aperfeiçoamento do desempenho de um desses modelos serão apresentadas no decorrer do trabalho.

Ao final do trabalho, será simulado o efeito Jamin aplicando-se um dos métodos de estimativa da curvatura da interface bem como o método HF para avaliação dessa variável junto às linhas de contato. Conforme discutido no capítulo anterior, os *softwares* comerciais não são capazes de reproduzir o efeito Jamin, pois não descrevem a histerese do ângulo de contato e não preveem a evolução temporal desse parâmetro. Já o código desenvolvido ao longo dessa tese consegue reproduzir esse fenômeno com todas as suas nuances, permitindo que determinados aspectos da dinâmica do escoamento fossem identificados.



### 3. MODELO COMPUTACIONAL

Conforme mencionado no primeiro capítulo, a tese desenvolvida aborda numericamente escoamentos bidimensionais bifásicos com uma interface bem definida, que separa completamente os fluidos, e em que os efeitos interfaciais são expressivos. Neste capítulo serão apresentados as equações que descrevem o escoamento, sua solução pelo método dos volumes finitos e o método *Volume-of-fluid* (VOF), que é utilizado para mapear a posição da interface. Ao final do capítulo, o código implementado em linguagem Fortran 77 é validado com a simulação de escoamentos em que a tensão interfacial ainda não exerce papel significativo. Problemas com efeitos interfaciais pronunciados serão abordados nos próximos dois capítulos.

Nesta abordagem é empregado o modelo de mistura para descrever o escoamento bifásico, sendo necessárias as soluções das equações de conservação da massa da mistura, conservação da massa para uma das fases, conservação volumétrica e da conservação da quantidade de movimento linear. No modelo de mistura, a presença de mais de um fluido é considerada por meio das propriedades físicas.

Na solução numérica do escoamento, foram adotadas as seguintes hipóteses simplificativas:

- Fluidos imiscíveis, incompressíveis, newtonianos e isotérmicos;
- Propriedades físicas de ambos os fluidos constantes;
- Escoamento laminar;
- Coeficiente de tensão interfacial constante.

Considerando essas hipóteses, tem-se que o problema é modelado pelas seguintes equações:

- Equação de conservação da massa para o fluido 1:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \nabla \cdot (f_1 \mathbf{u}) = 0, \quad (3.1)$$

- Equação de conservação volumétrica:

$$f_2 = 1 - f_1, \quad (3.2)$$

- Equação de conservação da massa da mistura:

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0, \quad (3.3)$$

- Equação de conservação da quantidade de movimento linear:

$$\frac{\partial(\rho_m \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot \left\{ \mu_m \left[ \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] \right\} + \rho_m \mathbf{b} + \mathbf{F}_{sv}. \quad (3.4)$$

No Apêndice B é mostrado como a equação (3.3) foi obtida a partir da hipótese de fluidos incompressíveis.

Na equação (3.4), o penúltimo termo do lado direito da igualdade representa a contribuição de forças de corpo (força gravitacional, por exemplo), enquanto que o último termo desse mesmo lado da equação representa a força devido à tensão interfacial. O tratamento numérico desta força foi explicado no capítulo anterior.

Nessas equações, as propriedades da mistura são dadas por

$$\rho_m = f_1 \rho_1 + f_2 \rho_2, \quad (3.5)$$

$$\mu_m = f_1 \mu_1 + f_2 \mu_2. \quad (3.6)$$

Assim, tem-se que o escoamento é descrito por cinco equações com cinco incógnitas, quais sejam: as frações volumétricas de cada fase ( $f_1$  e  $f_2$ ), as componentes da velocidade ( $u$  e  $v$ ) e a pressão ( $P$ ). Todas as incógnitas são função do espaço e do tempo.

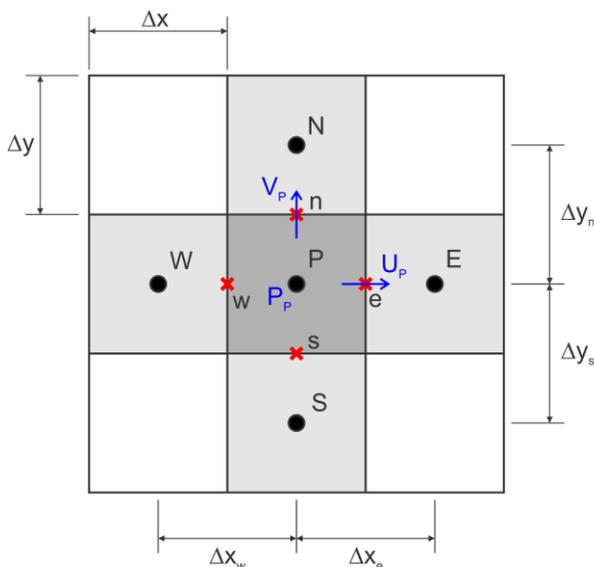
Essas equações em conjunto com as condições inicial e de contorno possibilitam a solução do escoamento.

### 3.1. MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Para resolver numericamente o escoamento, cujas equações descritivas foram apresentadas, empregou-se o método dos volumes finitos. Neste método, o domínio é discretizado em volumes de controle, formando uma malha computacional. As equações que regem o problema são discretizadas no espaço e no tempo, sendo resolvidas em cada um dos volumes de controle. Esta discretização é realizada por meio da integração das equações na forma conservativa ao longo do volume de controle e do tempo (PATANKAR, 1980).

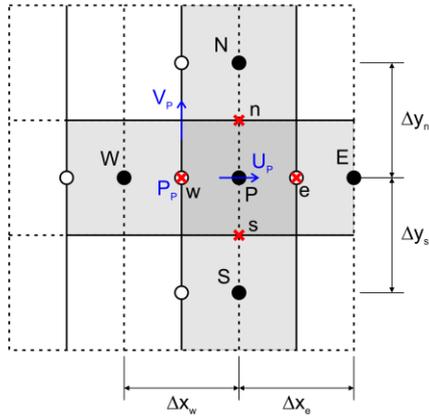
Nas simulações realizadas neste trabalho, foram empregadas malhas cartesianas, cujos volumes possuíam lados com dimensões

iguais a  $\Delta x$  e  $\Delta y$ , conforme ilustrado na Figura 17. Nesta figura, as linhas contínuas delimitam os volumes de controle aos quais é aplicada a equação de conservação da massa da mistura e do fluido 1. Ou seja, as variáveis pressão e frações volumétricas, bem como as propriedades físicas, são avaliadas no centro de seus volumes de controle. Já na solução das equações de conservação da quantidade de movimento, foram utilizados arranjos desencontrados das variáveis: a componente da velocidade na direção horizontal ( $u$ ) é avaliada no centro da face lateral direita do volume da malha para a pressão, enquanto que a componente vertical ( $v$ ) é avaliada no centro da face superior desse mesmo volume.

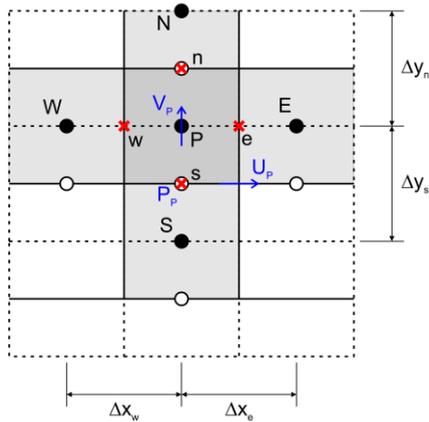


**Figura 17.** Malha para as variáveis  $P$ ,  $f_1$ ,  $f_2$ ,  $\rho$  e  $\mu$ .

O arranjo desencontrado das variáveis implica a utilização de malhas para as componentes da velocidade diferentes daquela empregada para as demais variáveis: a malha para  $u$  corresponde à malha para a pressão transladada de  $\Delta x/2$  na direção  $x$ , e a malha para  $v$  corresponde à malha de  $P$  transladada de  $\Delta y/2$  na direção  $y$ , conforme mostrado na Figura 18.



(a)



(b)

**Figura 18.** Malhas para (a) a componente horizontal da velocidade e (b) para a componente vertical.

Nesta Figura 18, as linhas tracejadas representam a malha para a pressão e os círculos brancos indicam os centros dos volumes dessa malha.

Empregando uma formulação totalmente implícita no tempo, após as integrações, as equações de Navier-Stokes nas direções  $x$  e  $y$  adquirem as seguintes formas respectivamente:

$$\begin{aligned}
& \frac{M_p}{\Delta t} u_p - \frac{M_p}{\Delta t} u_p^0 + \dot{m}_e u_e - \dot{m}_w u_w + \dot{m}_n u_n - \dot{m}_s u_s = -\frac{\Delta P}{\Delta x} \Delta V + \\
& + 2 \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Delta y \Big|_e - 2 \left( \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \Delta y \Big|_w + \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Delta x \Big|_n - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Delta x \Big|_s +, \quad (3.7) \\
& + \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \Delta x \Big|_n - \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \Delta x \Big|_s + \rho b_x \Delta V + F_{sv_x} \Delta V
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{M_p}{\Delta t} v_p - \frac{M_p}{\Delta t} v_p^0 + \dot{m}_e v_e - \dot{m}_w v_w + \dot{m}_n v_n - \dot{m}_s v_s = -\frac{\Delta P}{\Delta y} \Delta V + \\
& + \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \Delta y \Big|_e - \left( \mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) \Delta y \Big|_w + \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Delta y \Big|_e - \left( \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) \Delta y \Big|_w +, \quad (3.8) \\
& + 2 \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \Delta x \Big|_n - 2 \left( \mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \Delta x \Big|_s + \rho b_y \Delta V + F_{sv_y} \Delta V
\end{aligned}$$

onde  $M_p$  é a massa avaliada no centro do volume.

Nessas equações foi omitido o subscrito  $m$  da massa específica e da viscosidade da mistura. Os subscritos  $e$ ,  $w$ ,  $n$  e  $s$  indicam, respectivamente, as fronteiras leste, oeste, norte e sul do volume de controle. O sobrescrito 0 indica que a variável é avaliada no instante de tempo anterior;  $\Delta t$  e  $\Delta V$  correspondem respectivamente ao passo de tempo e ao volume do volume de controle.

As equações (3.7) e (3.8) correspondem à discretização da equação (3.4).

Ainda analisando-se essas equações, verifica-se que há termos não-lineares envolvendo o produto entre o fluxo de massa e as componentes das velocidades. Numericamente, essas não-linearidades são eliminadas calculando-se o fluxo de massa a partir do valor das velocidades na iteração anterior. Também há não-linearidades no produto entre a viscosidade e os termos difusivos, bem como na força devida à tensão interfacial. Essas duas variáveis dependem do campo de fração volumétrica<sup>20</sup>. Como será mostrado adiante, essas duas não-linearidades são resolvidas iterando a solução do campo de fração volumétrica após a solução das variáveis do escoamento ( $u$ ,  $v$  e  $P$ ) e

---

<sup>20</sup> Conforme discutido no capítulo anterior, a força devida à tensão interfacial depende da curvatura e do vetor normal à interface, que, por sua vez, dependem do campo de fração volumétrica.

atualizando as propriedades físicas e a força devida à tensão interfacial a cada nova iteração. Este tratamento explícito dessa força, como mencionado no segundo capítulo, impõe uma restrição ao passo de tempo para garantir a estabilidade da solução.

As velocidades e fluxos difusivos presentes nessas equações devem ser avaliados nas fronteiras dos volumes, indicadas nas Figura 18(a) e Figura 18(b). Como os valores dessas variáveis não estão disponíveis nessas fronteiras, é necessário empregar funções de interpolação para realizar aproximações com valores conhecidos das variáveis nos centros dos volumes de suas respectivas malhas.

As velocidades e os fluxos difusivos nas fronteiras são aproximados pelo esquema WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*) (MALISKA, 2004). Logo, aplicando-se esse esquema de interpolação, as equações da conservação da quantidade de movimento adquirem as seguintes formas:

$$A_p^u u_p = A_e^u u_E + A_w^u u_W + A_n^u u_N + A_s^u u_S + B^u - \frac{\Delta P}{\Delta x} \Delta V, \quad (3.9)$$

$$A_p^v v_p = A_e^v v_E + A_w^v v_W + A_n^v v_N + A_s^v v_S + B^v - \frac{\Delta P}{\Delta y} \Delta V, \quad (3.10)$$

onde

$$\begin{aligned} A_e^u &= -\dot{m}_e \left( \frac{1}{2} - \alpha_e \right) + \beta_e \mu_e \frac{\Delta y}{\Delta x} + \mu_e \frac{\Delta y}{\Delta x}, \\ A_w^u &= \dot{m}_w \left( \frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \beta_w \mu_w \frac{\Delta y}{\Delta x} + \mu_w \frac{\Delta y}{\Delta x}, \\ A_n^u &= -\dot{m}_n \left( \frac{1}{2} - \alpha_n \right) + \beta_n \mu_n \frac{\Delta x}{\Delta y}, \\ A_s^u &= \dot{m}_s \left( \frac{1}{2} + \alpha_s \right) + \beta_s \mu_s \frac{\Delta x}{\Delta y}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$B^u = A_{p_0}^u u_p^0 + \rho b_x \Delta V + F_{sv_x} \Delta V + \mu_n (v_E - v_p) - \mu_s (v_{SE} - v_S),$$

$$A_{p_0}^u = \frac{M_p^0}{\Delta t},$$

$$A_p^u = A_{p_0}^u + \sum A_{nb}^u$$

e

$$\begin{aligned} A_e^v &= -\dot{m}_e \left( \frac{1}{2} - \alpha_e \right) + \beta_e \mu_e \frac{\Delta y}{\Delta x}, \\ A_w^v &= \dot{m}_w \left( \frac{1}{2} + \alpha_w \right) + \beta_w \mu_w \frac{\Delta y}{\Delta x}, \\ A_n^v &= -\dot{m}_n \left( \frac{1}{2} - \alpha_n \right) + \beta_n \mu_n \frac{\Delta x}{\Delta y} + \mu_n \frac{\Delta x}{\Delta y}, \\ A_s^v &= \dot{m}_s \left( \frac{1}{2} + \alpha_s \right) + \beta_s \mu_s \frac{\Delta x}{\Delta y} + \mu_s \frac{\Delta x}{\Delta y}, \end{aligned} \tag{3.12}$$

$$B^v = A_{p_0}^v v_p^0 + \rho b_y \Delta V + F_{s_y} \Delta V + \mu_e (u_N - u_p) - \mu_w (u_{NW} - u_W),$$

$$A_{p_0}^v = \frac{M_p^0}{\Delta t},$$

$$A_p^v = A_{p_0}^v + \sum A_{nb}^v,$$

onde  $nb$  indica os volumes vizinhos;  $\alpha$  e  $\beta$  são fatores do esquema WUDS expressos em função do número de Peclet ( $Pe$ ):

$$|\alpha| = \frac{Pe^2}{10 + 2Pe^2}, \tag{3.13}$$

$$\beta = \frac{1 + 0,005Pe^2}{1 + 0,05Pe^2}. \tag{3.14}$$

Em geral, devido aos baixos valores do número de Peclet dos escoamentos simulados, o esquema de diferenças centrais foi recuperado.

Por sua vez, as viscosidades nas fronteiras são calculadas por uma interpolação linear.

Como se optou por resolver os sistemas de equações resultantes de forma segregada, na solução do escoamento, o campo de velocidade é determinado a partir das equações de conservação da quantidade de movimento e o campo de fração volumétrica é determinado a partir das

equações de conservação da massa para o fluido 1 e de conservação volumétrica. Entretanto não há uma equação escrita em termos da pressão, que possa ser utilizada na determinação direta dessa variável. Por outro lado, há a equação de conservação da massa da mistura, a qual representa uma restrição ao campo de velocidade.

Portanto, como é afirmado por Maliska (2004), “o desafio, então, é determinar um campo de pressão que, quando inserido nas equações do movimento, origine um campo de velocidade que satisfaça a equação da massa”, que, neste caso, é a equação da massa da mistura. Este “desafio” corresponde a resolver o problema do acoplamento pressão-velocidade.

Uma decisão natural para a solução deste problema é empregar a equação da massa da mistura na determinação do campo de pressão. Para tanto, é necessário reescrevê-la em termos dessa variável.

Há diversos métodos para tratar o problema do acoplamento pressão-velocidade. Dentre eles podem-se citar os métodos SIMPLE (*Semi Implicit Linked Equations*), SIMPLEC (SIMPLE Consistente) e PRIME (*PRessure Implicit Momentum Explicit*) (MALISKA, 2004).

Nesta tese optou-se por adotar o método PRIME na solução desse acoplamento. Este método introduz uma equação para o cálculo da pressão por meio da substituição das equações de correção da velocidade na equação de conservação da massa da mistura. Essas equações de correção são as próprias equações do movimento, calculadas a partir de uma estimativa da velocidade em uma iteração anterior, e, conseqüentemente, o campo de pressão utilizado na correção das velocidades é o próprio campo procurado. A principal vantagem deste método é que apenas um sistema de equações lineares deve ser resolvido, ao contrário de outros métodos em que um sistema linear para as velocidades também deve ser resolvido.

Para um arranjo desencontrado das variáveis e empregando-se interpolação linear para o gradiente de pressão, as equações de correção das velocidades no método PRIME são expressas por:

$$\begin{aligned} u_p &= \hat{u}_p - \bar{d}_p^u (P_E - P_p) \\ u_w &= \hat{u}_w - \bar{d}_w^u (P_p - P_w) \\ v_p &= \hat{v}_p - \bar{d}_p^v (P_N - P_p) \\ v_s &= \hat{v}_s - \bar{d}_s^v (P_p - P_s) \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde

$$\begin{aligned}\bar{d}^u &= \frac{\Delta V}{A_p^u \Delta x} \\ \bar{d}^v &= \frac{\Delta V}{A_p^v \Delta y}\end{aligned}\tag{3.16}$$

As velocidades  $\hat{u}$  e  $\hat{v}$  são dadas por

$$\begin{aligned}\hat{u}_p &= \frac{A_e^u u_E + A_w^u u_W + A_n^u u_N + A_s^u u_S + B^u}{A_p^u} \\ \hat{v}_p &= \frac{A_e^v v_E + A_w^v v_W + A_n^v v_N + A_s^v v_S + B^v}{A_p^v}\end{aligned}\tag{3.17}$$

Substituindo essas equações na equação discretizada da conservação da massa da mistura, que é expressa por

$$u_e \Delta y - u_w \Delta y + v_n \Delta x - v_s \Delta x = 0,\tag{3.18}$$

obtem-se a seguinte equação para a pressão:

$$A_p^p P_p = A_e^p P_E + A_w^p P_W + A_n^p P_N + A_s^p P_S + B^p.\tag{3.19}$$

Os coeficientes desta equação são dados por:

$$\begin{aligned}A_e^p &= \frac{\Delta y^2}{A_{p_e}^u}, \\ A_w^p &= \frac{\Delta y^2}{A_{p_w}^u}, \\ A_n^p &= \frac{\Delta x^2}{A_{p_n}^v}, \\ A_s^p &= \frac{\Delta x^2}{A_{p_s}^v},\end{aligned}\tag{3.20}$$

$$B^p = -\hat{u}_p \Delta y + \hat{u}_w \Delta y - \hat{v}_p \Delta x + \hat{v}_s \Delta x,$$

$$A_p^p = \sum A_{nb}^p.$$

O algoritmo para a solução do escoamento pelo método PRIME é ilustrado na Figura 19. Nesse fluxograma foi utilizada a mesma terminologia empregada por Maliska (2004).

A convergência do processo iterativo é determinada pela diferença entre o valor atual da componente da velocidade e seu valor na iteração anterior:

$$\begin{aligned} |u - u_{old}| &< \textit{Critério}_u \\ |v - v_{old}| &< \textit{Critério}_v \end{aligned} \tag{3.21}$$

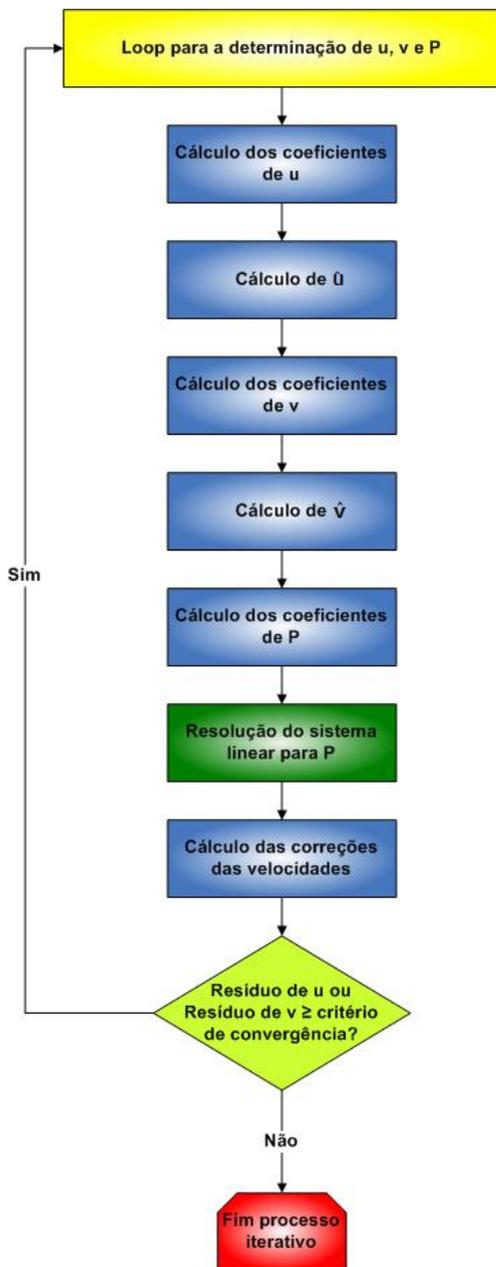


Figura 19. Algoritmo para a determinação de  $u$ ,  $v$  e  $P$ .

### 3.2. TRATAMENTO NUMÉRICO DA INTERFACE: MÉTODO VOF

Após a convergência dos campos de velocidade e pressão, deve-se então resolver o campo de fração volumétrica a partir das equações de conservação da massa de um dos fluidos e de conservação volumétrica. Mas a simples solução numérica da primeira equação, adotando-se um esquema de interpolação para os fluxos advectivos de  $f_1$  nas fronteiras do volume de controle, resulta numa interface difusa<sup>21</sup>. A resolução da interface obtida por tal método pode ser melhorada se algum esquema de compressão da interface for adotado, como afirmam Kothe et al. (1996), contudo sua espessura será restringida a dois ou três volumes de controle, em vez de um único volume, que é o ideal quando se deseja uma interface bem definida.

Visando a uma melhor resolução da interface, foram desenvolvidos alguns métodos de mapeamento de sua posição. Para uma revisão de alguns deles, referencia-se a tese de doutorado de Ubbink (1997).

Na presente tese, optou-se por empregar o método VOF (*Volume of Fluid*), pois este método restringe a interface a um único volume e conserva a massa (KOTHE et al., 1996; EGGERS, 1997; CUMMINS; FRANCOIS; KOTHE, 2005).

Além das características mencionadas anteriormente, uma das principais vantagens do método VOF, desenvolvido por Hirt e Nichols (1981), é que, por ele identificar regiões em vez de superfícies, problemas envolvendo a coalescência e a ruptura de fluidos podem ser tratados por ele<sup>22</sup>. Além disso, não é necessário deformar a malha para acompanhar a movimentação da interface como em outros métodos e a aplicação das condições de contorno interfaciais não é comprometida, pois basta identificar quais os volumes que contêm a interface. Esses volumes são caracterizados por possuírem valores da fração volumétrica do fluido 1 entre zero e um.

Embora alguns pesquisadores afirmem que o método VOF é constituído apenas pela solução da equação de transporte da fração volumétrica, na verdade este método é caracterizado por uma etapa de reconstrução da interface (HIRT; NICHOLS, 1981; KOTHE;

---

<sup>21</sup> Uma interface é denominada difusa quando sua espessura não se restringe a um único volume de controle.

<sup>22</sup> Entretanto, não há controle sobre a coalescência ou ruptura de fluidos, sendo ambos condicionados pelo tamanho dos volumes de controle da malha.

MJOLSNES, 1992; KOTHE; RIDER, 1994; KOTHE et al., 1996; RIDER; KOTHE, 1998; GUEYFFIER et al., 1999; MALIK; FAN; BUSSMANN, 2007). Esta etapa de reconstrução é necessária para se estimar geometricamente os fluxos advectivos da fração volumétrica, garantindo que a interface não seja difundida.

Nessa etapa, admite-se que a interface em cada volume possa ser aproximada por um ente geométrico como, por exemplo, retas paralelas a algum dos lados do volume ou inclinadas (LAFURIE, 1994; KOTHE et al., 1996; UBBINK, 1997). Na presente tese, a interface foi reconstruída empregando-se o método PLIC (*Piecewise-linear interface calculation*), que aproxima a interface por segmentos orientados de reta. Trata-se de um método com precisão de segunda ordem, cujos erros resultantes são menores do que os obtidos por uma aproximação por retas paralelas às faces do volume (KOTHE; RIDER, 1994; MARTINEZ; CHESNEAU; ZEGHMATI, 2006).

Retornando-se à equação de conservação da massa para o fluido 1:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \nabla \cdot (f_1 \mathbf{u}) = 0, \quad (3.22)$$

o segundo termo no lado esquerdo (os fluxos advectivos de  $f_1$ ) é então determinado a partir de um cálculo geométrico, onde a interface é aproximada por segmentos de reta orientados. Essas retas são representadas pela seguinte equação:

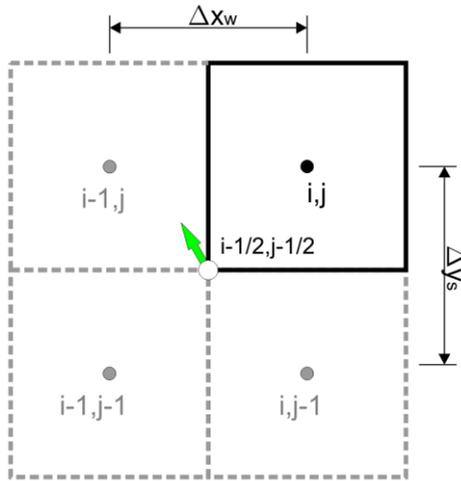
$$n_x x + n_y y = \gamma, \quad (3.23)$$

onde  $n_x$  e  $n_y$  são as componentes do vetor normal à reta nas direções  $x$  e  $y$  respectivamente e  $\gamma$  é a constante da reta. Esse vetor é o mesmo vetor normal à interface apresentado no capítulo anterior e também é calculado com base no campo de fração volumétrica, sendo definido como  $\mathbf{n} = \nabla f$ .

Para a reconstrução da interface, os valores das componentes desse vetor nos vértices do volume de controle são calculados empregando-se um estêncil de quatro pontos, conforme ilustrado na Figura 20. Portanto, para o canto inferior esquerdo do volume, as componentes da normal são expressas por (MALIK; BUSSMANN, 2004):

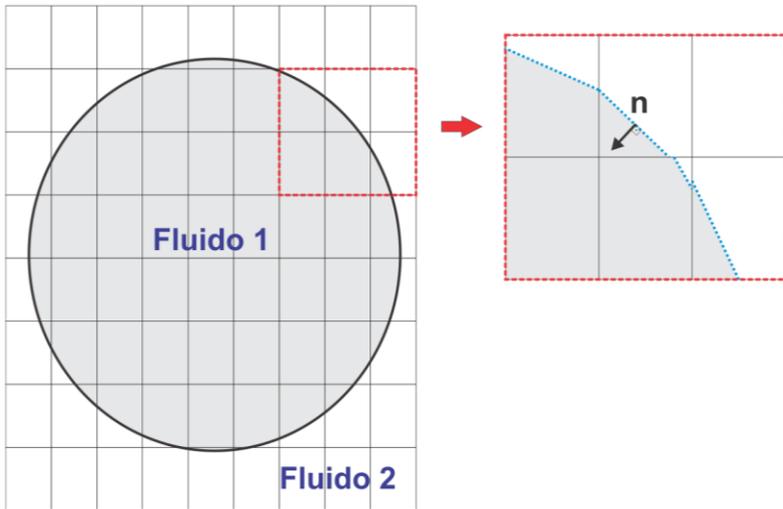
$$\begin{aligned}
 n_{x_{i-1/2,j-1/2}} &= \frac{1}{2 \cdot \Delta x_w} (f_{i,j} + f_{i,j-1} - f_{i-1,j} - f_{i-1,j-1}) \\
 n_{y_{i-1/2,j-1/2}} &= \frac{1}{2 \cdot \Delta y_s} (f_{i,j} + f_{i-1,j} - f_{i,j-1} - f_{i-1,j-1})
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

nessa equação foi omitido o índice 1 da fração volumétrica. Deste ponto em diante,  $f$  refere-se à fração volumétrica do fluido 1.



**Figura 20.** Pontos empregados na determinação do vetor normal à interface no vértice inferior esquerdo do volume.

Os valores finais das componentes do vetor normal são então obtidos através de uma média aritmética dos seus valores nos vértices do volume. Para finalizar a etapa de reconstrução da interface, é necessário determinar o valor da constante da reta ( $\gamma$ ). Este parâmetro é obtido da equação para o volume ocupado pelo fluido 1 no volume de controle ( $f \cdot \Delta V$ ), que é definido pela reta. Assim, obtém-se uma equação transcendental, cuja raiz  $\gamma$  pode ser determinada numericamente. Conhecidos esses parâmetros, a interface em cada volume de controle pode ser aproximada por segmentos de reta, como mostra a Figura 21. A reconstrução da interface constitui a etapa de maior custo computacional no mapeamento da interface.

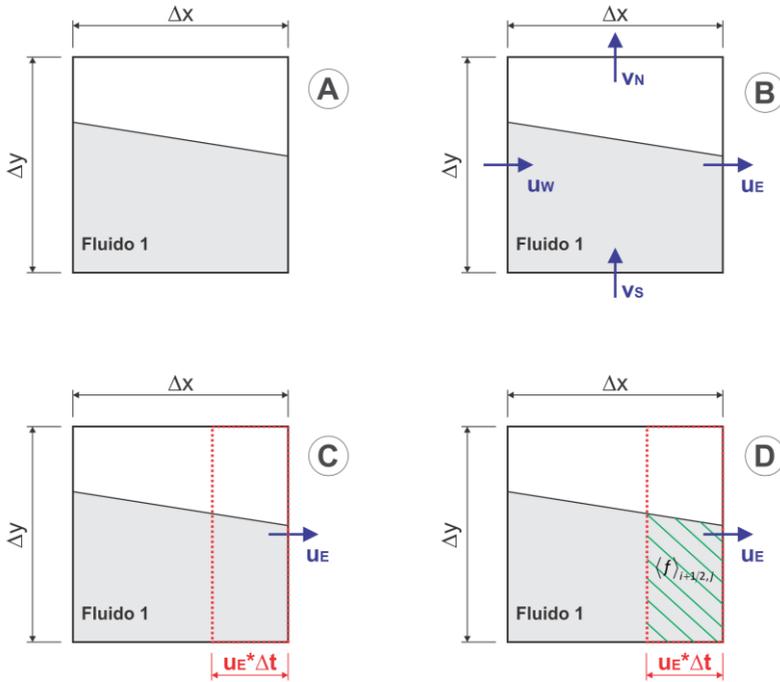


**Figura 21.** Aproximação da interface por segmentos de reta.

Obtidos  $n$  e  $\gamma$  a partir do campo de fração volumétrica, prossegue-se com o cálculo dos fluxos advectivos da fração volumétrica do fluido 1. Deve-se ressaltar que essa etapa de reconstrução da interface é empregada unicamente visando à obtenção desses fluxos, não sendo aplicada a outras etapas da solução do escoamento.

Os fluxos advectivos são calculados geometricamente conforme o procedimento apresentado para a fronteira leste do volume na Figura 22. Nesta figura, (A) indica o volume de controle preenchido por ambos os fluidos, onde a interface entre eles foi aproximada pelo segmento de reta obtido na etapa de reconstrução da interface. Como a equação de conservação da massa para o fluido 1 é resolvida após conhecidos os campos de velocidade e pressão (B, na Figura 22), pode-se estimar geometricamente qual a porção do volume será advectada pela fronteira. Portanto, de acordo com (C), essa porção corresponde ao volume  $u_E \cdot \Delta t \cdot \Delta y$  (tomando-se a profundidade do volume igual a 1). Essa porção do volume que será advectada é preenchida por um determinado volume de fluido 1, expresso por  $\langle f \rangle_{i+3/2,j} \cdot u_E \cdot \Delta t \cdot \Delta y$  (D na Figura 22). O parâmetro  $\langle f \rangle_{i+3/2,j}$  corresponde à quantidade de fluido 1 presente no

volume  $u_E \cdot \Delta t \cdot \Delta y$  e ela só é passível de ser calculada se a interface for reconstruída.



**Figura 22.** Procedimento de determinação da fração volumétrica do fluido 1 que será advectada pela fronteira leste do volume de controle.

Conhecidos os fluxos advectivos de  $f$ , resolve-se a equação (3.22) discretizada no tempo e no espaço. Aqui há mais um detalhe: uma vez que se optou por calcular os fluxos advectivos da forma explicada anteriormente, deve-se então adotar um avanço temporal “quebrado” em duas etapas, para evitar que algumas porções do fluido 1 sejam contabilizadas mais de uma vez durante a advecção na direção  $x$  e na direção  $y$ . Essa advecção “quebrada” da fração volumétrica com o tempo é conseguida pela técnica denominada *operator-split*. Nesta técnica é calculada a fração volumétrica num instante intermediário, resultante da advecção em uma direção ( $x$  ou  $y$ ). E, após a advecção de  $f$  na outra direção, obtém-se o campo de fração volumétrica em  $t + \Delta t$ .

A fração volumétrica do fluido 1 em um volume (i,j) no instante de tempo intermediário é expressa por (considerando primeiramente a advecção na direção x):

$$f_{i,j}^* = \frac{f_{i,j}^n V_{i,j} - \left( u_{i+1/2,j} \cdot \langle f \rangle_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j} \cdot \langle f \rangle_{i-1/2,j} \right) \Delta y \cdot \Delta t}{V_{i,j}^*}, \quad (3.25)$$

onde o sobrescrito  $n$  indica que a variável é avaliada no tempo  $t$ ;  $V_{i,j}^*$  é o volume do volume de controle, considerando sua deformação<sup>23</sup> após a primeira advecção:

$$V_{i,j}^* = V_{i,j} - \left( u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j} \right) \Delta y \cdot \Delta t. \quad (3.26)$$

Finalmente, a fração volumétrica do fluido 1 no instante  $t + \Delta t$  é dada por:

$$f_{i,j}^{n+1} = \frac{f_{i,j}^* V_{i,j}^* - \left( v_{i,j+1/2} \cdot \langle f \rangle_{i,j+1/2} - v_{i,j-1/2} \cdot \langle f \rangle_{i,j-1/2} \right) \Delta x \cdot \Delta t}{V_{i,j}}. \quad (3.27)$$

Nesta equação,  $v_{i,j+1/2} \cdot \langle f \rangle_{i,j+1/2} \cdot \Delta x \cdot \Delta t$  e  $v_{i,j-1/2} \cdot \langle f \rangle_{i,j-1/2} \cdot \Delta x \cdot \Delta t$  representam os volumes do fluido 1 advectados através das fronteiras norte e sul, respectivamente.

Esse esquema *operator-split*, segundo Malik e colaboradores (2007) possui precisão de primeira ordem. Entretanto, de acordo com Pilliod e Puckett (2004) e Puckett et al. (1997), o *operator-split* pode apresentar precisão de segunda ordem se a direção de varredura for alternada a cada passo de tempo. Ou seja, em  $t + \Delta t$  advecta-se  $f$  primeiro na direção  $x$  e depois na direção  $y$  e, em  $t + 2\Delta t$ , advecta-se  $f$  primeiro na direção  $y$  e posteriormente na direção  $x$ .

Este tratamento explícito da fração volumétrica no tempo impõe uma restrição ao passo de tempo, para que a estabilidade da solução seja garantida. Segundo essa restrição, expressa sob a forma do número de Courant, o valor máximo que o passo de tempo pode assumir está limitado à advecção do volume de um único volume de controle:

---

<sup>23</sup> Essa consideração é feita para manter a fração volumétrica limitada entre zero e um.

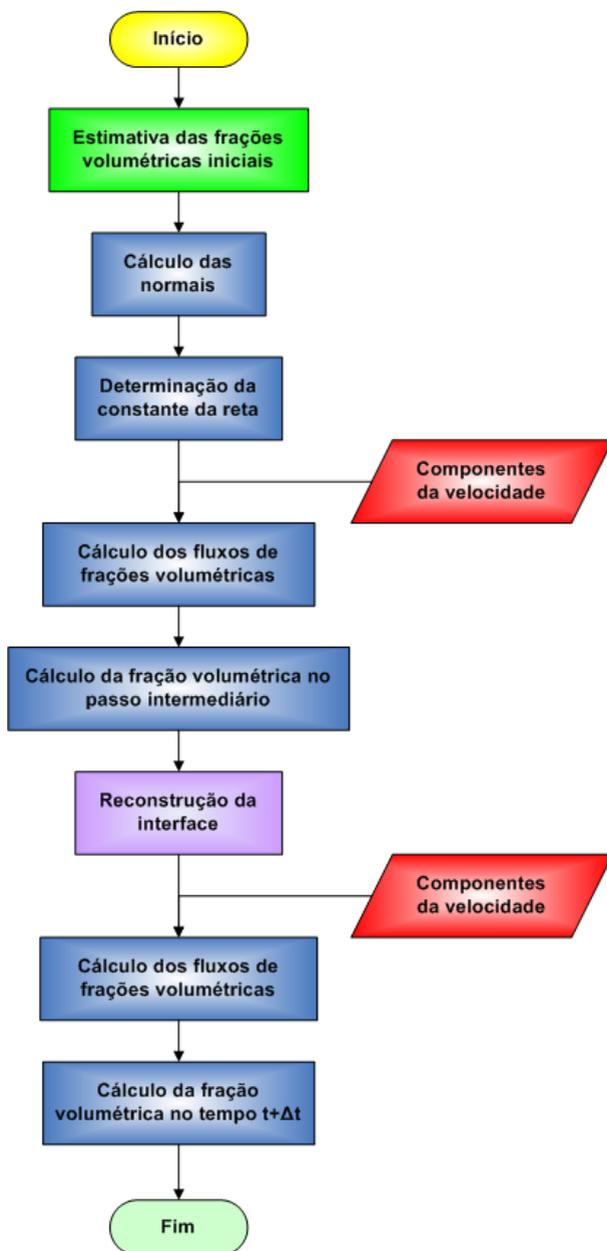
$$Co = \frac{U \cdot \Delta t}{\Delta} \leq 1, \quad (3.28)$$

onde  $U$  é o maior valor da velocidade em todo o domínio e  $\Delta$  corresponde ao tamanho do volume de controle onde  $U$  é avaliado. Relembrando a discussão do capítulo anterior, constata-se que o passo de tempo das simulações está sujeito a duas restrições: à expressa pela equação (3.28) e àquela imposta pelo tratamento explícito da força devida à tensão interfacial.

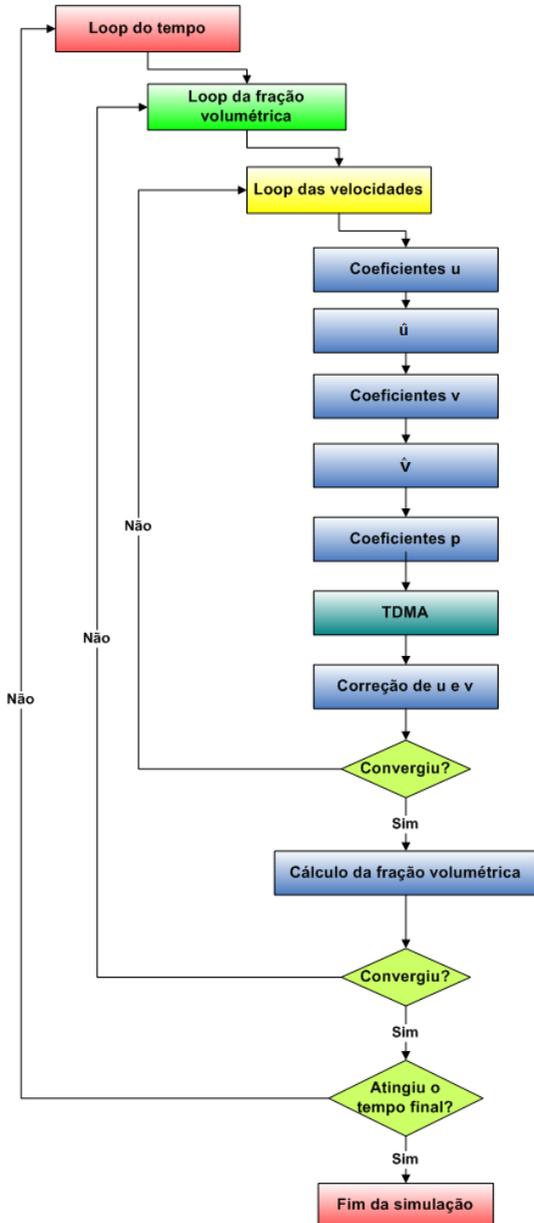
A Figura 23 mostra o fluxograma a ser seguido para mapear a posição da interface.

Portanto, o escoamento é resolvido da seguinte forma (mostrada na Figura 24): conhecidos os campos iniciais de  $u$ ,  $v$ ,  $P$ ,  $f$ ,  $\rho$  e  $\mu$ , determina-se as velocidades e pressões para o novo instante de tempo. Com esses novos campos, determina-se um novo campo de fração volumétrica, massas específicas e viscosidades. Com os novos campos das propriedades físicas, os coeficientes das velocidades são atualizados. Deve-se então determinar um novo campo de pressão. Por sua vez, essas novas pressões ingressarão na correção das velocidades e, devido às não-linearidades, novos coeficientes da velocidade serão novamente calculados. Procede-se assim até que  $u$ ,  $v$  e  $P$  convirjam. Calcula-se então um novo campo de fração volumétrica a partir dessas variáveis. O cálculo dos valores das variáveis para o novo passo de tempo só termina quando o resíduo do campo de fração volumétrica for menor do que um determinado critério. Após a convergência avança-se para um novo instante de tempo.

O algoritmo mostrado na Figura 23 é inserido no bloco “Cálculo da fração volumétrica” da Figura 24.



**Figura 23.** Algoritmo de mapeamento da interface.



**Figura 24.** Fluxograma da solução do escoamento acoplado ao campo de fração volumétrica.

### 3.3. CONDIÇÕES DE CONTORNO

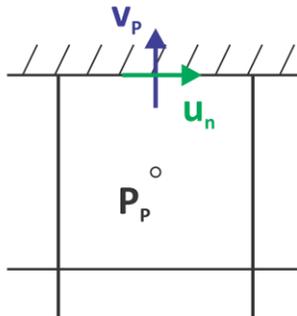
O código computacional desenvolvido contempla algumas condições de contorno, possibilitando a simulação de diferentes escoamentos para a sua validação.

#### 3.3.1. Condição de parede impermeável sem escorregamento (*no-slip*)

Nesta condição de contorno, a componente da velocidade normal à parede é nula, enquanto que um valor é prescrito à componente tangencial à parede. Por exemplo, para a fronteira norte, essa condição é expressa por

$$\begin{aligned} u_n &= u_{parede} \\ v_p &= 0 \end{aligned} \quad (3.29)$$

Repare que o subscrito da componente tangencial é minúsculo, indicando que a velocidade é avaliada na fronteira norte da malha para  $u$ . Já para a componente da velocidade normal à parede foi atribuído um subscrito maiúsculo, indicando que a velocidade é avaliada no centro da malha para  $v$  (Figura 25).



**Figura 25.** Variáveis a que são atribuídas as condições expressas em (3.29).

#### 3.3.2. Condição de parede impermeável com escorregamento (*free-slip*)

Esta é uma condição também aplicada a casos com simetria e, segundo ela, a derivada da componente da velocidade tangencial à

parede em relação à direção perpendicular à parede é nula e a componente normal da velocidade é nula:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_n = 0, \quad (3.30)$$

$$v_p = 0$$

para a fronteira norte.

### 3.3.3. Condição de contorno periódica

Esta condição foi implementada de acordo com o método descrito por Patankar, Liu e Sparrow (1977), em que um termo fonte igual ao gradiente de pressão é prescrito na direção em que o escoamento é periódico. Para um escoamento periódico na direção  $x$ , este termo é expresso por

$$\beta = \frac{P(x, y) - P(x + L, y)}{L}. \quad (3.31)$$

Este termo ingressará no termo fonte da equação de conservação da quantidade de movimento naquela direção. Além disso, supondo que a condição de contorno periódica esteja prescrita às fronteiras leste e oeste do domínio, os valores das variáveis do escoamento ( $u$ ,  $v$ ,  $P$ ,  $f$ ,  $\rho$  e  $\mu$ ) na primeira coluna do domínio são prescritos iguais aos seus valores na última coluna do domínio:

$$\varphi_{1,j} = \varphi_{n_x,j}, \quad (3.32)$$

onde  $\varphi$  indica qualquer uma das variáveis mencionadas e  $n_x$  é o número de volumes da malha na direção  $x$ .

### 3.3.4. Condição de abertura (*opening*)

Nesta condição, as derivadas de ambas as componentes da velocidade em relação à direção perpendicular à parede são nulas:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_n = 0, \quad (3.33)$$

$$\left. \frac{\partial v}{\partial y} \right|_n = 0$$

para a fronteira norte. Nessa condição, é prescrito um valor para a pressão nos volumes adjacentes à fronteira.

Além dessas condições também foi implementada a condição de velocidade prescrita.

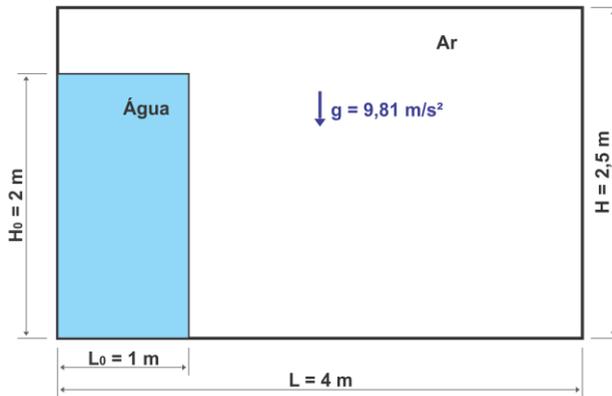
### 3.4. VALIDAÇÃO DO CÓDIGO COMPUTACIONAL

O código computacional implementado em Fortran 77 foi validado com uma série de problemas, seguindo o fluxo de seu desenvolvimento. Ou seja, primeiramente foi validado o código que resolvia o escoamento monofásico em regime permanente, posteriormente validou-se o código para o escoamento monofásico em regime transiente e, por fim, o código que resolve o escoamento bifásico em regime transiente. O código que resolve o escoamento monofásico em regime permanente foi ainda verificado com o Método das Soluções Manufaturadas (*Method of Manufactured Solutions* – MMS). Este método e os resultados da verificação do código são apresentados no Apêndice C.

Foram simulados diversos tipos de escoamento, mas apenas os resultados para três deles serão apresentados nesta seção. Nesses escoamentos foram desprezados os efeitos interfaciais, pois eles visavam a avaliar o algoritmo de solução do escoamento e de mapeamento da interface.

#### 3.4.1. Rompimento de uma barragem (*broken dam*)

Este é um escoamento clássico, que foi estudado experimental e numericamente por diversos autores (HARLOW; WELCH, 1965; NICHOLS; HIRT, 1971; ANAGNOSTOPOULOS; BERGELES, 1999; MARONNIER; PICASSO; RAPPAZ, 2003; SHAO; LO, 2003; CRUCHAGA; CELENTANO; TEZDUYAR, 2007). Neste problema, uma coluna d'água é retida por uma barragem e, no início da simulação (Figura 26), a barragem é removida e a água escoou.



**Figura 26.** Configuração inicial do problema da *broken dam*.

As dimensões do domínio da simulação estão ilustradas na Figura 26, juntamente com as dimensões da coluna d'água. A todas as fronteiras foi atribuída condição de impermeabilidade e não-escorregamento. A Tabela 3-1 apresenta os valores das propriedades físicas do ar e da água utilizados nas simulações.

**Tabela 3-1.** Propriedades físicas dos fluidos da simulação do escoamento da *broken dam*.

Propriedade	Valor
Massa específica da água	1000 kg/m <sup>3</sup>
Massa específica do ar	1,1614 kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade da água	8,55x10 <sup>-4</sup> Pa s
Viscosidade do ar	1,846x10 <sup>-5</sup> Pa s

Inicialmente, os campos de velocidade e de pressão são nulos e a fração volumétrica da água é inicializada conforme ilustrado na Figura 26. Como a coluna d'água está sujeita a uma aceleração gravitacional de 9,81 m/s<sup>2</sup>, com o decorrer da simulação, ela escoo em direção à parede oposta.

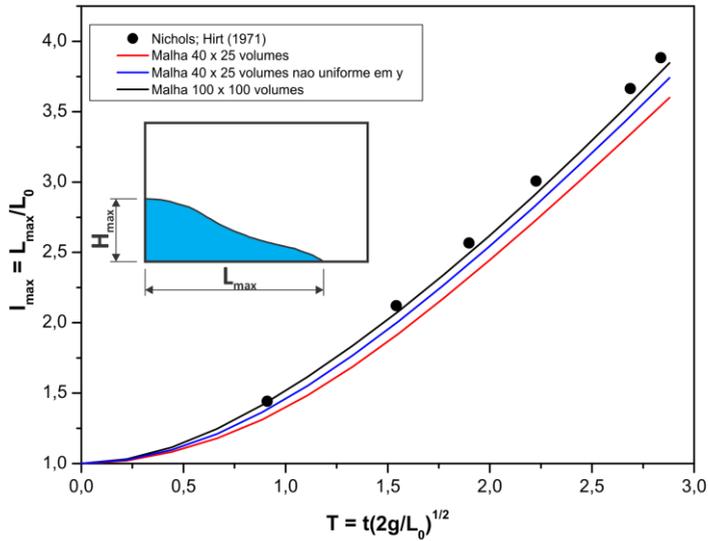
Um estudo da sensibilidade dos resultados em relação aos critérios de convergência foi realizado e os critérios ótimos foram empregados nas demais simulações. Os valores desses critérios estão apresentados na Tabela 3-2.

**Tabela 3-2.** Parâmetros numéricos das simulações do escoamento da *broken dam*.

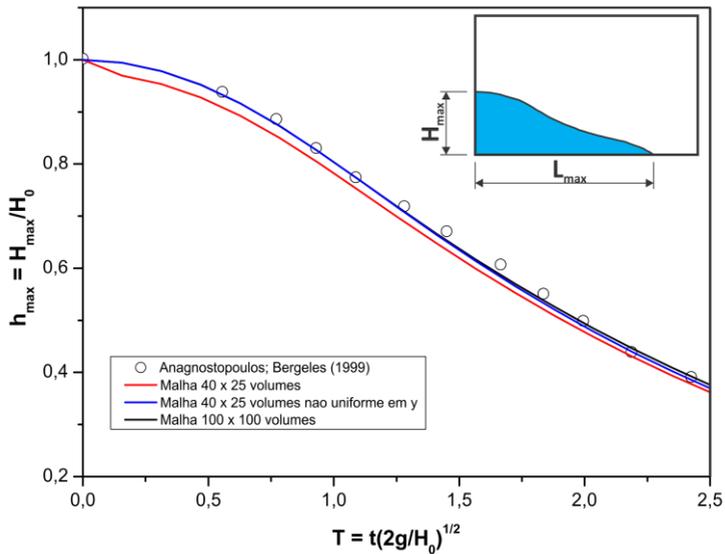
Parâmetro	Valor
Passo de tempo ( $\Delta t$ )	$10^{-3}$ s
Tempo final da simulação	0,8 s
Critério de convergência para u e v	$10^{-3}$ m/s
Critério de convergência para P	1 Pa
Critério de convergência para $f$	$10^{-5}$

Esse escoamento foi simulado empregando-se três malhas diferentes e seus resultados foram comparados aos publicados na literatura. As duas primeiras malhas possuem mesmo número de volumes (40 x 25 volumes), mas sua distribuição é diferente: enquanto que na primeira os volumes estão distribuídos uniformemente ao longo de x e y, na segunda, eles são distribuídos uniformemente apenas na direção x. Na direção y, os dois primeiros metros de altura do domínio são ocupados por 20 volumes com tamanhos que crescem de acordo com uma progressão aritmética, onde o primeiro volume possui 0,05 m de altura. Os últimos cinco volumes ocupam o restante da altura do domínio (0,5 m) e possuem mesmo tamanho. Por sua vez, a terceira malha utilizada nas simulações possui 100 x 100 volumes, distribuídos uniformemente.

Na Figura 27, os resultados numéricos para a posição da frente de água e para a altura máxima da camada de água ao longo do tempo são comparados com os resultados reportados na literatura. Como pode ser observado nessa figura, os resultados numéricos apresentam boa concordância com os resultados da literatura, concordância esta que melhora com o refino da malha. Além disso, pode-se constatar que um maior refino da malha na região de interesse (porções inferiores do domínio, próximas à fronteira sul) produz melhores resultados do que quando uma distribuição uniforme da malha é aplicada.



(a) Posição da frente de água em função do tempo.

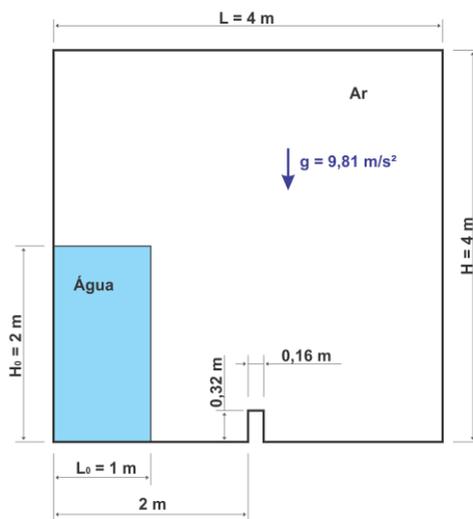


(b) Altura máxima da camada de água em função do tempo.

**Figura 27.** Resultados para o escoamento da *broken dam*: (a) Posição da frente de água e (b) Altura máxima da camada de água em função do tempo.

### 3.4.2. Rompimento de uma barragem com obstáculo (*broken dam with an obstacle*)

Ao domínio do problema anterior é adicionado um obstáculo (Figura 28), que provoca grandes alterações na dinâmica do escoamento da água: após o choque da camada de água contra esse obstáculo, uma “tromba” de água se forma. Após alguns instantes, essa tromba impacta contra uma das paredes laterais. Esse escoamento também foi estudado experimental e numericamente por alguns pesquisadores (MUZAFERIJA; PERIC, 1998; MARTI et al., 2006).



**Figura 28.** Configuração inicial do problema da *broken dam* com obstáculo.

A perturbação que o obstáculo impõe ao escoamento da água é muito forte e requer uma certa robustez do método numérico na solução desse escoamento, representando este problema um ótimo teste para o código computacional elaborado neste trabalho.

Nas simulações da evolução deste escoamento foram utilizados os mesmos parâmetros do caso anterior (Tabela 3-1 e Tabela 3-2), com exceção dos valores para o passo de tempo e do tempo final da simulação. Esses parâmetros agora valem, respectivamente,  $10^{-4} \text{ s}$  e  $1,25 \text{ s}$ .

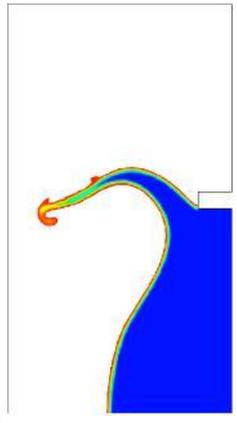
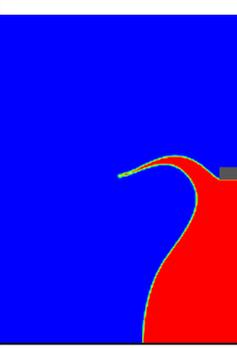
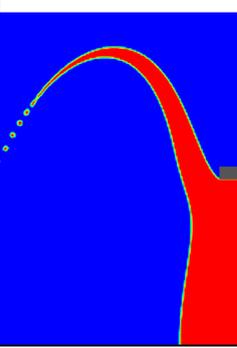
Diferentes tamanhos de malha também foram utilizados na simulação deste escoamento, porém, apenas os resultados para uma

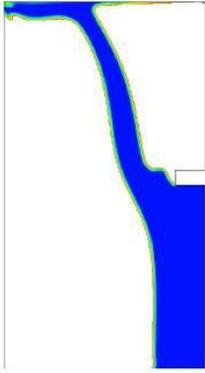
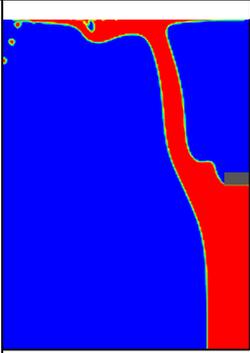
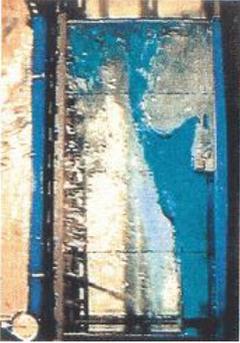
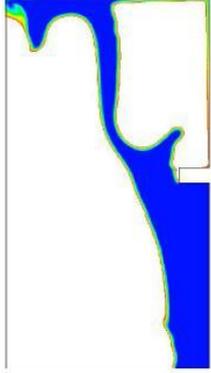
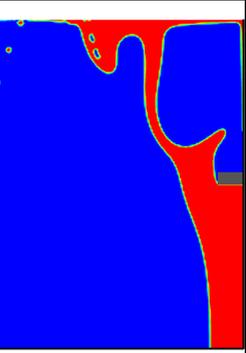
malha uniforme com 200 x 200 volumes serão apresentados e comparados aos resultados da literatura.

A Tabela 3-3 apresenta fotografias de instantes do experimento do rompimento da barragem com obstáculo publicadas na literatura (MARTI et al., 2006), além dos campos de fração volumétrica nos mesmos instantes obtidos por Muzaferija e Peric (1998) e obtidos neste trabalho. Sobre esses últimos resultados, salienta-se que, uma vez que as dimensões do problema numérico diferem das do experimento (porém suas proporções são iguais), utilizou-se uma variável adimensional em função do tempo para que os resultados para instantes de tempo equivalentes pudessem ser comparados. Tal variável é expressa por  $\tau = t\sqrt{2|g|/L}$ .

Como pode ser verificado na Tabela 3-3, os resultados obtidos nesta tese concordam com aqueles obtidos numericamente por Muzaferija e Peric e com os resultados experimentais publicados em Marti et al. (2006). Vale ressaltar que, apesar das figuras que ilustram os resultados desta tese sugerirem, o método VOF empregado neste trabalho não resulta numa interface difusa. A difusão presente nessas figuras é resultante da forma como o programa de pós-processamento das imagens trata os resultados.

**Tabela 3-3.** Resultados experimentais e numéricos para o problema da *broken dam* com obstáculo.

Tempo (s)	Experimental (KOSHIZUKA; TAMAKO; OKA, 1995 apud MARTI et al., 2006)	Muzaferija e Peric (1998)	Código próprio (malha com 200 x 200 volumes)
0,2			
0,3			

<p><b>Tempo (s)</b></p>	<p><b>0,4</b></p>	<p><b>Experimental (KOSHIZUKA; TAMAKO; OKA, 1995 apud MARTI et al., 2006)</b></p> 	<p><b>Muzafferija e Peric (1998)</b></p> 	<p><b>Código próprio (malha com 200 x 200 volumes)</b></p> 
<p><b>0,5</b></p>				

### 3.4.3. Instabilidade de Rayleigh-Taylor

A instabilidade de Rayleigh-Taylor (CHANDRASEKHAR, 1981) pode se desenvolver em várias situações, em que um ou mais fluidos estão sujeitos à ação de uma força de campo. Uma delas ocorre quando fluidos com densidades diferentes tendem a trocar de lugar entre si. Para essa instabilidade ocorrer é necessário que o fluido menos denso esteja localizado abaixo do fluido mais denso, caracterizando um equilíbrio metaestável. Introduce-se então uma perturbação ao sistema, sob a forma de uma perturbação à interface, e a instabilidade se desenvolve.

A fim de observar o desenvolvimento dessa instabilidade, simulou-se o escoamento de dois fluidos com mesmas viscosidades, mas com massas específicas diferentes, cada um ocupando metade do domínio do problema. Introduziu-se então uma perturbação à interface, cuja posição perturbada é expressa por

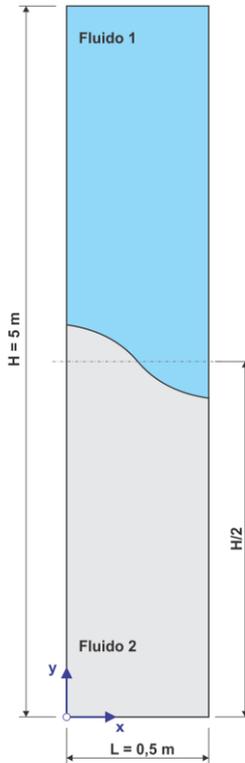
$$y = \frac{H}{2} + a_0 \cos\left(\pi \frac{x}{L}\right), \quad (3.34)$$

onde  $H$  é a altura do domínio,  $L$  é o comprimento do domínio e  $a_0$  vale 0,1 m. A configuração inicial dos fluidos é ilustrada na Figura 29.

Nessa configuração, o fluido superior (fluido 1) possui massa específica igual a  $1000 \text{ kg/m}^3$ , enquanto que a massa específica do fluido inferior (fluido 2) vale  $100 \text{ kg/m}^3$ . Ambos os fluidos possuem viscosidade dinâmica igual a  $10^{-3} \text{ Pa s}$ .

Assim como nos dois casos anteriores, tanto o campo de velocidade quanto o de pressão foram inicializados com valor zero. A fração volumétrica, por sua vez, foi inicializada de acordo com o ilustrado na Figura 29. E a todas as fronteiras do domínio, com exceção da fronteira leste, foi atribuída condição de impermeabilidade e não-eskorregamento. Para a fronteira leste, atribuiu-se condição de impermeabilidade e de eskorregamento, equivalendo a uma condição de simetria.

Já os valores dos parâmetros numéricos empregados nas simulações são apresentados na Tabela 3-4.



**Figura 29.** Configuração inicial dos fluidos para a simulação da instabilidade de Rayleigh-Taylor. Esta figura está fora de escala.

**Tabela 3-4.** Parâmetros numéricos das simulações da instabilidade de Rayleigh-Taylor.

Parâmetro	Valor
Passo de tempo ( $\Delta t$ )	$10^{-4}$ s
Tempo final da simulação	0,45 s
Critério de convergência para u e v	$10^{-5}$ m/s
Critério de convergência para P	1 Pa
Critério de convergência para $f$	$10^{-5}$

Este escoamento foi simulado empregando-se quatro tamanhos diferentes da malha, porém, apenas os resultados para a malha com 300 x 1100 volumes serão apresentados. Esta é uma malha uniformemente

espaçada na direção x, mas que apresenta uma distribuição não uniforme dos volumes ao longo da direção y: de 0 a 1,5 m são posicionados 150 volumes segundo uma progressão aritmética, cujo último volume possui 1,6 mm de altura; entre 1,5 m e 3 m, a malha possui 900 volumes iguais com 1,6 mm de altura; e nos 2 últimos metros da altura do domínio, o tamanho dos 50 volumes restantes segue uma progressão aritmética, tendo o primeiro volume uma altura de 1,6 mm.

A instabilidade de Rayleigh-Taylor também foi reproduzida empregando-se o *software* comercial ANSYS CFX® 11.0. Nas simulações com esse código comercial, também foi empregado um passo de tempo de  $10^{-4}$  s e foi utilizada uma malha com 662802 nós<sup>24</sup>.

A Figura 30 ilustra o desenvolvimento da instabilidade, obtido por ambos os códigos (comercial e próprio). É possível observar nessa figura o desenvolvimento de vórtices e *fingers* na interface. Esses *fingers* surgem primeiro nas simulações com o código próprio.

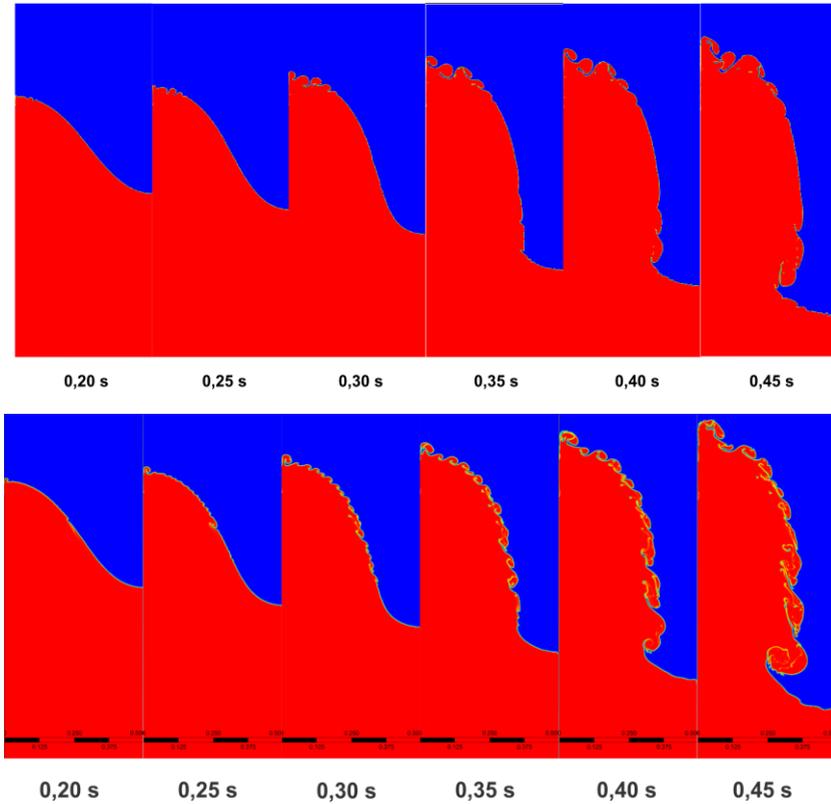
Como pode ser constatado, nos resultados do código comercial, há a formação de vórtices ao longo de todo o corpo da protuberância, enquanto que nos resultados com o código desenvolvido nesta tese, esses vórtices se concentram na região próxima à fronteira oeste do domínio e na “cabeça” da protuberância.

Os resultados obtidos pelos dois códigos computacionais diferem entre si nesses aspectos, pois os métodos empregados na solução do transporte da fração volumétrica são diferentes: nesta tese utiliza-se o método VOF associado ao método PLIC, enquanto que o código comercial ANSYS CFX® emprega um esquema advectivo na solução da equação de transporte de  $f$ .

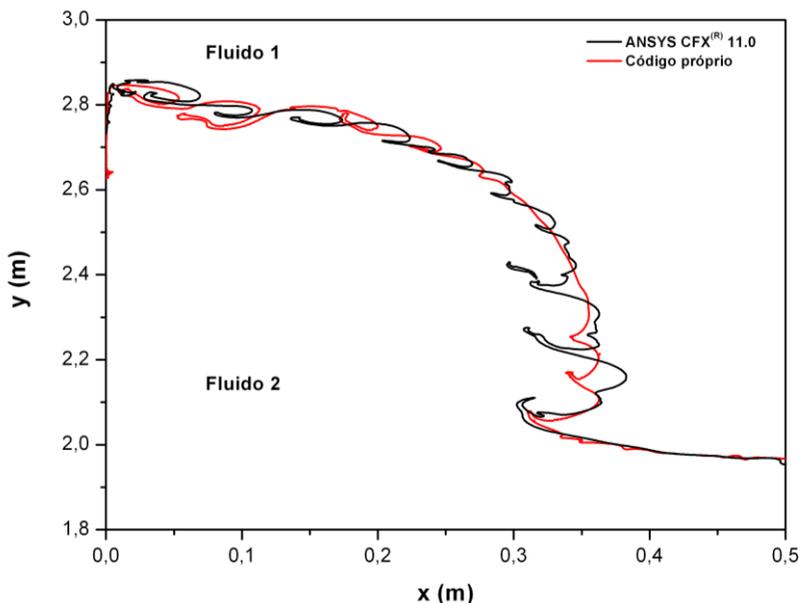
A forma e a posição da interface em 0,4 s obtidas por ambos os códigos são comparadas na Figura 31. Apesar de os vórtices formados em ambas as simulações não coincidirem, a posição média da interface ao longo do tempo obtida pelos dois códigos é semelhante.

---

<sup>24</sup> Uma vez que o *software* ANSYS CFX® não simula problemas bidimensionais, é necessário empregar uma malha com um elemento de espessura. E, portanto, um dos planos de simetria do problema possui metade desses nós. A malha possui ao todo 330000 elementos.



**Figura 30.** Desenvolvimento da instabilidade de Rayleigh-Taylor. A sequência superior de imagens mostra os resultados obtidos com o código próprio, enquanto que os resultados obtidos com o *software* ANSYS CFX® 11.0 são apresentados na sequência inferior.



**Figura 31.** Comparação da forma e da posição da interface em 0,4 s.

### 3.5. CONCLUSÕES

Neste capítulo foi apresentada a modelagem numérica aplicada à solução de escoamentos bidimensionais bifásicos com fluidos imiscíveis. As equações de conservação da massa da mistura e da quantidade de movimento foram resolvidas aplicando-se o método dos volumes finitos e o problema do acoplamento pressão-velocidade foi resolvido utilizando-se o método PRIME. Já a posição da interface foi mapeada resolvendo-se a equação de conservação da massa de um dos fluidos com o método VOF. Como este método requer uma etapa de reconstrução da interface, aplicou-se o método PLIC, que aproxima a interface por segmentos orientados de reta. A advecção da fração volumétrica, por sua vez, foi realizada em duas etapas pelo *operator-split*.

A modelagem aqui apresentada foi implementada em um código em linguagem Fortran 77 desenvolvido ao longo desta tese. Tal código foi validado com a simulação de alguns escoamentos bifásicos e a comparação dos resultados obtidos com resultados publicados na literatura. Foram reportados neste capítulo os resultados obtidos na

simulação de três escoamentos diferentes: o do rompimento de uma barragem (*broken dam*), o do rompimento de uma barragem com um obstáculo ao escoamento da água (*broken dam with an obstacle*) e o desenvolvimento da instabilidade de Rayleigh-Taylor.

Como pode ser constatado, os resultados das simulações desses três casos apresentaram boa concordância com os resultados experimentais e numéricos publicados na literatura.

## 4. TRATAMENTO NUMÉRICO DOS EFEITOS INTERFACIAIS

No segundo capítulo, foram introduzidos o método CSF (*Continuum Surface Force*), modelos para o delta de Dirac e para o vetor normal à interface, além de três modelos diferentes para a determinação da curvatura da interface: a técnica da convolução, o método das Funções Altura (HF) e o método HF com filtro por convolução (HF-fc).

Neste capítulo, é proposta uma modificação no método HF, que tem por objetivo combater a geração de correntes espúrias e a deterioração da solução numérica provocada por uma anisotropia no campo de curvatura. Este método será denominado método HF2.

Ao longo deste capítulo, serão apresentados resultados de simulações de casos clássicos e de escoamentos reportados na literatura sobre modelagem da curvatura da interface. Esses resultados servirão para avaliar os quatro métodos de estimativa da curvatura, bem como para identificação de deficiências de cada um deles.

### 4.1. MÉTODO HF2

Este método foi idealizado a partir da observação do campo de curvatura e dos erros associados a esse parâmetro gerados pelo método HF para o caso de uma gota estática em um domínio sem ação da gravidade<sup>25</sup> (GLITZ; SILVA; MALISKA, 2010). Nesse caso, verificou-se que o método HF produzia um campo de curvatura anisotrópico<sup>26</sup> localmente e que esse campo era o responsável por correntes espúrias. Também constatou-se que as maiores magnitudes do campo de velocidade estavam associadas aos volumes com maiores erros na avaliação da curvatura. O efeito desse erro combinado à anisotropia da curvatura é mais acentuado em malhas mais finas, como será mostrado adiante. Essa constatação não havia sido reportada em trabalhos sobre a modelagem da curvatura da interface, consultados ao longo do desenvolvimento desta tese.

---

<sup>25</sup> Neste caso, o campo de velocidade deve ser nulo, pois a diferença de pressão entre os fluidos externo e interno à gota é balanceada pelos efeitos da tensão interfacial.

<sup>26</sup> Denomina-se campo de curvatura “anisotrópico”, o campo de curvatura que apresenta valores idênticos dessa variável em volumes de controle vizinhos.

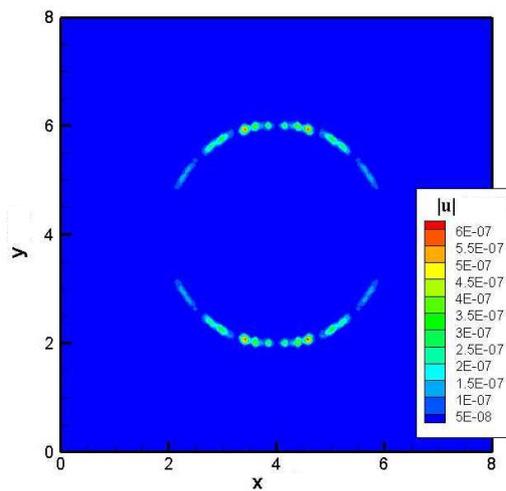
O surgimento de um campo de curvatura anisotrópico e de maiores erros na avaliação da curvatura pode ser atribuído à hipótese de que, se a condição  $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  no método HF não for satisfeita, então a curvatura do volume (i,j) assume o mesmo valor da curvatura do volume mais próximo situado na direção de maior variação da fração volumétrica (direção dominante). Assim, haverá linhas/colunas ao longo de uma região que envolve a interface, que contêm volumes de controle com valores idênticos da curvatura, gerando uma anisotropia local desse parâmetro, conforme mostrado na Figura 32. Esta figura foi obtida da simulação do problema de uma gota estática centrada em um domínio quadrado. Como não há ação da gravidade, a simulação de tal problema deveria resultar em um campo nulo de velocidades. Entretanto, a modelagem da curvatura da interface introduz erros nos resultados, gerando um campo espúrio de velocidades nas proximidades da interface, que é apresentado na Figura 32(a). Na Figura 32(b) são mostrados os erros na curvatura da interface e, como pode ser observado nessas figuras, as regiões em que a magnitude das velocidades espúrias é maior coincide com a região de maior erro na estimativa da curvatura<sup>27</sup>.

O método HF2 corresponde ao método HF original com a implementação de duas modificações, as quais objetivam a redução dos erros na estimativa da curvatura e a redução da anisotropia do campo dessa variável.

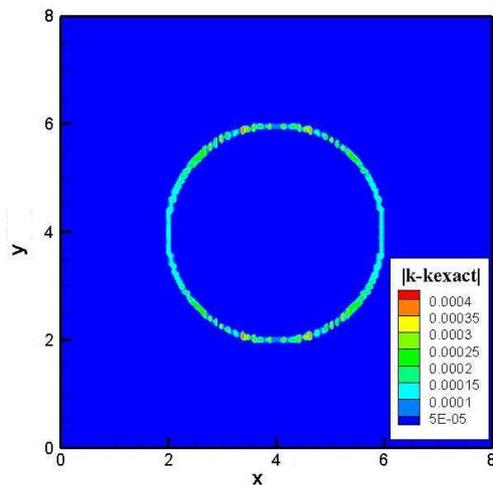
Visando à redução do erro na avaliação do valor da curvatura da interface em volumes onde a condição  $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  não é obedecida, foi utilizada uma aproximação semelhante à empregada por Ferdowsi e Bussmann (2008) para o aprimoramento do cálculo das componentes do vetor normal à interface para uma situação análoga. Segundo esta abordagem, a curvatura da interface em um volume em que a condição citada anteriormente não é satisfeita (Figura 33) pode ser aproximada por uma expansão em série de Taylor avaliada no centro do volume mais próximo e que obedece à condição imposta ao valor da função altura.

---

<sup>27</sup> Na Figura 32(a), as magnitudes mais altas das velocidades espúrias não são reproduzidas nos lados esquerdo e direito da gota devido à distribuição da fração volumétrica nos volumes que discretizam essas regiões. Caso a gota fosse levemente transladada para um dos lados, as velocidades espúrias atingiriam altas magnitudes também nessas regiões.



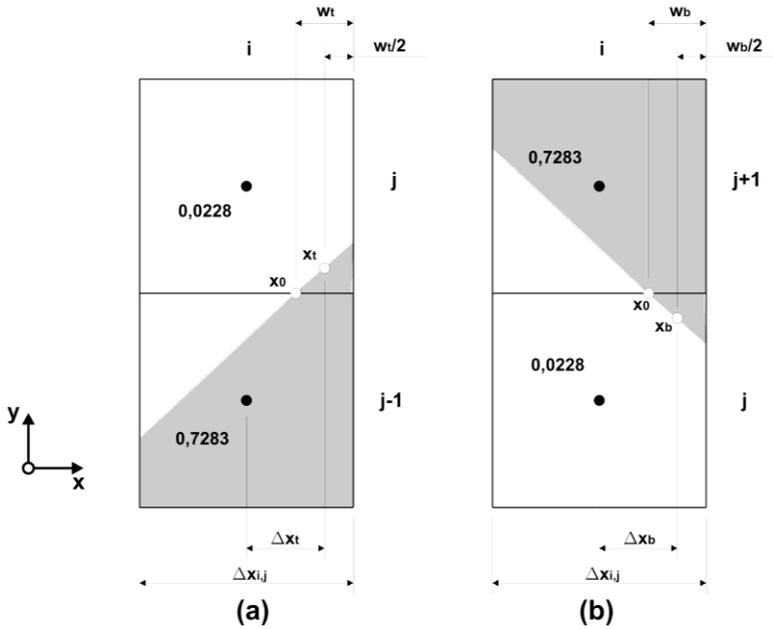
(a)



(b)

**Figura 32.** (a) Campo de velocidades espúrias e (b) Campo de erros da curvatura para o caso da gota estática utilizando o método HF para avaliar a curvatura da interface (malha com  $160 \times 160$  volumes).

Tome-se como exemplo as duas situações ilustradas na Figura 33.



**Figura 33.** Exemplos de volumes em que a condição para a função altura não é satisfeita.

Em ambas as configurações ilustradas nessa figura,  $H_i < h_{j-1/2}$  (considerando  $|n_y| > |n_x|$ ). Para a configuração (a), a curvatura da interface no volume (i,j) pode ser calculada por

$$\kappa_{i,j} = \kappa_{i,j-1} + \left. \frac{d\kappa}{dx} \right|_{i,j-1} \Delta x_t, \quad (4.1)$$

e, para a configuração (b), a curvatura da interface é dada por

$$\kappa_{i,j} = \kappa_{i,j+1} + \left. \frac{d\kappa}{dx} \right|_{i,j+1} \Delta x_b, \quad (4.2)$$

onde  $\kappa_{i,j-1}$  ou  $\kappa_{i,j+1}$  é a curvatura da interface no volume em que a condição  $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  é respeitada.

Nas equações (4.1) e (4.2), a derivada da curvatura em relação à direção  $x$  é expressa por

$$\left. \frac{d\kappa}{dx} \right|_{i,j} = -\frac{H_{xxx}}{[1+H_x^2]^{3/2}} + \frac{3 \cdot H_{xx}^2 \cdot H_x}{[1+H_x^2]^{5/2}}. \quad (4.3)$$

O primeiro termo do lado direito desta equação envolve a derivada terceira da função altura em relação a  $x$ , cujo cálculo só é possível se um estêncil maior do que o estêncil de  $3 \times 7$  volumes for utilizado. Para tanto, um estêncil de  $5 \times 7$  volumes (para  $|n_y| > |n_x|$ ) ou de  $7 \times 5$  volumes (para  $|n_x| > |n_y|$ ) deve ser empregado. Assim, para uma malha uniformemente espaçada,

$$H_{xxx} = \frac{H_{i+2} - H_{i-2} - 2 \cdot H_{i+1} + 2 \cdot H_{i-1}}{2 \cdot (\Delta x)^3}. \quad (4.4)$$

Já os comprimentos  $\Delta x_t$  e  $\Delta x_b$  (onde  $t$  indica *top* e  $b$  indica *bottom*) das equações (4.1) e (4.2) podem ser obtidos por semelhança de triângulos, conforme Ferdowsi e Bussmann (2008), e são expressos por

$$\Delta x_t = \frac{1}{2(\beta + 1)} \Delta x_{i,j}, \quad (4.5)$$

$$\Delta x_b = \frac{\beta}{2(\beta + 1)} \Delta x_{i,j}, \quad (4.6)$$

onde

$$\beta = \begin{cases} \sqrt{\frac{0,5 \cdot [1 - \text{sinal}(n_y)] - f_{i,j}}{0,5 \cdot [1 + \text{sinal}(n_y)] - f_{i,j-1}}} \left| \frac{\Delta x_{i,j} \cdot \Delta y_{i,j}}{\Delta x_{i,j-1} \cdot \Delta y_{i,j-1}} \right|, & \text{se } 0 < f_{i,j}, f_{i,j-1} < 1 \\ \sqrt{\frac{0,5 \cdot [1 - \text{sinal}(n_y)] - f_{i,j+1}}{0,5 \cdot [1 + \text{sinal}(n_y)] - f_{i,j}}} \left| \frac{\Delta x_{i,j+1} \cdot \Delta y_{i,j+1}}{\Delta x_{i,j} \cdot \Delta y_{i,j}} \right|, & \text{se } 0 < f_{i,j}, f_{i,j+1} < 1 \end{cases}. \quad (4.7)$$

Ressalta-se que essa abordagem será empregada apenas para aqueles volumes em que  $0 < f_{i,j} < 1$ , pois a desobediência da condição

$h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  pode ocorrer em volumes ocupados por um único fluido ( $f_{i,j} = 1$  ou  $f_{i,j} = 0$ ) e que possuam pelo menos uma das componentes do vetor normal à interface não-nula. A modelagem apresentada até este ponto é válida para volumes em que  $H_i < h_{j-1/2}$ .

Quando  $H_i > h_{j+1/2}$ , observou-se que melhores resultados eram obtidos calculando-se a curvatura do volume  $(i,j+1)$  para  $n_y < 0$  (ou do volume  $(i,j-1)$  para  $n_y > 0$ ), para o qual a condição  $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  é satisfeita, utilizando a abordagem proposta neste item e fazendo, para o volume  $(i,j)$ ,

$$\kappa_{i,j} = \begin{cases} \kappa_{i,j+1}, & \text{se } n_y < 0 \\ \kappa_{i,j-1}, & \text{se } n_y > 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Essa modelagem visa a reduzir os erros na avaliação da curvatura. Em relação à anisotropia do campo de curvatura, a modificação introduzida neste modelo consiste em uma filtragem do campo. Ou seja, o valor final da curvatura da interface no volume  $(i,j)$  é igual à média da curvatura dos volumes cujo centro encontra-se dentro de um determinado raio,  $R_{\text{filtro}}$ , tomado a partir do centro do volume  $(i,j)$ . Nessa média foram considerados os volumes com curvatura não-nula e foram utilizados os valores antigos (e não os atualizados após a média) da curvatura.

Deve-se salientar que este novo método é mais oneroso computacionalmente do que o método HF original, pois é necessário calcular a derivada terceira da função altura a partir de um estêncil maior. Além disso, o cálculo da derivada da curvatura da interface, bem como a aplicação de um filtro, encarecem a simulação.

#### 4.2. COMPONENTES DA FORÇA DEVIDA À TENSÃO INTERFACIAL

Conforme mencionado no segundo capítulo, por ter sido empregado um arranjo desconstruído de variáveis na solução do escoamento, as componentes da força devida à tensão interfacial foram avaliadas nos centros das faces dos volumes de controle para a malha da fração volumétrica.

Assim, a curvatura da interface também deve ser avaliada nessa posição, sendo igual a uma média da curvatura – avaliada no centro dos

volumes da malha para a pressão – ponderada pelo tamanho do volume de controle vizinho:

$$\kappa_{i+1/2,j} = \frac{\kappa_{i+1,j}\Delta x_{i,j} + \kappa_{i,j}\Delta x_{i+1,j}}{\Delta x_{i,j} + \Delta x_{i+1,j}}, \quad (4.9)$$

para a malha da componente horizontal da velocidade,

$$\kappa_{i,j+1/2} = \frac{\kappa_{i,j+1}\Delta y_{i,j} + \kappa_{i,j}\Delta y_{i,j+1}}{\Delta y_{i,j} + \Delta y_{i,j+1}}, \quad (4.10)$$

para a malha da componente vertical da velocidade. Nessas equações os subscritos referem-se à malha para a pressão. As equações (4.9) e (4.10) correspondem a interpolações lineares.

### 4.3. AVALIAÇÃO DOS MODELOS DE CURVATURA

O desempenho dos quatro modelos de curvatura apresentados foi avaliado por meio de três testes clássicos: o da gota estática, da bolha ascendente e da onda capilar. Esses testes são apresentados nos próximos itens, juntamente com os resultados das simulações.

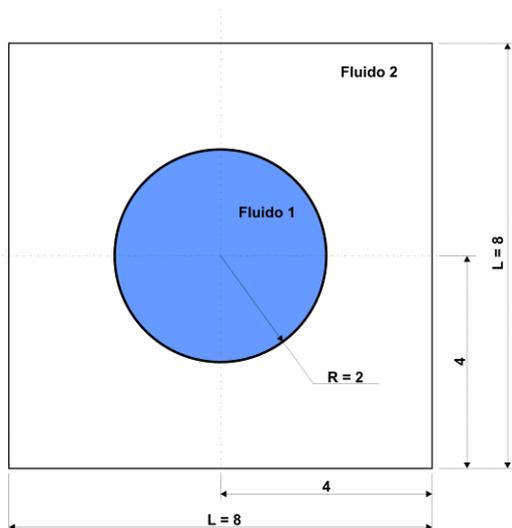
#### 4.3.1. Gota estática

Um dos casos clássicos para testar métodos que estimam a curvatura da interface é o caso da gota estática. Neste teste, uma gota bidimensional repousa em equilíbrio no centro de um domínio quadrado, imersa em outro fluido, como ilustrado na Figura 34.

Como a aceleração da gravidade é desprezada, os efeitos da tensão interfacial são balanceados pelo gradiente de pressão. Logo, o campo de velocidade é nulo. Entretanto, erros no cálculo da curvatura da interface levam à geração das chamadas *correntes espúrias*, que são campos de velocidades não-nulos e irreais.

Harvie, Davidson e Rudman (2006) atribuíram a geração dessas correntes à utilização do modelo CSF para inserir os efeitos da tensão interfacial. Já Francois e colaboradores, em seu artigo também de 2006, mostram que o surgimento dessas correntes não-físicas não se restringe ao modelo CSF, concluindo que a ordem de magnitude das velocidades espúrias depende do método de estimativa da curvatura da interface e não do modelo de tensão interfacial. Eles chegaram a essa conclusão ao simular alguns casos utilizando os modelos de curvatura HF e de

convolução associados ao modelo CSF ou ao modelo SSF (*Sharp Surface Tension Force*)<sup>28</sup>.



**Figura 34.** Gota estática em equilíbrio.

O caso-teste da gota estática foi dividido em quatro subcasos, os quais diferem entre si pelos valores das propriedades físicas dos fluidos, conforme listados na Tabela 4-1:

**Tabela 4-1.** Gota estática: subcasos simulados.

Caso	Massa específica do fluido 2	Viscosidade do fluido 1	Viscosidade do fluido 2
Invíscido 1	0,001	-	-
Viscoso 1	0,001	0,01	0,001
Invíscido 2	0,1	-	-
Viscoso 2	0,1	0,01	0,001

Os seguintes parâmetros são iguais em todas as simulações:  $\rho_1 = 1$ ,  $\sigma = 73$  (resultando em um salto de pressão exato na gota igual a

<sup>28</sup> Neste modelo, os efeitos da tensão interfacial são considerados apenas em volumes cortados pela interface e não numa região em torno da interface, como é o caso do modelo CSF.

36,5),  $\Delta t = 10^{-6}$ , critério de convergência para as velocidades de  $10^{-14}$ , critério de convergência para a pressão de  $10^{-12}$  e critério de convergência para a fração volumétrica de  $10^{-12}$ . Considerou-se condição de não-deslizamento e impermeabilidade em todas as fronteiras do domínio e um campo inicial de  $\mathbf{F}_{sv}$ .

Com o objetivo de estimar a ordem dos erros das principais variáveis do escoamento, cinco diferentes tamanhos de malha foram empregados: 20 x 20, 40 x 40, 80 x 80, 160 x 160 e 320 x 320 volumes.

Conforme mencionado anteriormente, neste teste o campo de velocidade deve ser nulo. Porém, erros na estimativa da curvatura da interface favorecem a geração de correntes espúrias. Portanto, a precisão do modelo de curvatura pode ser medida em termos da norma dos erros do campo de velocidade: quanto menor este erro, mais precisa é a avaliação da curvatura pelo modelo. Para esse propósito, serão utilizadas as normas  $L_2$  e  $L_\infty$ , as quais, para o módulo da velocidade, são expressas por

$$L_2(\|\mathbf{u}\|) = \sqrt{\sum_{n=1}^N \|\mathbf{u}\|^2} / N \quad (4.11)$$

$$L_\infty(\|\mathbf{u}\|) = \max(\|\mathbf{u}\|) \quad (4.12)$$

onde  $N$  é o número total de volumes.

Já os valores do salto de pressão são comparados de duas formas (FRANCOIS et al., 2006):

$$\Delta P_{total} = P_{in}^t - P_{out}^t \quad (4.13)$$

onde o subscrito *in* indica dentro da gota (tomando-se a média dos volumes com  $r \leq R$ ) e *out* significa fora da gota (tomando-se a média dos volumes com  $r > R$ ) e

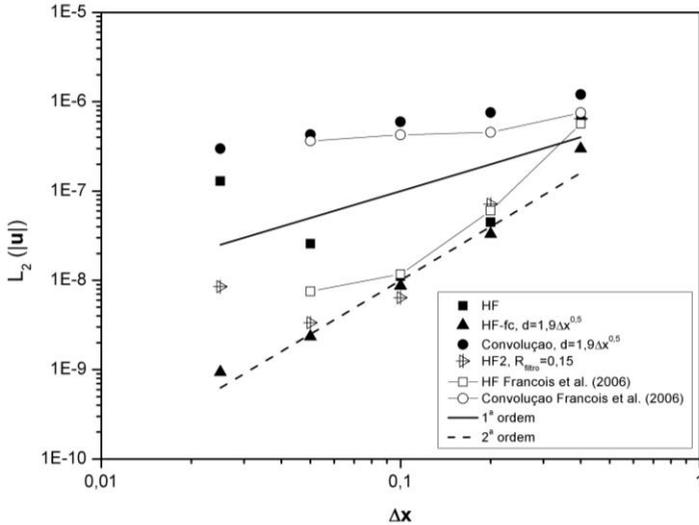
$$\Delta P_{parcial} = P_{in}^p - P_{out}^p \quad (4.14)$$

onde o subscrito *in* denota dentro da gota (tomando-se a média dos volumes com  $r \leq R/2$ ) e *out* indica fora da gota (tomando-se a média dos volumes com  $r \geq 3R/2$ ), de forma a evitar a região de transição da fração volumétrica. Repare que a diferença expressa pela equação (4.13) abrange a interface da gota, enquanto que a expressão (4.14) não a contempla.

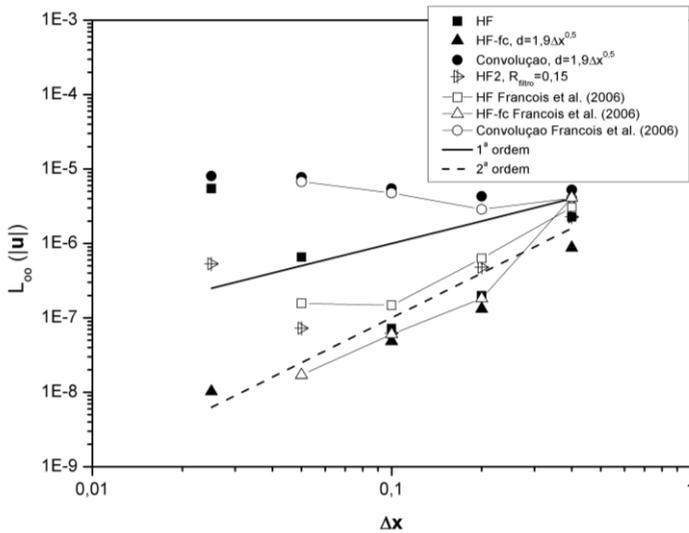
Francois et al. (2006) apresentaram em seu trabalho as curvas da norma dos erros da velocidade e do salto de pressão apenas para o primeiro caso (Inviscido 1). Esses resultados são comparados aos obtidos neste trabalho na Figura 35.

Nessa figura, as linhas de 1ª e de 2ª ordem foram desenhadas apenas como referência para a tendência dos erros.

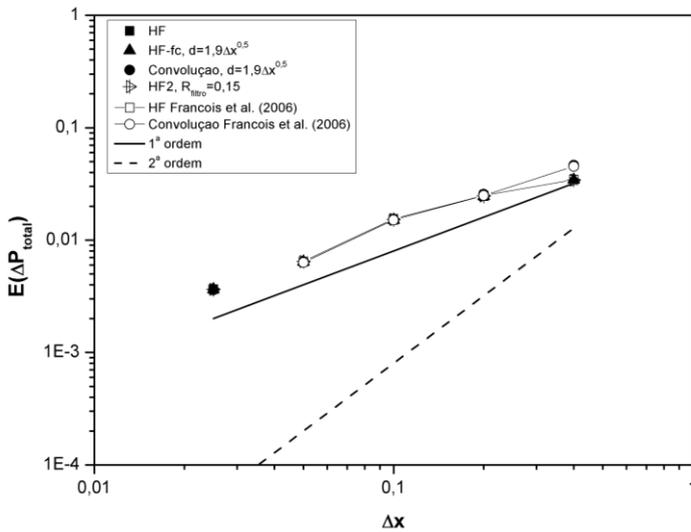
Os valores do comprimento do núcleo e do raio do filtro empregados nas simulações são mostrados nas legendas da Figura 35. Francois et al. (2006) também utilizaram um comprimento de núcleo igual a  $1,9(\Delta x)^{0,5}$  nas simulações empregando a técnica da convolução, onde  $\Delta x$  corresponde à resolução da malha. Contudo, não há informações acerca do valor deste parâmetro utilizado pelo modelo HF-fc.



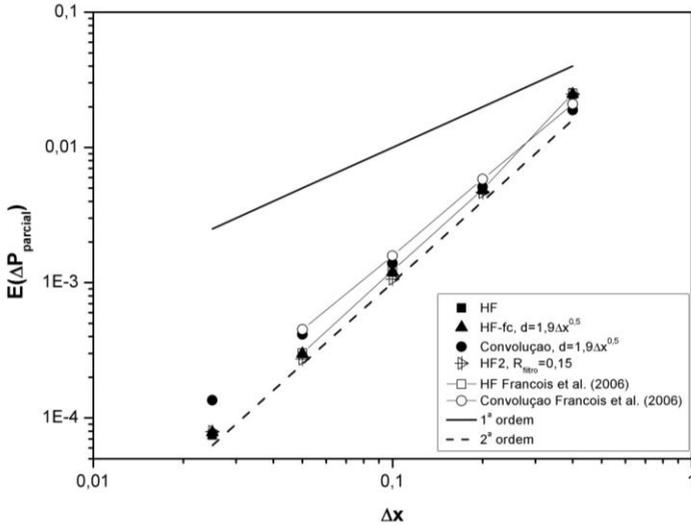
(a)



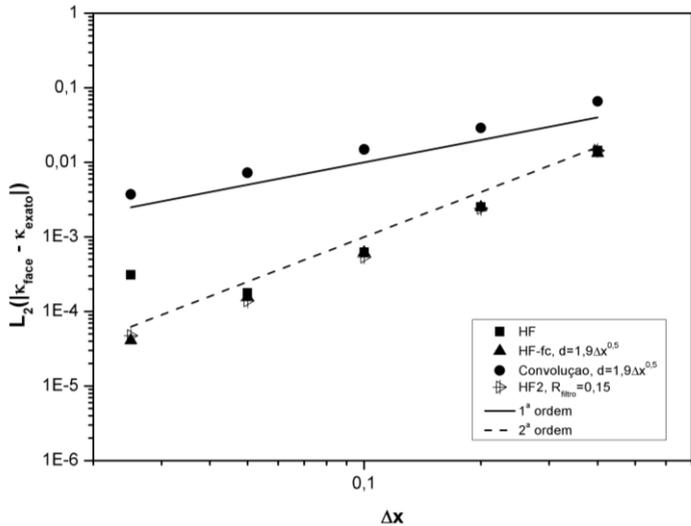
(b)



(c)



(d)



(e)

**Figura 35.** Normas dos erros para o caso Inviscido 1 após um passo de tempo: (a) norma  $L_2$  e (b) norma  $L_\infty$  da velocidade, (c) Erro  $\Delta P_{\text{total}}$ , (d) erro  $\Delta P_{\text{parcial}}$  e (e) norma  $L_2$  da curvatura avaliada nas faces do volume.

Como pode ser observado na Figura 35, apesar de haver grande concordância entre os resultados obtidos neste trabalho e aqueles obtidos por Francois e colaboradores para ambas as formas de cálculo do salto de pressão, há diferenças significativas entre os resultados para as normas dos erros da velocidade. Essa diferença é mais expressiva quando são comparados os erros obtidos com o método HF para a malha de 160 x 160 volumes ( $\Delta x = 0,05$ , Figura 35(a)): enquanto que os erros para esse método obtidos neste trabalho crescem quando são empregadas malhas mais finas do que 80 x 80 volumes, no artigo de Francois o erro obtido para a malha de 160 x 160 volumes mantém sua tendência decrescente, porém, a uma taxa menor do que as demais malhas.

Essa tendência crescente do erro do método HF para malhas finas também é observada na Figura 35(b) tanto nos resultados obtidos neste trabalho, quanto naqueles obtidos por Francois e colaboradores. Quando uma malha de 320 x 320 volumes é empregada, também é verificado um crescimento da norma  $L_2$  dos erros da curvatura, sugerindo que há alguma relação entre o erro na avaliação da curvatura da interface e a geração de correntes espúrias. A existência de tal relação é corroborada pela análise dos campos da norma da velocidade e dos erros da curvatura, ilustrados na Figura 32. Como pode ser constatado nessa figura, as regiões com maiores magnitudes da velocidade correspondem àquelas onde o erro da curvatura também é maior. Além disso, pode-se observar na Figura 32(a) a ocorrência de uma anisotropia local no campo de erros da curvatura, a qual é devida à estratégia adotada quando a condição expressa por  $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  não é satisfeita.

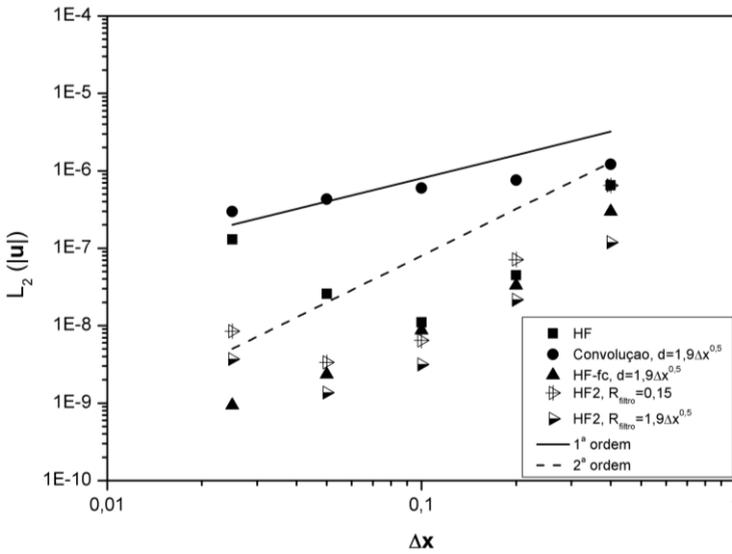
Os efeitos da anisotropia local na curvatura são significativamente reduzidos quando algum tipo de média – como as empregadas nos métodos HF2 e HF-fc – é aplicada ao campo de curvatura, como pode ser concluído dos resultados mostrados nas Figura 35(a) e (b). Essa conclusão também pode ser extraída dos resultados obtidos por Francois.

A partir de estudos com diferentes tamanhos de núcleo ( $R_{\text{filtro}}$ ), pode-se concluir que, com o aumento de seu tamanho, as correntes espúrias geradas quando do emprego do método HF2 diminuíam. Entretanto, este modelo aparenta ser menos eficiente do que o método HF-fc. Considerando os resultados e as constatações apresentados, esses dois modelos juntamente com o método HF representam melhores alternativas para a determinação da curvatura da interface do que a técnica da convolução, a qual resulta em erros de primeira ordem para

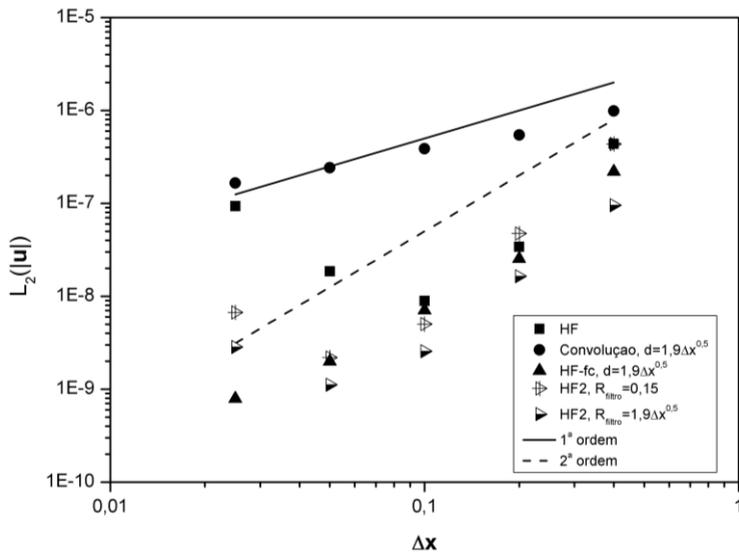
quatro dos cinco tipos de erros considerados. Apenas o erro de  $\Delta P_{\text{parcial}}$  obtido pela técnica da convolução seguiu uma tendência de segunda ordem. Este fato, porém, é devido à não inserção dos valores da pressão na interface no cálculo desse erro, lembrando que a principal característica da técnica é a difusão da interface para o cálculo de sua curvatura.

Todas essas conclusões também podem ser extraídas dos resultados para os demais casos listados na Tabela 4-1, como mostrado na Figura 36.

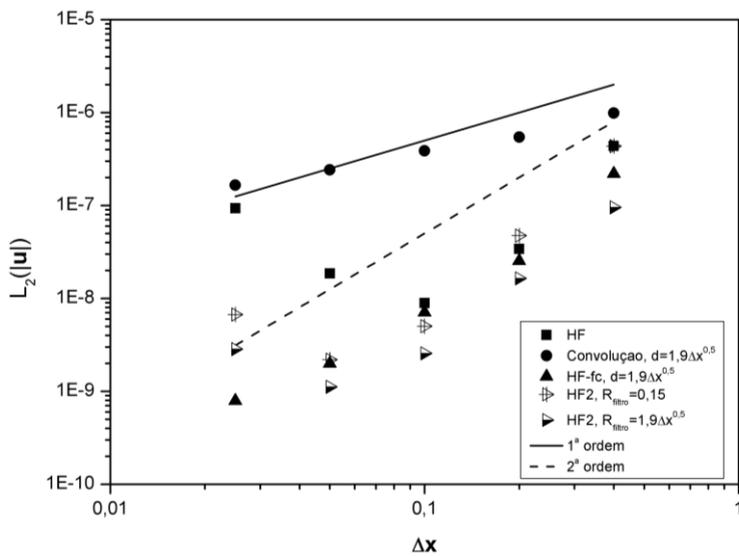
Comparando-se os erros obtidos por cada um dos modelos para os quatro casos, conclui-se que: a razão de viscosidades entre os fluidos não desempenha um papel significativo na geração de correntes espúrias após um único passo de tempo e há uma pequena diferença entre os resultados quando a razão entre as massas específicas aumenta.



(a)



(b)



(c)

**Figura 36.** Norma  $L_2$  dos erros da velocidade: Casos (a) Viscoso 1, (b) Inviscido 2 e (c) Viscoso 2.

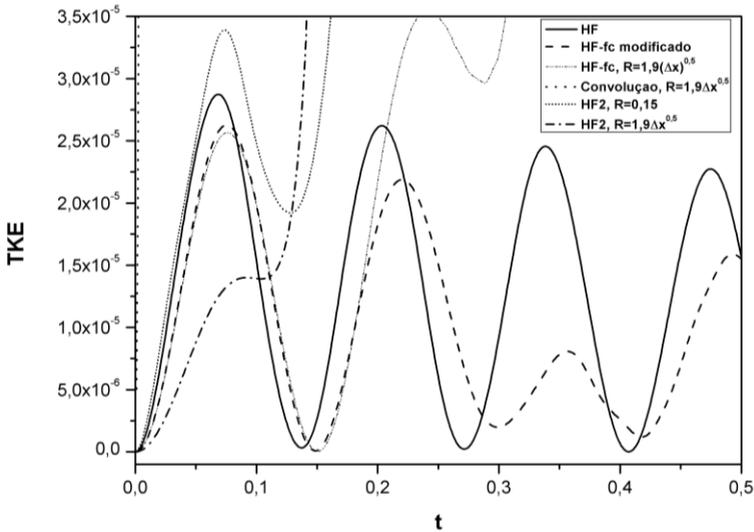
As correntes espúrias também podem ser medidas pela Energia Cinética Total (*TKE*) do escoamento, como mostrado por Francois et al. (2006):

$$TKE = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \rho_i V_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i \quad (4.15)$$

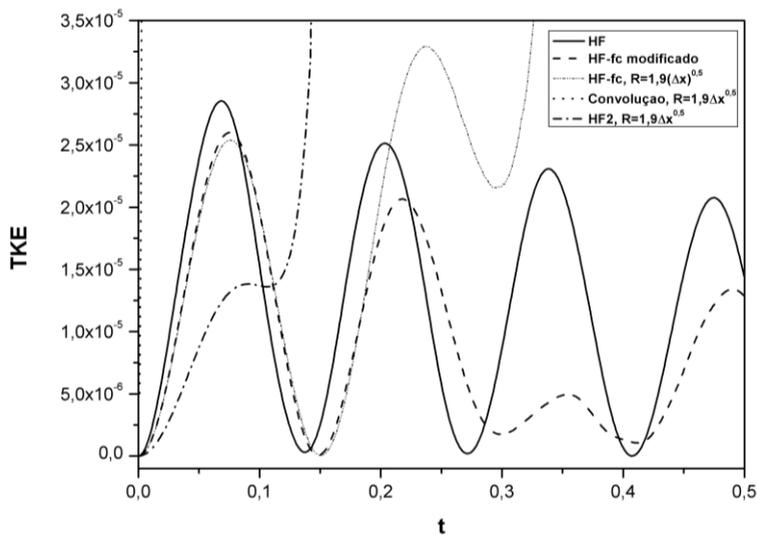
onde *i* indica o volume no qual a energia cinética é avaliada e *V* representa seu volume.

A determinação da evolução de *TKE* ao longo do tempo testa a capacidade do modelo de curvatura de amortecer as correntes espúrias, que corresponde ao comportamento desejável, ou de amplificá-las.

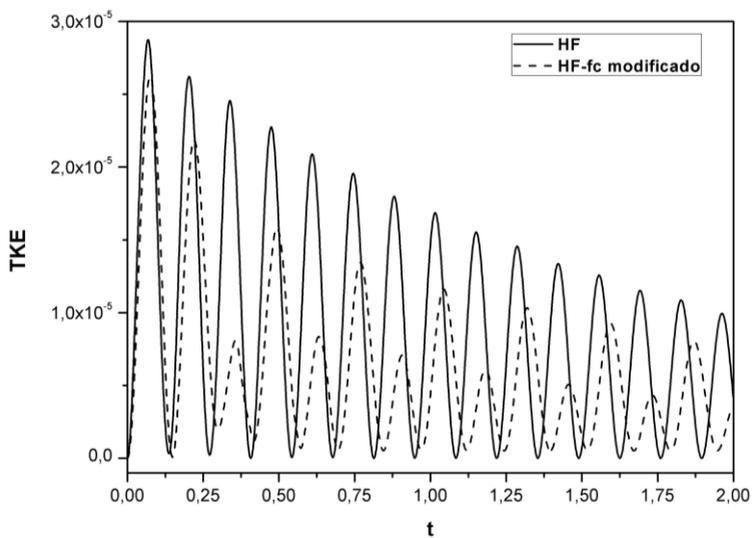
Após 500 passos de tempo, como ilustrado para os casos Invíscido 1 e Viscoso 1 na Figura 37 (a) e (b), as correntes espúrias são amortecidas apenas quando o método HF é empregado. Esses resultados foram obtidos utilizando-se uma malha com 40 x 40 volumes e um passo de tempo de 0,001.



(a)



(b)



(c)

**Figura 37.** Evolução temporal de TKE para os casos (a) Inviscido 1 e (b) Viscoso 1 após 500 passos de tempo e (c) para o caso Inviscido 1 após 2000 passos de tempo.

Com o decorrer do tempo, as correntes espúrias são amplificadas quando a técnica da convolução (a linha pontilhada aproximadamente vertical, próxima à origem de ambos os gráficos) e os métodos HF-fc e HF2 são empregados. Enquanto que a energia cinética total obtida pelos dois primeiros modelos cresce indefinidamente, a energia resultante do uso do modelo HF2 cresce a uma taxa menor até se estabilizar em valores de  $TKE$  da ordem de  $10^{-2}$ .

Na Figura 37 também é mostrado o resultado obtido com o modelo HF-fc modificado (linha tracejada), que corresponde ao método HF-fc com um núcleo cujo tamanho diminui ao longo do tempo da seguinte forma:

$$d = (1,9\sqrt{\Delta x})\exp(-2t), \quad (4.16)$$

onde o fator -2, que multiplica o tempo  $t$ , foi escolhido aleatoriamente.

Ao limitar a ação do filtro ao longo do tempo, as correntes espúrias são amortecidas e, portanto, a energia cinética total decai a uma taxa maior do que aquela obtida com o método HF. Tal comportamento decrescente também é observado quando malhas com  $160 \times 160$  volumes são empregadas. E persiste após 2000 passos de tempo para uma malha com  $40 \times 40$  volumes, como pode ser visto na Figura 37(c). Os tempos totais de computação das simulações, cujos resultados são mostrados nessa figura, foram de aproximadamente 3700 s para o método HF e de 5200 s para o método HF-fc modificado.

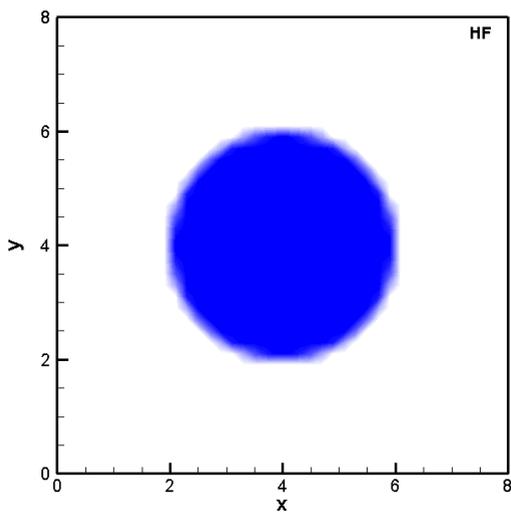
Por outro lado, o emprego de filtros temporários não foi capaz de produzir o mesmo efeito nos resultados obtidos com a técnica da convolução e com o método HF2.

O efeito da amplificação das correntes espúrias pode ser drástico, levando à completa deformação da interface da gota, como é mostrado na Figura 38.

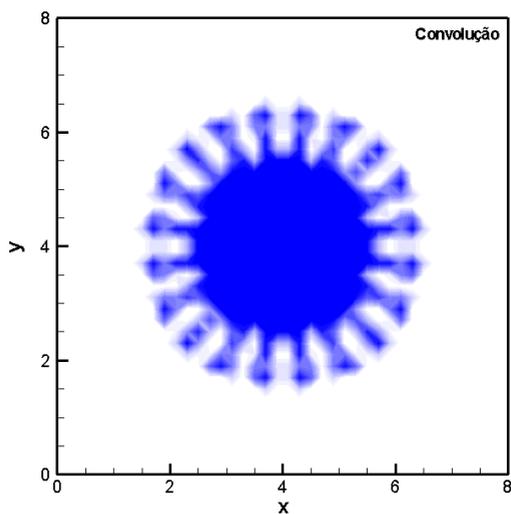
Considerando todos os resultados apresentados nesta seção, pode-se concluir que:

1. O comportamento crescente dos erros da velocidade e da curvatura com o refino da malha para o método HF está associado à anisotropia local do campo de curvatura;
2. A aplicação de um filtro a este campo resultou na redução dos erros com o aumento da resolução da malha para o método HF;
3. O melhor filtro consiste naquele que atribui pesos aos volumes vizinhos inversamente proporcionais a sua

distância do volume de interesse, no qual a curvatura está sendo avaliada. Tal filtro é empregado pelo método HF-fc;



(a)



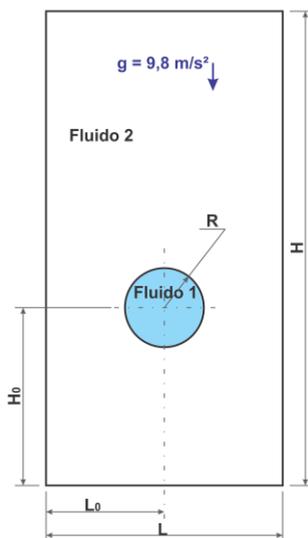
(b)

**Figura 38.** Campo de  $f$  após 500 passos de tempo para o caso Invíscido 1: (a) método HF e (b) técnica da convolução ( $d=1,9\Delta x^{0,5}$ ).

4. Como demonstrado pela evolução de  $TKE$  ao longo do tempo, a atuação desse filtro deve ser restringida a alguns passos de tempo (método HF-fc modificado);
5. Embora não haja diferença entre os resultados para os casos invíscido e viscoso após um único passo de tempo, quando processos mais longos são considerados, verifica-se que a viscosidade ajuda a dissipar as correntes espúrias.

#### 4.3.2. Bolha ascendente em um fluido em repouso

Este teste consiste na simulação do escoamento de uma bolha imersa em um fluido mais denso (Figura 39). Enquanto a bolha ascende em direção ao topo do domínio, ela se deforma. A taxa com a qual essa deformação ocorre depende da magnitude do coeficiente de tensão interfacial: quanto maior for esse parâmetro, menor será a deformação da bolha.



**Figura 39.** Bolha ascendente.

A escala de importância dos parâmetros envolvidos nesse escoamento pode ser indicada por dois números adimensionais: o número de Eötvös ( $Eu$ ) e o número de Morton ( $M$ ). Esses parâmetros adimensionais são expressos por

$$Eo = \frac{\rho_2 \cdot g \cdot d^2}{\sigma}, \quad (4.17)$$

onde  $d$  é o diâmetro da bolha, e

$$M = \frac{g \cdot \mu_2^4}{\rho_2 \cdot \sigma^3}. \quad (4.18)$$

Como pode ser observado dessas expressões, o número de Morton envolve apenas propriedades físicas dos fluidos além da aceleração da gravidade, enquanto que o número de Eötvös (também conhecido como número de Bond) representa o tamanho adimensional da bolha (UNVERDI; TRYGGVASON, 1992).

Dois casos foram simulados nesta etapa, conforme os publicados por Francois et al. (2006), Ginzburg e Wittum (2001) e Unverdi e Tryggvason (1992). Os valores dos parâmetros empregados nas simulações do caso Francois são listados na Tabela 4-2, enquanto que os parâmetros empregados no caso Ginzburg/Unverdi são mostrados nas Tabela 4-3 e Tabela 4-4.

**Tabela 4-2.** Bolha ascendente: valores dos parâmetros do caso Francois.

Parâmetro	Valor
Massa específica do fluido 1	1,226
Massa específica do fluido 2	1000
Viscosidade do fluido 1	1,137
Viscosidade do fluido 2	$1,78 \times 10^{-5}$
Coefficiente de tensão interfacial	728
Passo de tempo	$10^{-5}$
Critério de convergência para u e v	$10^{-4}$
Critério de convergência para P	1
Critério de convergência para $f$	$10^{-5}$
Tamanho da malha	40 x 60 e 80 x 120 volumes
Raio da bolha	1/3
Comprimento do domínio	2
Altura do domínio	3
Posição inicial da bolha em x ( $L_0$ )	1
Posição inicial da bolha em y ( $H_0$ )	1
Número de Eötvös	5,98

**Tabela 4-3.** Bolha ascendente: valores dos parâmetros do caso Ginzburg/Unverdi.

Caso	$Eo$	$M$	$\mu_2/\mu_1$	$\sigma$ (N/m)	$\Delta t$ (s)	Crit <sub>u,v</sub> (m/s)	Malha
A	1	$10^{-7}$	88	0,109	$5 \times 10^{-5}$	$10^{-5}$	32 x 64
B	1	$10^{-4}$	493	0,109	$10^{-4}$	$10^{-6}$	32 x 64
C	10	$10^{-4}$	88	0,0109	$5 \times 10^{-5}$	$10^{-5}$	64 x 128
D	10	$10^{-1}$	493	0,0109	$5 \times 10^{-5}$	$10^{-6}$	32 x 64
E	104	$10^{-1}$	85	$1,05 \times 10^{-3}$	$5 \times 10^{-5}$	$10^{-5}$	256x512
F	104	$10^2$	479	$1,05 \times 10^{-3}$	$5 \times 10^{-5}$	$10^{-6}$	32 x 64

**Tabela 4-4.** Bolha ascendente: valores das propriedades, das dimensões e dos parâmetros numéricos para o caso Ginzburg/Unverdi.

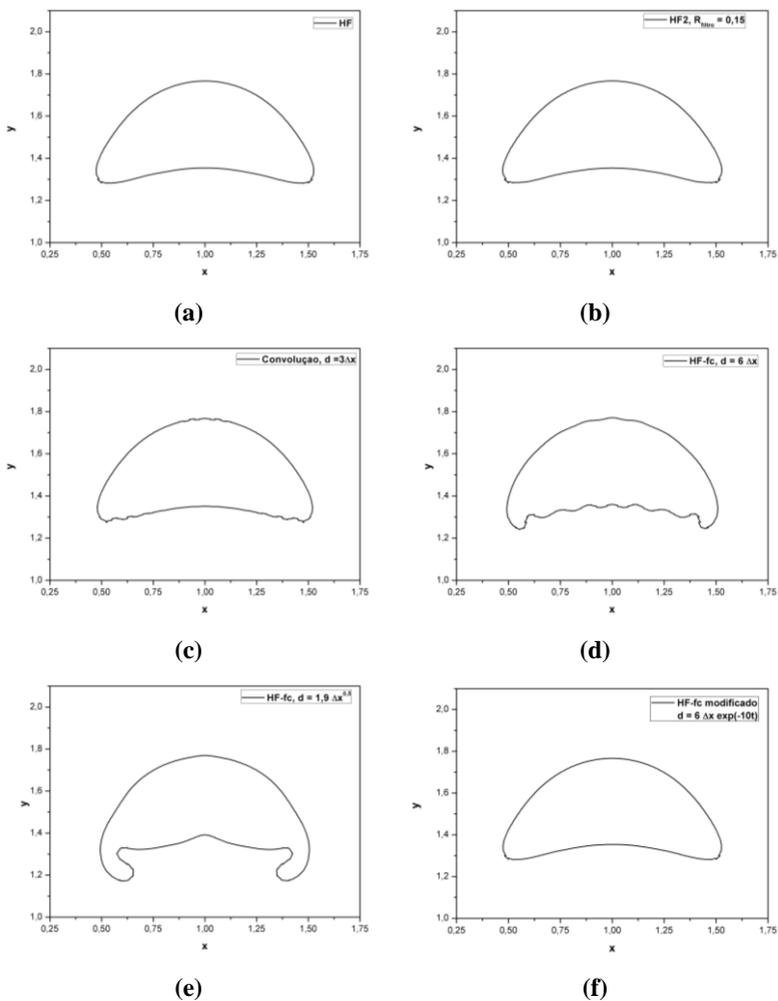
Parâmetro	Valor
Massa específica do fluido 1	25 kg/m <sup>3</sup>
Massa específica do fluido 2	1000 kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade do fluido 1	$1,22 \times 10^{-4}$ Pa s
Passo de tempo	$5 \times 10^{-5}$ s para todos os sub-casos, com exceção do caso A, em que foi usado $10^{-4}$ s
Critério de convergência para P	0,001 Pa
Critério de convergência para $f$	$10^{-5}$
Raio da bolha	$1,67 \times 10^{-3}$ m
Comprimento do domínio	0,01 m
Altura do domínio	0,02 m
Posição inicial da bolha em $x$ ( $L_0$ )	0,005 m
Posição inicial da bolha em $y$ ( $H_0$ )	0,0075 m

Em ambos os casos foi atribuída condição de deslizamento e impermeabilidade a todas as fronteiras do domínio e em todas as simulações empregaram-se malhas cartesianas uniformes.

### Caso Francois

As simulações numéricas deste caso foram realizadas até um tempo de 0,5. Uma vez que o número de Eötvös para este caso é igual a 5,98, os efeitos da tensão interfacial são relevantes.

A Figura 40 ilustra a interface da bolha no final das simulações obtida empregando-se cada um dos modelos de curvatura e uma malha de 80 x 120 volumes. A linha que define a interface nesta figura foi construída pela técnica PLIC (ver capítulo 3).



**Figura 40.** Interface da bolha do caso Francois obtida com (a) método HF, (b) HF2 ( $R_{\text{filtro}} = 0,15$ ), (c) técnica da convolução ( $d = 3\Delta x$ ), (d) HF-fc ( $d = 6\Delta x$ ), (e) HF-fc ( $d = 1,9\Delta x^{0,5}$ ) e (f) HF-fc modificado ( $d = 6\Delta x \exp[-10t]$ ).

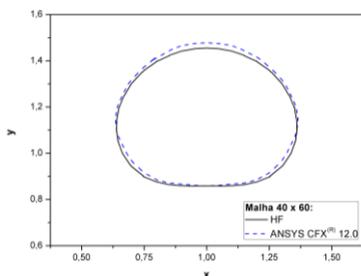
Enquanto que as interfaces obtidas pelos modelos HF, HF2 e HF-fc modificado não apresentam diferenças significativas entre si, os outros dois modelos exibem expressivas diferenças na forma da

interface. Os resultados para o método HF e para a técnica da convolução concordam com os publicados por Francois e colaboradores.

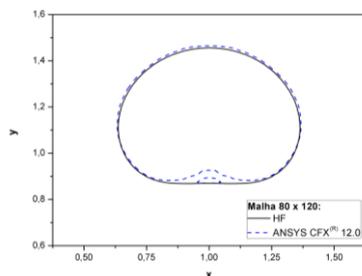
As ondulações mostradas nas Figura 40 (c) e (d) parecem ser originadas pelas correntes espúrias geradas quando um filtro por convolução é aplicado ao longo de toda a simulação. Esta conclusão é corroborada pelo resultado obtido pelo modelo HF-fc modificado, o qual não apresenta ondulações na interface uma vez que o filtro atua apenas até um tempo de 0,18.

Por outro lado, o resultado produzido pelo modelo HF-fc na Figura 40 (e) sugere que o comprimento do núcleo foi superdimensionado e, conseqüentemente, volumes que estão muito afastados daquele em que é avaliada a curvatura são considerados em seu cálculo.

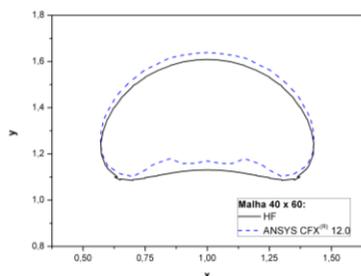
Na Figura 41, a interface da bolha obtida com o método HF para malhas com 40 x 60 e 80 x 120 volumes é comparada com a curva de fração volumétrica igual a 0,5, resultante da simulação do problema com o código comercial ANSYS CFX® 12.0 para malhas com mesmos tamanhos.



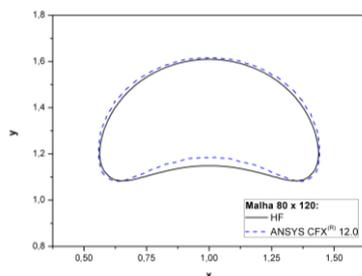
(a)  $t = 0,2$  (40 x 60 volumes)



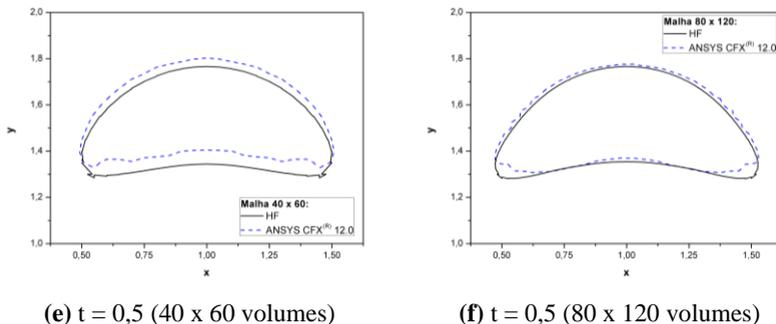
(b)  $t = 0,2$  (80 x 120 volumes)



(c)  $t = 0,35$  (40 x 60 volumes)



(d)  $t = 0,35$  (80 x 120 volumes)



**Figura 41.** Comparação entre os resultados obtidos com o método HF (linha contínua) e com o *software* ANSYS CFX® 12.0 (linha tracejada): (a), (c) e (e) malha com 40 x 60 volumes; (b), (d) e (f) malha com 80 x 120 volumes.

Como esse *software* comercial não dispõe de um método que limita a espessura da interface a um volume de controle, a interface mostrada na figura foi obtida traçando-se uma isolinha com fração volumétrica igual a 0,5.

No cálculo da curvatura da interface, o código comercial ANSYS CFX® emprega um método de suavização do campo de fração volumétrica, o qual não é descrito em seu manual. A presença de ondulações na interface da bolha obtida com o código comercial sugere que o método usado na avaliação da curvatura é propenso à ocorrência de correntes espúrias. Porém, os efeitos desse campo espúrio são atenuados com o refino da malha, como pode ser constatado da Figura 41.

### Caso Ginzburg/Unverdi

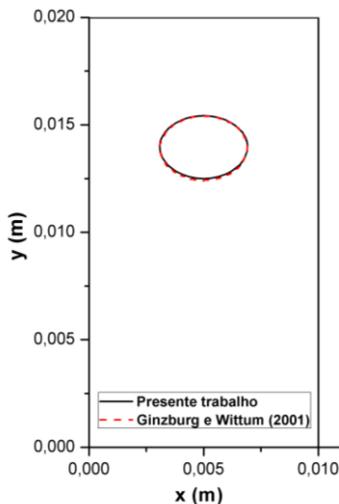
Enquanto que no caso anterior o número de Eötvös era mantido constante, neste caso ele varia entre 1 e 104. Quanto menor o valor deste número adimensional, maiores são os efeitos da tensão interfacial ou menos deformada é a bolha. Já o número de Morton variou de  $10^{-7}$  a 100 nos casos simulados.

Esses dois números adimensionais em conjunto definem o regime de escoamento da bolha: nos casos A e B, a bolha mantém sua forma esférica no tempo final da simulação (0,06 s); nos casos C e D, ela atinge o regime elipsoidal enquanto que, nos casos E e F, a bolha adquire a forma de uma calota esférica. Nos últimos quatro casos, simulou-se o problema por 1800 passos de tempo.

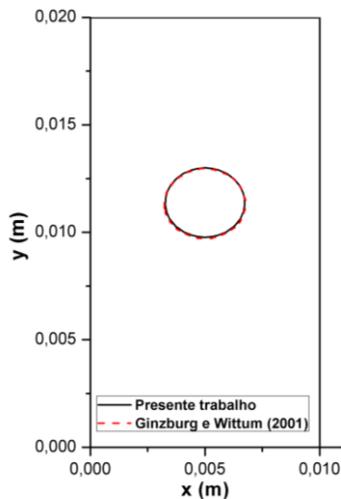
A Figura 42 mostra a forma final da bolha obtida no presente trabalho empregando-se o método HF para cada um dos casos listados na Tabela 4-3. Para todos os casos, com exceção do caso E, também é ilustrada a interface obtida por Ginzburg e Wittum (linha vermelha tracejada). Como pode ser observado, há excelente concordância entre os resultados.

A bolha do caso E desenvolve uma “saia” após alguns passos de tempo. Esta característica também pode ser observada nos resultados obtidos por Ginzburg e Wittum (2001). Infelizmente esses resultados não puderam ser reproduzidos nesta figura. Estes resultados também concordam qualitativamente com aqueles obtidos por Unverdi e Tryggvason (1992).

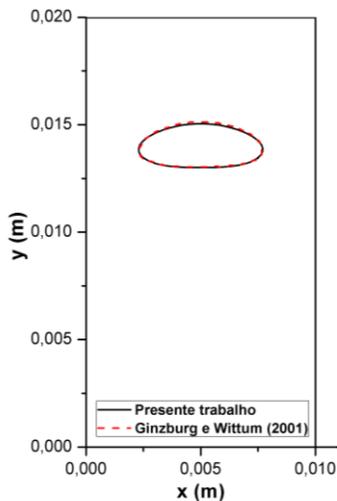
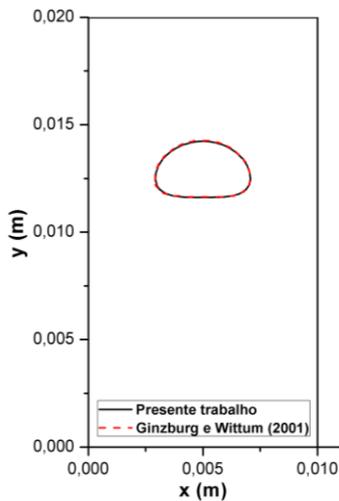
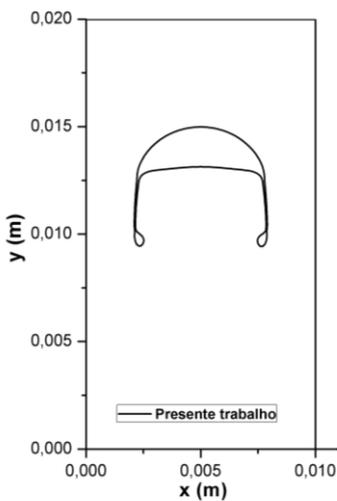
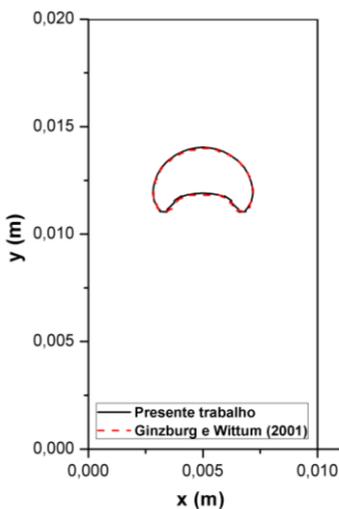
Como pode ser observado ao se comparar as Figura 42 (e) e (f), a posição final da bolha é quase a mesma quando o número de Morton varia de 0,1 a 100, mantendo-se o valor de  $Eo$  alto e constante. Para um alto valor desse número, o arrasto de forma é mais significativo do que o arrasto viscoso e, portanto, o escoamento não depende mais do valor do número de Morton.



(a)  $Eo = 1, M = 10^{-7}$

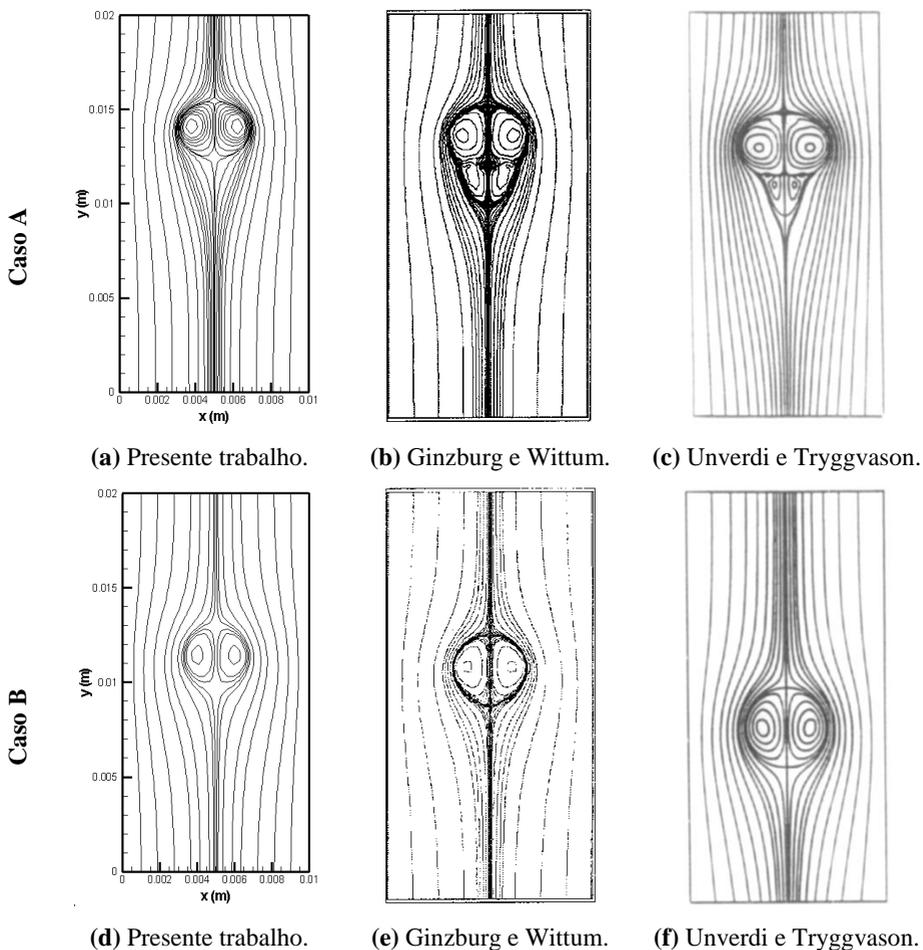


(b)  $Eo = 1, M = 10^{-4}$

(c)  $Eo = 10, M = 10^{-4}$ (d)  $Eo = 10, M = 10^{-1}$ (e)  $Eo = 104, M = 10^{-1}$ (f)  $Eo = 104, M = 10^2$ 

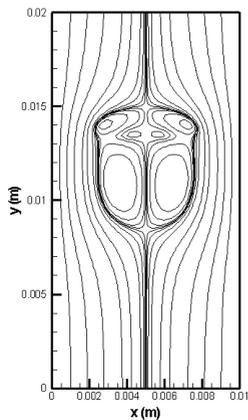
**Figura 42.** Comparação entre a forma final da interface da bolha ascendente obtida neste trabalho (linha contínua) e por Ginzburg e Wittum (linha vermelha tracejada). Cada letra corresponde a um dos casos listados na Tabela 4-3.

Os resultados aqui apresentados também foram validados ao comparar-se as linhas de corrente<sup>29</sup> obtidas ao final da simulação com o método HF àquelas publicadas na literatura, conforme ilustrado na Figura 43. Salienta-se que, para uma melhor visualização, foram excluídas algumas linhas de corrente das figuras referentes aos resultados deste trabalho.

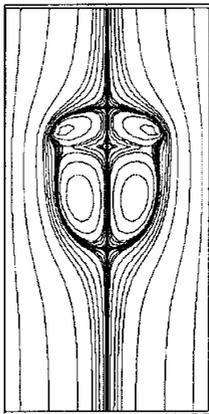


<sup>29</sup> As linhas de corrente foram obtidas tomando-se um referencial à velocidade média da bolha.

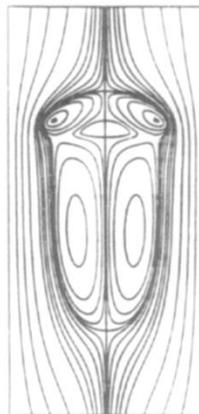
Caso C



(g) Presente trabalho.

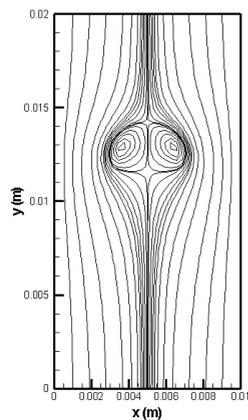


(h) Ginzburg e Wittum.

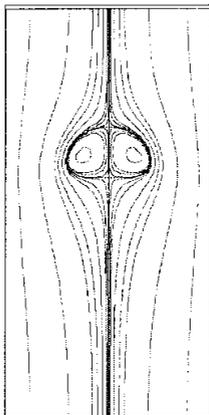


(i) Unverdi e Tryggvason.

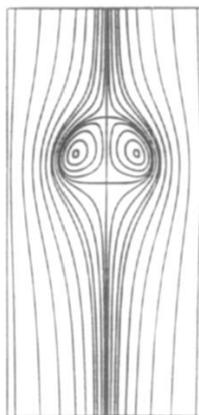
Caso D



(j) Presente trabalho.

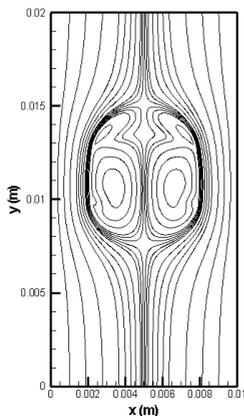


(k) Ginzburg e Wittum.

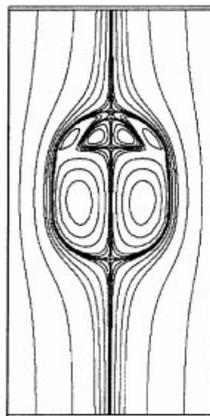


(l) Unverdi e Tryggvason.

Caso E

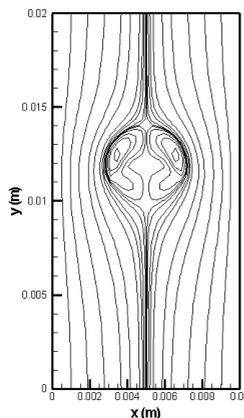


(m) Presente trabalho.

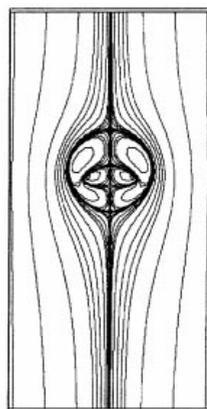


(n) Ginzburg e Wittum.

Caso F



(o) Presente trabalho.



(p) Ginzburg e Wittum.

**Figura 43.** Linhas de corrente do caso Ginzburg/Unverdi.

Como pode ser constatado desta figura, há concordância entre as linhas de corrente obtidas neste trabalho e as apresentadas na literatura para todos os casos com exceção do caso A. Para este caso, o algoritmo implementado nesta tese não foi capaz de reproduzir os vórtices formados na região inferior da bolha. A presença desses vórtices tende a reduzir a pressão na região inferior à bolha, desacelerando-a. Este raciocínio encontra respaldo quando são comparados os valores dos números de Reynolds e de Weber obtidos por Ginzburg e Wittum àqueles obtidos neste trabalho (Tabela 4-5 e Tabela 4-6). Os valores

desses números adimensionais são calculados quando a bolha alcança o regime permanente, ou seja, quando sua velocidade média atinge um valor constante (velocidade terminal).

O número de Reynolds é definido por

$$Re = \frac{\rho_2 \cdot d \cdot v_b}{\mu_2}, \quad (4.19)$$

onde  $v_b$  é a velocidade média da bolha e é expressa por

$$v_b = \frac{\int_V f \cdot v dV}{\int_V f dV}, \quad (4.20)$$

onde  $V$  é o volume da bolha. Por sua vez, o número de Weber é expresso por

$$We = \frac{\rho_2 \cdot d \cdot v_b^2}{\sigma}. \quad (4.21)$$

**Tabela 4-5.** Comparação dos valores de Re para o caso Ginzburg/Unverdi.

Caso	Re literatura	Re presente trabalho	Diferença Re (%)
A	42	45,33	7,93
B	4,46	4,54	1,79
C	21,55	22,95	6,50
D	3,50	3,52	0,57
E	22,50	20,08	10,76
F	3,58	3,40	5,03

**Tabela 4-6.** Comparação dos valores de We para o caso Ginzburg/Unverdi.

Caso	We literatura	We presente trabalho	Diferença We (%)
A	0,58	0,65	12,07
B	0,20	0,21	5
C	1,47	1,66	12,93
D	1,18	1,24	5,08
E	15,60	12,49	19,94
F	12,53	11,32	9,66

As maiores diferenças apresentadas entre os resultados obtidos nesta tese e os reportados por Ginzburg e Wittum (2001) correspondem ao caso E, aquele em que há a formação de uma “saia”. No artigo de Ginzburg e Wittum, ao final da simulação, essa saia se rompe e, por isso, os autores não puderam utilizar a técnica de *splines* proposta por eles para alinhar a malha com a interface. Em vez disso, empregaram uma malha cartesiana com 64 x 128 volumes.

Por outro lado, não foi observada a ruptura dessa saia neste trabalho<sup>30</sup>, já que uma malha mais fina foi empregada. Essa diferença entre a forma final da bolha pode justificar a diferença entre os valores apresentados na Tabela 4-5 e na Tabela 4-6, embora não seja possível identificar qual das duas formas corresponde realmente à forma final da bolha.

Outros dois casos em que as diferenças percentuais entre os resultados não podem ser consideradas satisfatórias são o caso A e o caso C. Para o primeiro caso, pode-se atribuir essa discrepância à diferença entre os escoamentos obtidos: enquanto que na literatura há o relato da formação de vórtices na porção inferior da bolha, neste trabalho eles não estão presentes.

Em relação ao caso C, assim como para o caso E, a diferença pode ser justificada pelo emprego de diferentes refinamentos da malha: enquanto que nesta tese utilizou-se uma malha com 64 x 128 volumes, no trabalho de Ginzburg e Wittum, foi usada uma malha mais grossa com 32 x 64 volumes.

Collins (1965) deduziu analiticamente uma equação para a “velocidade do nariz” de uma bolha bidimensional, que ascende em um canal com largura  $2b$ , atingindo o regime de calota esférica. Segundo ele, essa velocidade é dada por

$$v^{2D} = \left[ \frac{g \cdot b}{6\pi} (3 - \operatorname{tgh}^2 \alpha) \cdot \operatorname{tgh} \alpha \right]^{\frac{1}{2}}, \text{ com } \alpha = \frac{\pi \bar{c}}{2b}, \quad (4.22)$$

onde  $2\bar{c}$  é a largura da bolha. Logo, uma vez que a bolha dos casos E e F atinge o regime para o qual a expressão de Collins é válida, pode-se validar a magnitude da velocidade do nariz da bolha obtida numericamente com o valor analítico.

---

<sup>30</sup> Nesta tese, a ruptura do fluido ocorre quando a espessura do fluido é menor do que o tamanho dos volumes de controle da malha computacional.

Para o caso E, essa velocidade obtida numericamente vale  $6,846 \times 10^{-2}$  m/s contra  $6,832 \times 10^{-2}$  m/s obtida da equação (4.22). A diferença percentual entre esses valores é igual a 0,2%. Já para o caso F, essa diferença é de 3,3%: os valores obtidos numérica e analiticamente são iguais a 0,0645 m/s e 0,0624 m/s, respectivamente. Esses valores são considerados satisfatórios e validam a velocidade do nariz da bolha em regime de calota esférica resultante das simulações numéricas.

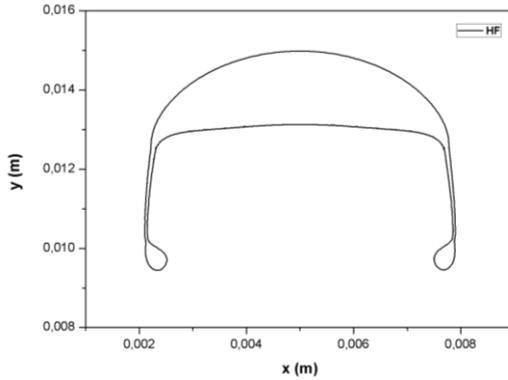
O caso Ginzburg/Unverdi também foi simulado empregando-se os demais modelos de curvatura apresentados nesta tese, de forma a avaliar seu desempenho. Com exceção do caso E, os resultados obtidos com os demais modelos apresentaram discretas diferenças quando comparados ao obtido pelo método HF. Para o caso E, como pode ser observado na Figura 44<sup>31</sup>, a bolha obtida com a técnica da convolução exibiu uma sequência de pequenas bolhas no lugar da saia, enquanto que os resultados obtidos com os outros modelos mostraram boa concordância com o método HF.

Um aspecto importante a ser considerado é o tempo consumido na simulação desse problema empregando-se cada um dos modelos de curvatura. Para o caso E, o qual foi simulado com a malha mais fina dentre todos os casos, em relação ao método HF, a simulação empregando o método HF2 ( $R_{filtro} = 0,12$  mm) consumiu quase o dobro do tempo. Já a simulação com o método HF-fc modificado ( $d = 3\Delta x \exp[-10t]$ ) e a técnica da convolução ( $d = 3\Delta x$ ) gastaram 15% e 50% a mais de tempo de computação respectivamente, enquanto que o método HF-fc ( $d = 3\Delta x$ ) despendeu 12% a menos do tempo gasto pelo método HF.

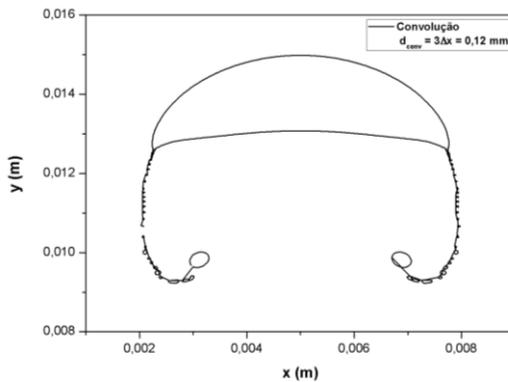
Com base nos resultados tanto para o caso Ginzburg/Unverdi quanto para o caso Francois, pode-se concluir que os métodos HF, HF2 e HF-fc modificado avaliam satisfatoriamente a curvatura da interface de uma bolha ascendente, independentemente do regime de escoamento. Em termos de tempo computacional, o método HF apresentou melhor desempenho do que os outros dois.

---

<sup>31</sup> A falta de simetria na figura (b) é devida ao pós-processamento: não foi possível excluir todos os segmentos de reta que ligavam uma bolha a outra.



(a)



(b)

**Figura 44.** Bolha do caso E em  $t = 0,09$  s obtida com (a) método HF e (b) técnica da convolução ( $d=3\Delta x$ ).

Também constatou-se que os modelos de curvatura que envolvem a operação de convolução são mais propensos à geração de correntes espúrias, cuja presença é caracterizada por ondulações na porção inferior da interface da bolha. Além disso, o super-dimensionamento do núcleo de convolução conduz a deformações excessivas da bolha. Já o emprego do método HF-fc modificado minimiza os efeitos das correntes espúrias.

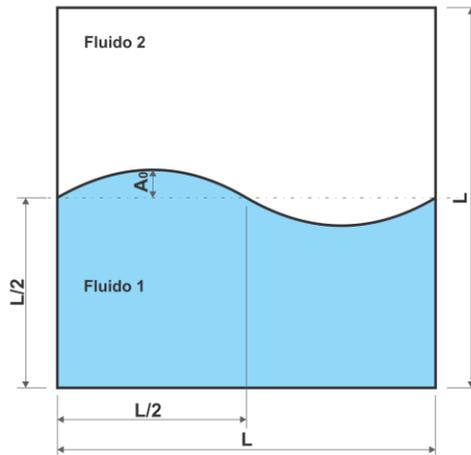
### 4.3.3. Onda capilar

Neste caso-teste será avaliado o desempenho apenas dos métodos HF e HF-fc modificado, uma vez que, com base nas conclusões dos outros dois testes, eles constituem as melhores opções de avaliação da curvatura da interface.

Este teste é constituído de um domínio quadrado ocupado por dois fluidos com propriedades físicas iguais, divididos por uma interface (GLITZ; SILVA; MALISKA, 2011). Uma perturbação é então aplicada à interface ilustrada na Figura 45 e expressa por

$$y = A_0 \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (4.23)$$

onde  $A_0$  é a amplitude inicial da perturbação. Esta perturbação, na ausência da aceleração da gravidade, será amortecida pelos efeitos da viscosidade e da tensão interfacial.



**Figura 45.** Configuração inicial do escoamento de uma onda capilar.

Em seu trabalho, Prosperetti (1981) deduziu uma solução analítica para a amplitude da perturbação em função do tempo considerando as equações de Navier-Stokes linearizadas:

$$A(t) = \frac{4(1-4\beta)v^2k^4}{8(1-4\beta)v^2k^4 + \omega_0^2} A_0 \operatorname{erfc}(vk^2t)^{1/2} \\ + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{\Gamma_i} \left( \frac{\omega_0^2 A_0}{z_i^2 - vk^2} - u_0 \right) \exp\left[(z_i^2 - vk^2)t\right] \operatorname{erfc}(z_i t^{1/2}) \quad (4.24)$$

onde  $k$  é o número de onda,  $\nu$  é a viscosidade cinemática dos fluidos,  $u_0$  é a velocidade inicial da perturbação (igual a zero para o caso simulado),  $\omega_0$  é a frequência natural do sistema e é dada por

$$\omega_0 = \left( \frac{\sigma k^3}{\rho_1 + \rho_2} \right)^{1/2}. \quad (4.25)$$

O parâmetro  $\beta$  na equação (4.24) é expresso pela seguinte relação entre as massas específicas dos fluidos:

$$\beta = \frac{\rho_1 \rho_2}{(\rho_1 + \rho_2)^2}, \quad (4.26)$$

enquanto que  $z_i$  são raízes complexas da seguinte equação:

$$z^4 - 4\beta(k^2\nu)^{1/2} z^3 + 2(1-6\beta)k^2\nu z^2 \\ + 4(1-3\beta)(k^2\nu)^{3/2} z + (1-4\beta)k^4\nu^2 + \omega_0^2 = 0 \quad (4.27)$$

E, por sua vez,

$$\Gamma_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1), \quad (4.28)$$

sendo  $\Gamma_2$ ,  $\Gamma_3$  e  $\Gamma_4$  obtidos de maneira análoga, bastando apenas permutar-se os índices de  $z_i$ .

Os resultados obtidos nesta tese serão comparados a essa solução analítica.

A Tabela 4-7 lista os parâmetros empregados nas simulações do teste da onda capilar.

Em todas as simulações foram utilizadas condições de contorno periódicas nas fronteiras leste e oeste e condição de deslizamento e impermeabilidade nas fronteiras norte e sul. As malhas empregadas são cartesianas e uniformes.

**Tabela 4-7.** Valores dos parâmetros do problema da onda capilar.

Parâmetro	Valor
Massa específica dos fluidos	1 kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade dos fluidos	0,011 Pa s
Tensão interfacial	0,3704 N/m
Comprimento do domínio	1 m
Comprimento de onda da perturbação	1 m
Amplitude inicial	0,01 m
Frequência natural	6,778 Hz
Número de Ohnesorge	1/(3000) <sup>0,5</sup>
Passo de tempo	10 <sup>-5</sup> s
Crítérios de convergência para u e v	10 <sup>-7</sup> m/s
Crítério de convergência para P	10 <sup>-7</sup> Pa
Crítério de convergência para <i>f</i>	10 <sup>-7</sup>
Tamanhos de malha	8 x 8, 16 x 16, 32 x 32, 64 x 64 volumes

O número de Ohnesorge presente na Tabela 4-7 é definido como

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \cdot \sigma \cdot L}}. \quad (4.29)$$

A comparação entre as soluções analítica e numérica foi realizada tomando-se a norma  $L_2$  dos valores da amplitude ao longo do tempo para o ponto em que a amplitude inicial é máxima ( $x = 0,25$  m):

$$E(A) = \frac{1}{A_0} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (A_{numérico} - A_{analítico})^2}{N}} \quad (4.30)$$

onde  $N$  é o número de pontos ao longo do tempo. Neste trabalho, utilizou-se  $N$  igual a 601. Desta forma foram incluídos o valor inicial da amplitude e seu valor a cada 0,005 s.

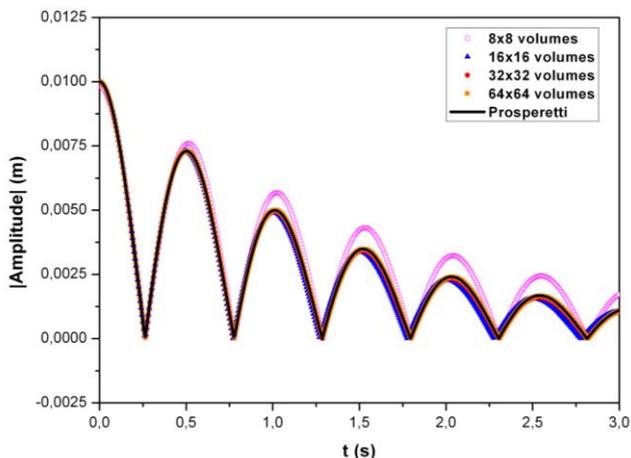
A Tabela 4-8 mostra os valores dos erros obtidos numericamente, empregando-se os métodos HF e HF-fc modificado. Para este modelo, foi utilizado um núcleo com comprimento igual a  $d = 3\Delta x \exp(-10t)$ . Ou seja, o efeito do filtro cessa após aproximadamente 0,11 s (2200 passos de tempo).

**Tabela 4-8.** Erro relativo da amplitude da perturbação na onda capilar para diferentes tamanhos de malha.

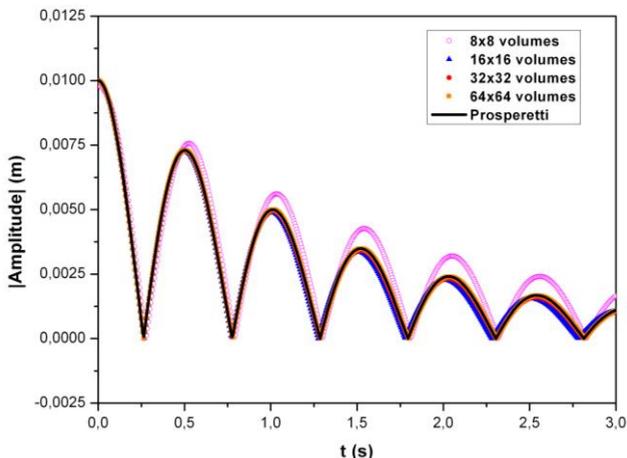
Malha	Modelo HF	Modelo HF-fc modificado
8 x 8	0,0478	0,0559
16 x 16	0,0214	0,0187
32 x 32	0,0049	0,0055
64 x 64	0,0046	0,0049

Como pode ser observado nesta tabela, quanto mais refinada a malha, menor o erro. Entretanto, a taxa com que esse erro diminui também decresce com o refino da malha. Verifica-se também que os dois modelos apresentam erros de mesma ordem, com o método HF apresentando erros levemente menores do que o modelo HF-fc modificado. A evolução temporal do módulo da amplitude da onda capilar para os dois modelos é apresentada na Figura 46.

Para malhas com 8 x 8 volumes, os resultados com o modelo HF-fc modificado apresentaram uma maior defasagem em relação à solução analítica do que os obtidos com o método HF. Em ambos os modelos, essa defasagem é atenuada com o refino da malha. Porém, a partir da malha com 64 x 64 volumes, ela volta a aumentar.



(a)



(b)

**Figura 46.** Evolução temporal do módulo da amplitude: (a) modelo HF e (b) modelo HF-fc modificado.

Os resultados obtidos na simulação do escoamento da onda capilar permitem concluir que o método HF apresentou melhor desempenho, atingindo menores erros quando malhas mais finas são empregadas.

#### 4.4. CONCLUSÕES

A performance de cinco modelos de curvatura – três deles reportados na literatura e dois propostos neste trabalho – foi avaliada neste capítulo a partir da simulação de três casos-testes: o caso da gota estática em equilíbrio, da bolha ascendente e da onda capilar.

No primeiro teste, quando a norma  $L_2$  do erro da velocidade foi analisada, os erros obtidos pela técnica da convolução exibiram convergência de primeira ordem, enquanto que foi verificada convergência de segunda ordem para os demais modelos. Entretanto, há uma tendência crescente deste erro com o aumento da resolução da malha para os resultados do método HF. Este foi também o comportamento apresentado pela norma  $L_2$  da curvatura, sugerindo que os erros na estimativa da curvatura afetam diretamente a geração de correntes espúrias. Identificou-se que este erro está associado a uma anisotropia local do campo de curvatura, resultante da não-obeidência à

condição  $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  no método HF. Não foi encontrada na literatura referência a esse problema e a sua causa, embora os resultados apresentados por Francois et al. (2006) corroborem tal comportamento deste método.

Essa tendência crescente do erro é reduzida quando a curvatura de volumes vizinhos é considerada na estimativa da curvatura do volume de interesse, ou seja, quando algum tipo de filtro é aplicado ao método HF, que é a ideia explorada pelo modelo HF-fc. Contudo, foi provado que a aplicação de tal filtro deve ser restringida no tempo, caso contrário as correntes espúrias serão amplificadas.

Essa conclusão pode ser extraída dos resultados do teste da bolha ascendente, os quais exibiram excelente concordância com aqueles publicados na literatura quando os modelos HF e HF-fc modificado – modelo proposto nesse trabalho – foram utilizados, enquanto que os efeitos das correntes espúrias foram mais pronunciados nos resultados obtidos pelos outros modelos (HF-fc e técnica da convolução). Também concluiu-se que os resultados dos modelos que envolvem a operação de convolução dependem fortemente do tamanho do núcleo de convolução empregado.

Neste trabalho foi ainda proposto o modelo HF2. Ele consiste em duas modificações do modelo HF: uma melhor avaliação do valor da curvatura nos volumes que não satisfaziam à condição  $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$  e a aplicação de um filtro. Entretanto, verificou-se que, apesar de os erros após um passo de tempo diminuírem com o refino da malha, o método proposto também gerava correntes espúrias que não eram amortecidas com o tempo, mas sim estabilizavam. Contudo este aspecto não foi visível nos resultados para o caso da bolha ascendente, quando foi observada grande concordância entre os resultados do método HF2 e os obtidos com o método HF.

Uma característica indesejável do método HF2 foram os altos tempos computacionais despendidos nas simulações, que não o tornaram competitivo com o método HF original.

Já o método HF-fc modificado consiste na aplicação temporária de um filtro por convolução ao campo de curvatura. Com este artifício, as correntes espúrias não foram amplificadas como nos outros dois métodos que envolvem operação de convolução e ainda explorou-se os benefícios do emprego de um filtro na curvatura obtida pelo método HF, resultando em menores erros nesse parâmetro.

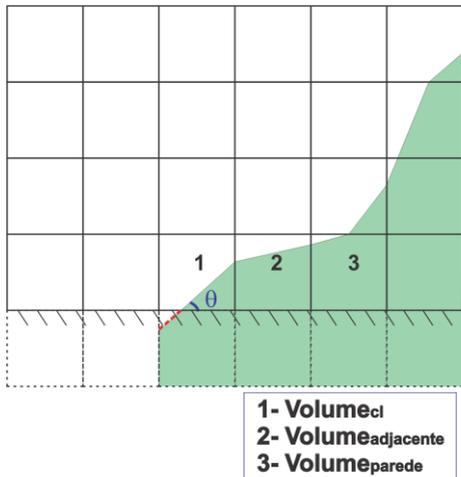
Tanto este método quanto o método HF mostraram-se capazes de estimar satisfatoriamente a curvatura da interface no caso da onda capilar, tendo o último atingido resultados levemente melhores do que o HF-fc modificado.

Apesar de a solução após um único passo de tempo para o método HF se deteriorar com o refino da malha como mostrado no caso da gota estática, foi mostrado nos dois outros casos estudados que essa deterioração é amenizada com a dissipação das correntes espúrias ao longo do tempo, não comprometendo os resultados. Dentre todos os métodos avaliados, o método HF é o que apresenta melhor relação entre erros na estimativa da curvatura e tempo computacional e, por isso, foi adotado no desenvolvimento do restante da tese.

## 5. MODELAGEM NUMÉRICA DO ÂNGULO DE CONTATO

Conforme discutido no segundo capítulo, a modelagem da curvatura da interface em volumes vizinhos a paredes é diferente da adotada para volumes no interior do fluido. O método HF, apresentado naquele capítulo, foi adaptado e empregado na simulação de dois casos-teste e seus resultados serão apresentados neste capítulo. Basicamente será avaliado aqui o desempenho do método HF na estimativa da curvatura em três volumes:  $\text{volume}_{cl}$ ,  $\text{volume}_{adjacente}$  e  $\text{volume}_{parede}$  (Figura 47).

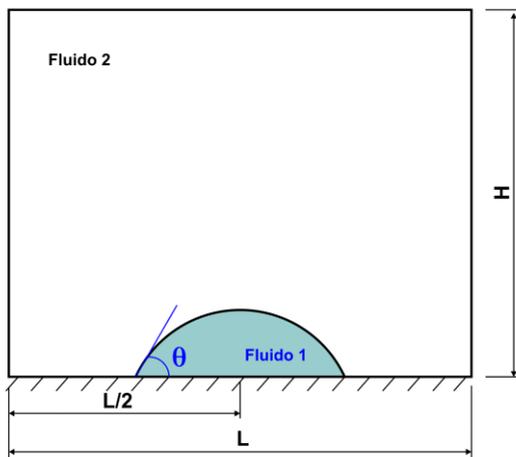
Neste capítulo, também serão apresentadas modificações no algoritmo original do método HF propostas neste trabalho, que visam a reduzir os erros na avaliação da curvatura. Tais erros foram identificados quando o caso clássico da gota estática, adaptado para essa nova situação, foi simulado.



**Figura 47.** Volumes em que há a determinação da curvatura da interface junto à parede.

### 5.1. GOTA ESTÁTICA

O caso clássico da gota estática, abordado no capítulo anterior, foi adaptado para essa nova situação em que a interface faz contato com a superfície sólida, conforme mostrado na Figura 48.



**Figura 48.** Caso-teste da gota estática adaptado para o problema do ângulo de contato.

Aqui valem as mesmas considerações feitas naquele capítulo: como os efeitos gravitacionais são desprezados, a gota está sujeita apenas ao gradiente de pressão devido à ação da tensão interfacial e, portanto, o campo de velocidade é nulo.

Porém, erros na estimativa da curvatura da interface geram velocidades espúrias, cuja magnitude deveria diminuir com o refino da malha. Essa é justamente a análise feita com as simulações desse caso. Esta análise se concentrará em erros na avaliação da curvatura da interface que, como foi mostrado no capítulo anterior, está diretamente relacionada à geração de velocidades espúrias. Além deste estudo, verificou-se também o efeito do ângulo de contato ( $\theta$ ) no desempenho do método HF.

Nesses estudos foram realizadas simulações para quatro tamanhos diferentes de malha<sup>32</sup> e sete valores diferentes do ângulo de contato, que variaram entre  $30^\circ$  e  $150^\circ$ .

Ao longo do texto, as unidades de todas as variáveis e dimensões dos casos simulados são omitidas, da mesma forma como procedido por Afkhami e Bussmann (2007; 2008) e Afkhami, Zaleski e Bussmann

<sup>32</sup> Com exceção das simulações para  $\theta$  igual a  $30^\circ$ , quando três malhas diferentes foram empregadas.

(2009) sem realizar qualquer adimensionalização, porém, assumiu-se que as unidades são compatíveis entre si.

Em todas essas simulações, a área da gota<sup>33</sup> foi mantida igual à área de uma circunferência com raio igual a 0,2, independentemente do valor do ângulo de contato. Devido a essa restrição, o domínio do problema variou de acordo com o valor do ângulo. Um resumo dos tamanhos da malha, valores do ângulo de contato e dimensões do domínio é apresentado na Tabela 5-1.

**Tabela 5-1.** Tamanhos das malhas e dimensões do domínio empregadas nas simulações da gota estática.

Ângulo de contato ( $\theta$ )	Malhas	Dimensões do domínio
30°	80 x 20, 160 x 40, 320 x 80	L = 2 H = 0,5
45°	40 x 10, 80 x 20, 160 x 40, 320 x 80	L = 2 H = 0,5
60°	40 x 10, 80 x 20, 160 x 40, 320 x 80	L = 2 H = 0,5
90°	40 x 20, 80 x 40, 160 x 80, 320 x 160	L = 1 H = 0,5
110°	40 x 40, 80 x 80, 160 x 160, 320 x 320	L = 1 H = 1
120°	40 x 40, 80 x 80, 160 x 160, 320 x 320	L = 1 H = 1
150°	40 x 40, 80 x 80, 160 x 160, 320 x 320	L = 1 H = 1

Considerou-se uma gota com massa específica igual a 1000 e viscosidade igual a 0,0841 em equilíbrio e envolta por um fluido com massa específica 800 vezes menor e viscosidade 100 vezes menor. A tensão interfacial é igual a 0,1, resultando nos valores para o número de Ohnesorge mostrados na Tabela 5-2, sendo este número expresso por

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho \cdot \sigma \cdot D}}, \quad (5.1)$$

<sup>33</sup> Refere-se aqui à área constante da gota, por se tratarem de simulações bidimensionais. Isso é equivalente a manter o volume da gota constante.

onde  $\rho$  e  $\mu$  são a massa específica e a viscosidade dinâmica do fluido 1, respectivamente;  $\sigma$  é a tensão interfacial e  $D$  é o diâmetro da gota. Esse número adimensional relaciona a força viscosa com o produto entre as forças inercial e interfacial. Como os efeitos interfaciais são o foco desse estudo, trata-se de um número adimensional adequado para se referir a esse escoamento, onde os efeitos viscosos e inerciais também estão presentes.

**Tabela 5-2.** Valores do número de Ohnesorge em função de  $\theta$ .

Ângulo de contato ( $\theta$ )	Oh
30°	0,00547
45°	0,00730
60°	0,00884
90°	0,01118
110°	0,01224
120°	0,01259
150°	0,01320

As simulações foram executadas por um único passo de tempo igual a  $10^{-6}$ , em um domínio com condição de impermeabilidade e deslizamento em todas as fronteiras, com exceção da fronteira sul, à qual foi atribuída condição de impermeabilidade e não-deslizamento. O campo de fração volumétrica foi definido inicialmente com valores exatos, obtidos por meio de integração da equação da circunferência, enquanto que aos demais campos (velocidade e pressão) foi atribuído valor zero. E, uma vez que o objetivo era a análise dos erros na estimativa da curvatura da interface após apenas um passo de tempo, estabeleceram-se rígidos critérios de convergência:  $10^{-14}$  para as componentes da velocidade,  $10^{-12}$  para a pressão e  $10^{-12}$  para a fração volumétrica.

Para a avaliação do comportamento do erro da curvatura, empregou-se a norma  $L_2$ , que é expressa por

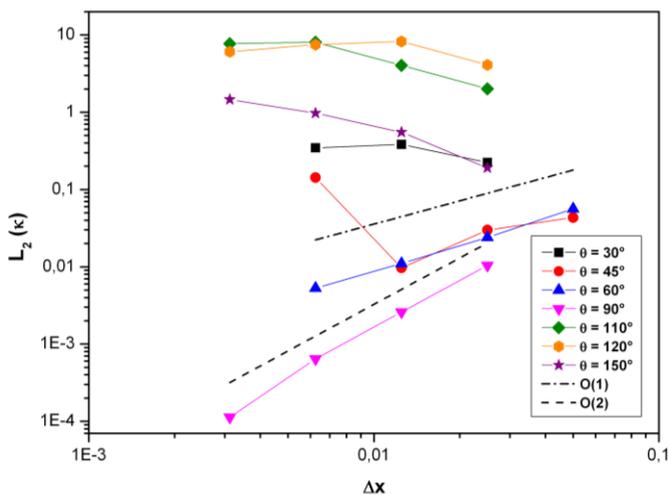
$$L_2(\kappa) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{wall\_int}} (\kappa_i - \kappa_{exata})^2} / N_{wall\_int}, \quad (5.2)$$

onde  $\kappa_i$  é a curvatura avaliada no centro dos volumes vizinhos à parede e  $N_{wall\_int}$  é o número de volumes vizinhos à parede e que contêm a

interface. Ou seja, no cálculo dessa norma são considerados todos os volumes<sub>cl</sub>, volumes<sub>adjacente</sub> e volumes<sub>parede</sub>.

A Figura 49 mostra a norma  $L_2$  da curvatura da interface em função do tamanho da malha para diferentes valores do ângulo de contato. Como pode ser observado nessa figura, apenas os erros para  $\theta$  igual a  $60^\circ$  e  $90^\circ$  apresentam comportamento monotônico decrescente com o refino da malha. Para  $60^\circ$ , o erro apresenta tendência de primeira ordem, enquanto que, para  $90^\circ$ , esse erro é de segunda ordem.

Erros de segunda ordem são alcançados com ângulo de  $90^\circ$ , porque neste caso a função altura fantasma possui o mesmo valor que a função altura do volume<sub>cl</sub> ( $H_{cl}$ ). Já erros de primeira ordem são atingidos com ângulo de  $60^\circ$ , pois apenas uma aproximação é necessária para o cálculo de  $H_{\text{fantasma}}$  (equação (2.41)), uma vez que foi empregado um estêncil paralelo à parede. Por esse raciocínio, erros com essa mesma tendência deveriam ser apresentados para as gotas com ângulos de contato iguais a  $45^\circ$ ,  $110^\circ$  e  $120^\circ$ . Entretanto, isso não foi observado. Para ângulo de contato igual a  $45^\circ$ , identificou-se a causa do desvio do comportamento do erro em relação ao comportamento esperado, a qual será discutida adiante. Entretanto, para ângulos de contato de  $110^\circ$  e  $120^\circ$ , não foi possível identificar essa causa.

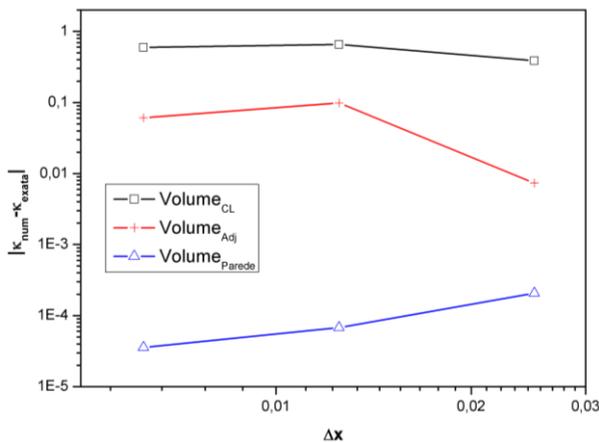


**Figura 49.** Norma  $L_2$  da curvatura da interface nos volumes vizinhos à parede. Resultados obtidos após um único passo de tempo.

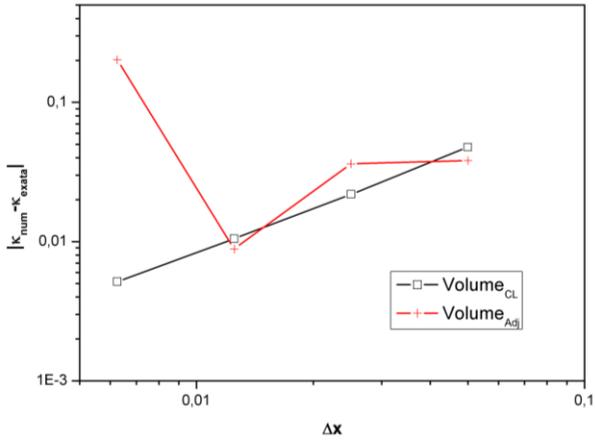
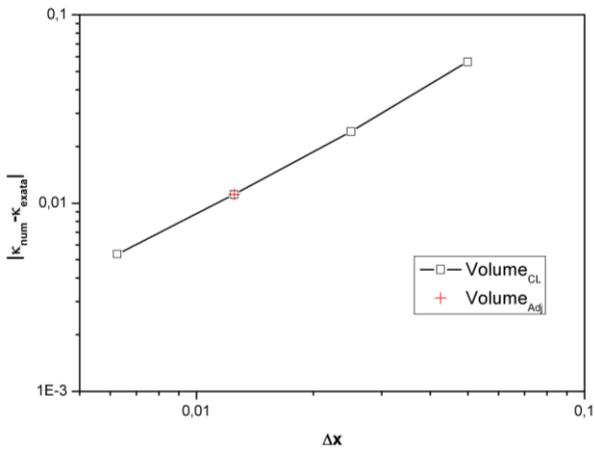
Ao analisar separadamente o comportamento do módulo do erro da curvatura para cada um dos volumes vizinhos à fronteira (Figura 50), verifica-se que, no caso de  $\theta$  igual a  $30^\circ$  e  $45^\circ$ , a estimativa da curvatura para os volumes<sub>cl</sub> e volumes<sub>adjacente</sub> contribuem para o crescimento do erro com o refino da malha. O erro para esses volumes é maior do que o erro para o volume<sub>parede</sub>, que apresenta ainda tendência de decrescer com o refino da malha.

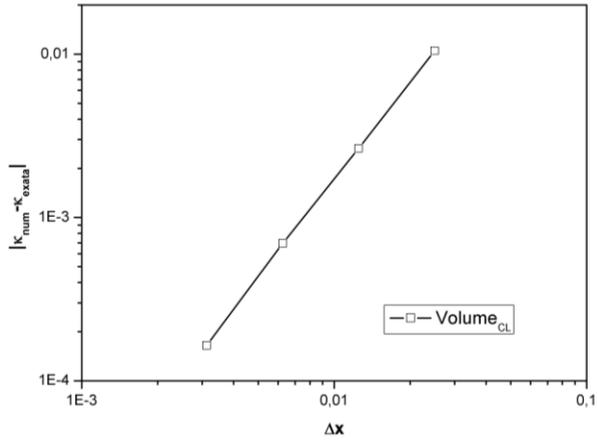
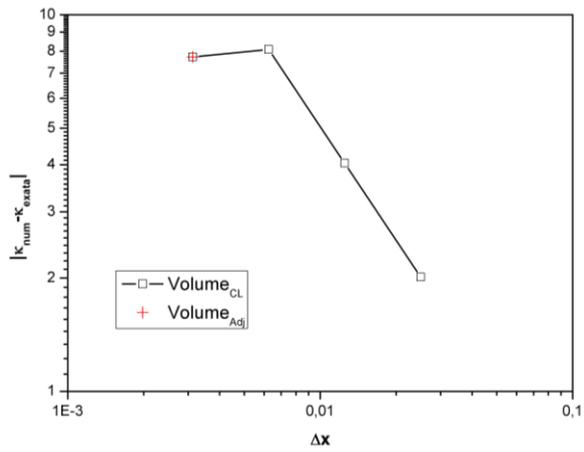
Constata-se também que os piores resultados são obtidos para ângulos de contato entre  $90^\circ$  (exclusive) e  $135^\circ$ , chegando a alcançar erros da ordem de 10.

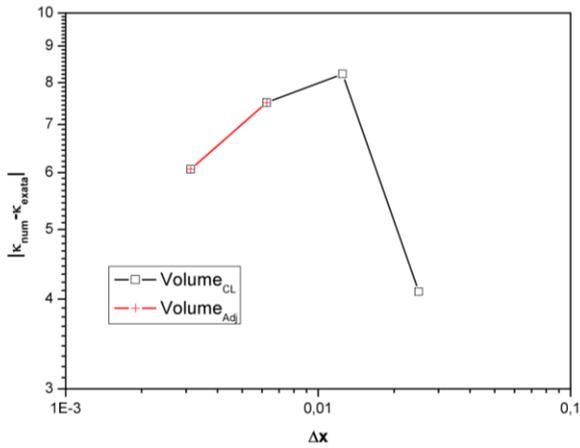
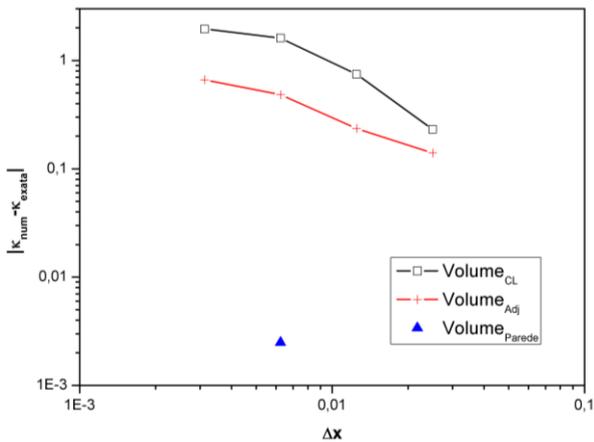
Considerando os resultados para  $\theta < 60^\circ$ , verifica-se que o aumento do erro com o refino da malha está relacionado à adoção de um estêncil perpendicular à superfície sólida tanto para o cálculo da curvatura para o volume<sub>cl</sub> (para ângulo de  $30^\circ$ ) quanto para o volume<sub>adjacente</sub> (para ângulos de  $30^\circ$  e  $45^\circ$ ). Um indício neste sentido é que, para ângulos de contato de  $60^\circ$  e  $90^\circ$ , foi adotado um estêncil paralelo à parede para a determinação da curvatura nesses volumes.



(a)  $\theta = 30^\circ$

(b)  $\theta = 45^\circ$ (c)  $\theta = 60^\circ$

(d)  $\theta = 90^\circ$ (e)  $\theta = 110^\circ$

(f)  $\theta = 120^\circ$ (g)  $\theta = 150^\circ$ 

**Figura 50.** Módulo do erro da curvatura para os volumes que contêm a interface e são vizinhos à parede após um único passo de tempo: erros para volume<sub>cl</sub>, volume<sub>adjacente</sub> e volume<sub>parede</sub>.

A associação dos resultados de dois testes simples conduziu à identificação do responsável pelo aumento no erro. O primeiro desses testes foi o deslocamento do centro da gota no eixo das abscissas em

L/640. Com isso, os valores da fração volumétrica nos volumes da fronteira foram alterados. Já o segundo teste foi o cálculo da curvatura para os volumes<sub>cl</sub> e volumes<sub>adjacente</sub> para ângulos menores do que 60° utilizando um estêncil paralelo à parede.

Ao analisar os resultados de ambos os testes, concluiu-se que a não satisfação dos limites da malha ( $h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}$ ) pela função altura para o volume<sub>cl</sub> ( $H_{cl}$ ) implica maiores erros no cálculo da curvatura quando um estêncil perpendicular é usado. Conforme explicado anteriormente, ao se empregar um estêncil perpendicular, duas aproximações são adotadas para o cálculo da curvatura para o **volume<sub>cl</sub>**: a extrapolação linear da interface para o volume fantasma (Figura 47) e a extrapolação da função altura para o cálculo de  $H_{\text{fantasma}}$ . Já para a determinação da curvatura no **volume<sub>adjacente</sub>** com um estêncil perpendicular, apenas a primeira aproximação é empregada, pois não é necessário conhecer  $H_{\text{fantasma}}$ .

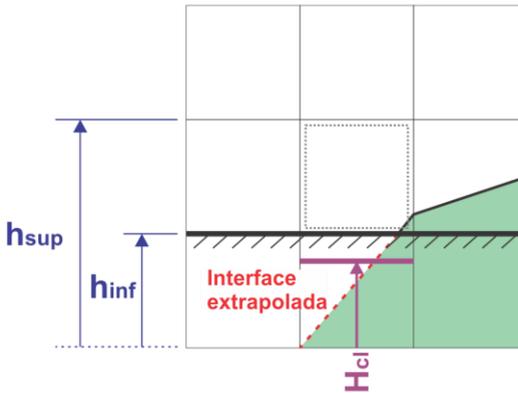
A extrapolação da interface pode resultar numa função altura  $H_{cl}$  que não respeita os limites do volume (Figura 51), fazendo com que a fração volumétrica extrapolada exerça um maior peso em  $H_{cl}$  do que a fração no volume<sub>cl</sub><sup>34</sup>. Como a fração volumétrica extrapolada é um valor aproximado, seu erro é transmitido à função altura e, conseqüentemente, à curvatura da interface.

A solução proposta neste trabalho para reduzir os erros na estimativa da curvatura consiste em (Figura 52 e Figura 53):

- No caso de estêncil **perpendicular** à parede, avaliar se a função altura  $H_{cl}$  obedece aos limites  $h_{\text{inf}}$  e  $h_{\text{sup}}$ ;
- Caso  $H_{cl}$  não respeite os limites, seleciona-se um estêncil **paralelo** e avalia-se se a nova  $H_{cl}$  respeita os limites. Caso respeite, toma-se como estêncil definitivo o estêncil paralelo, caso contrário o estêncil perpendicular é tomado como definitivo.

---

<sup>34</sup> Lembrando que a função altura é o somatório do produto entre a fração volumétrica e o incremento espacial no sentido da direção dominante.



**Figura 51.** Situação em que  $H_{c1}$  não respeita os limites da malha. Os limites são indicados por  $h_{inf}$  e  $h_{sup}$ .

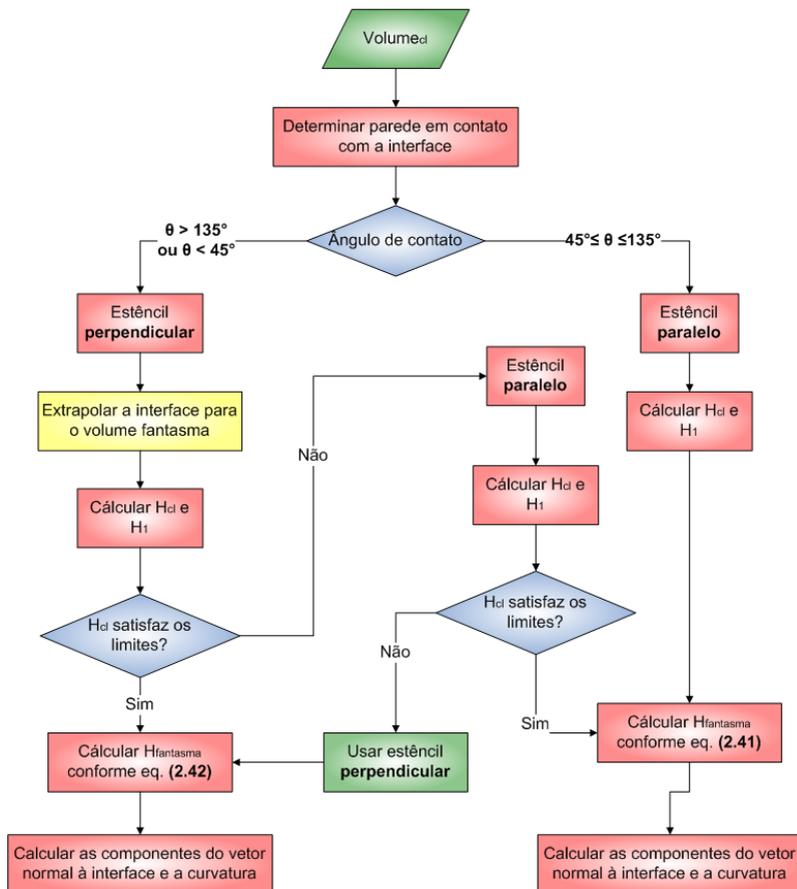
A avaliação dos limites é feita apenas quando o estêncil perpendicular é tomado inicialmente, porque os testes demonstraram que, quando o estêncil inicial era paralelo à superfície sólida e  $H_{c1}$  não respeitava os limites, a modificação do estêncil gerava erros maiores do que os iniciais, não se mostrando vantajosa.

Supondo uma malha uniforme, os limites, por sua vez, são expressos por:

$$\begin{aligned}
 h_{inf} &= 3\Delta \text{ e } h_{sup} = 4\Delta, \text{ para } \theta > 90^\circ \text{ ou estêncil paralelo;} \\
 h_{inf} &= \Delta \text{ e } h_{sup} = 2\Delta, \text{ para } \theta < 90^\circ \text{ e estêncil perpendicular}
 \end{aligned}
 \tag{5.3}$$

onde  $\Delta$  é o tamanho dos volumes de controle na direção pertinente.

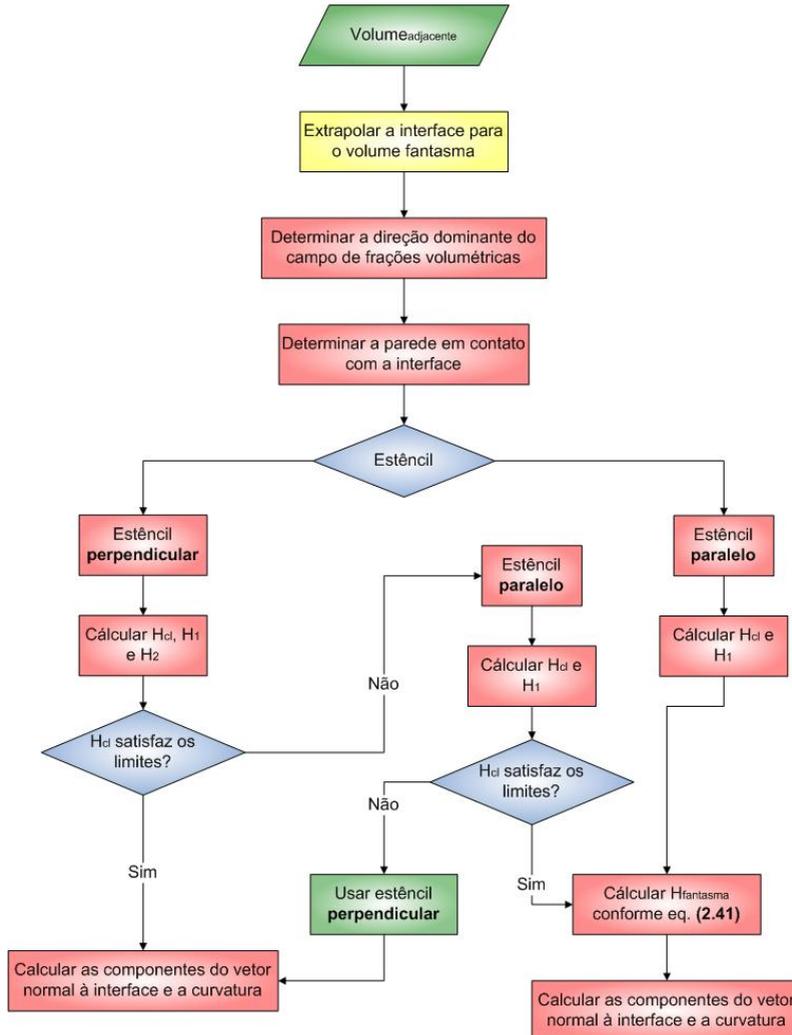
Ao aplicar o algoritmo modificado ao cálculo das funções altura, constatou-se uma melhora nos resultados após um único passo de tempo para  $\theta < 60^\circ$ , como mostrado nas Figura 54 e Figura 55. Por outro lado, para valores do ângulo de contato entre  $45^\circ$  (exclusive) e  $135^\circ$ , a nova metodologia não alterou os resultados, pois estênceis paralelos foram inicialmente empregados na determinação das funções altura. Já para ângulos maiores do que  $135^\circ$ , o algoritmo modificado surtiu efeito contrário para os cálculos do volume<sub>adjacente</sub>: os erros aumentaram a uma taxa maior com o refino da malha.



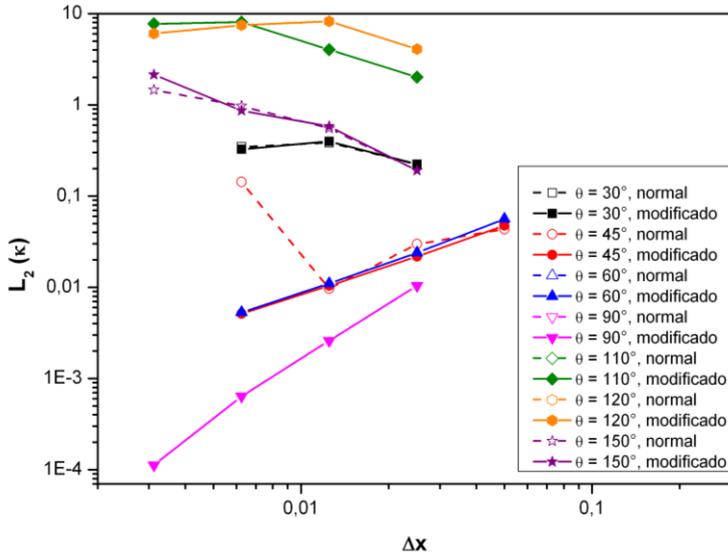
**Figura 52.** Fluxograma modificado proposto neste trabalho para o cálculo da curvatura no  $\text{volume}_{c1}$ .

Analisando os resultados para a malha com  $160 \times 160$  volumes para  $\theta = 150^\circ$ , percebe-se que, no cálculo de  $H_{c1}$  inicialmente foi utilizado um estêncil perpendicular para o  $\text{volume}_{\text{adjacente}}$ . Como o valor da função altura não obedecia aos limites, adotou-se um estêncil paralelo à parede, o qual resultou em uma  $H_{c1}$  cujo valor satisfazia os limites  $h_{\text{inf}}$  e  $h_{\text{sup}}$ . Porém, para este novo estêncil, o erro da curvatura foi maior. Este maior erro é devido à pior estimativa tanto da derivada primeira quanto da derivada segunda da função altura. No caso da derivada segunda, seu numerador deveria ser apenas uma ordem de grandeza maior do que o denominador. Porém, com o novo estêncil, o

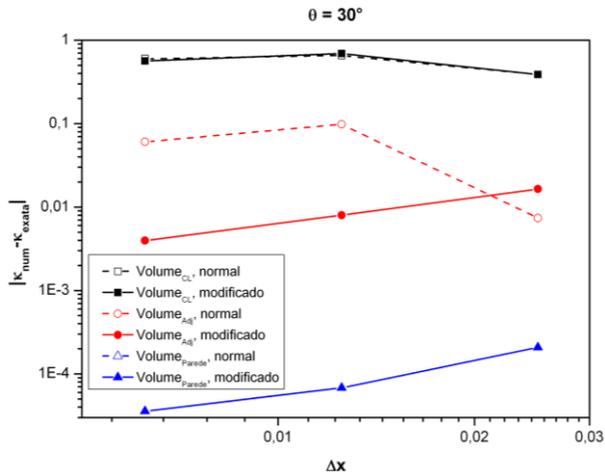
numerador possui ordem de  $10^{-3}$  enquanto que o denominador é da ordem de  $10^{-5}$ . Já para o estêncil perpendicular, a razão de 10 é preservada, apesar de a função altura  $H_{cl}$  não respeitar os limites.



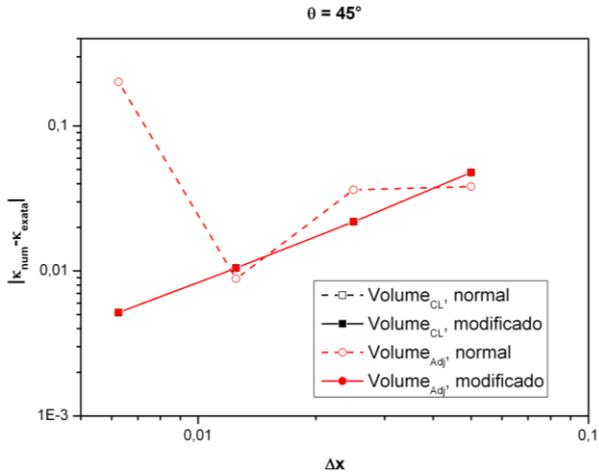
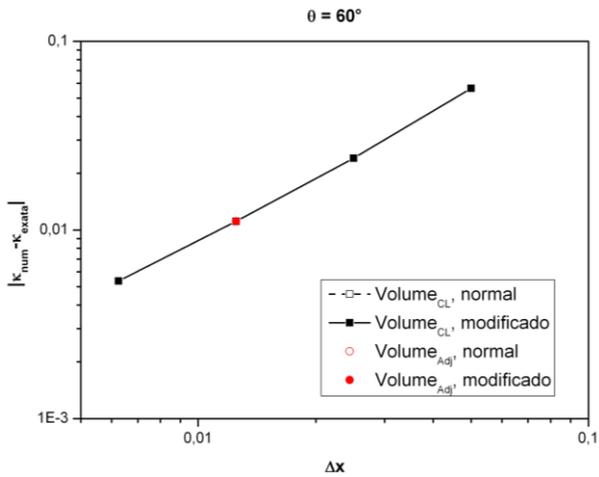
**Figura 53.** Fluxograma modificado proposto neste trabalho para o cálculo da curvatura no **volume**<sub>adjacente</sub>.

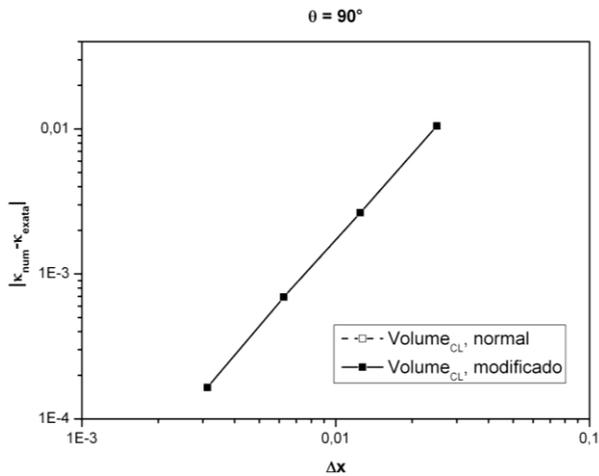
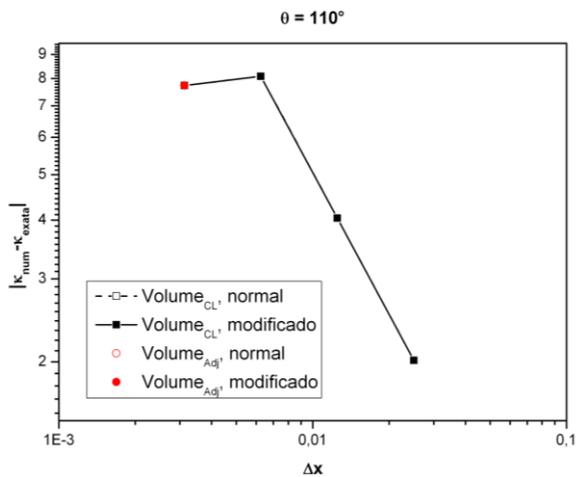


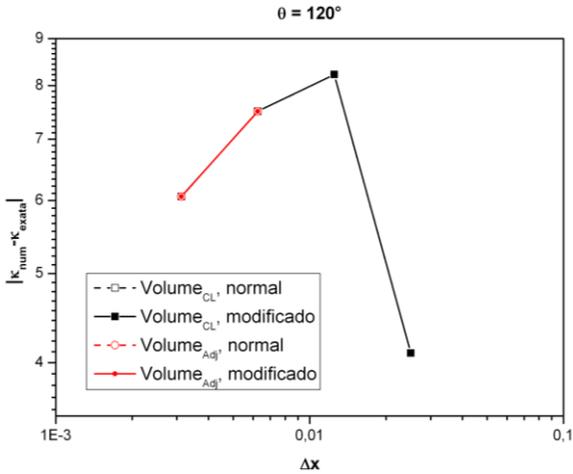
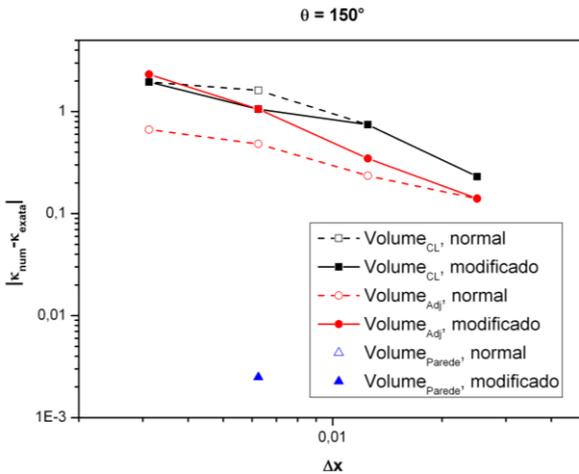
**Figura 54.** Norma  $L_2$  da curvatura dos volumes vizinhos à parede e que contêm a interface. Resultados obtidos após um único passo de tempo para o algoritmo antigo (linhas tracejadas) e para o algoritmo modificado (linhas contínuas).



(a)  $\theta = 30^\circ$

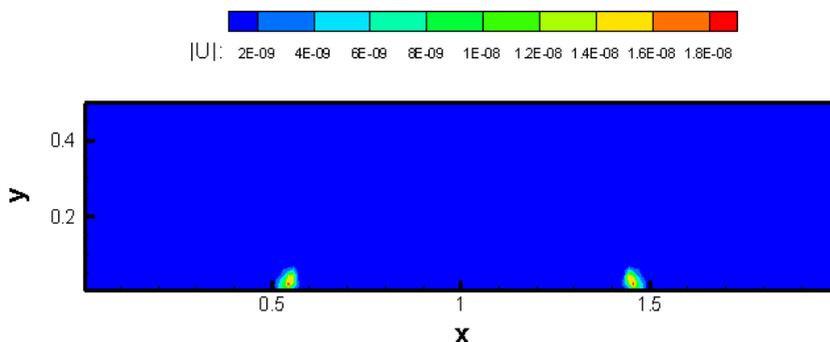
(b)  $\theta = 45^\circ$ (c)  $\theta = 60^\circ$

(d)  $\theta = 90^\circ$ (e)  $\theta = 110^\circ$

(f)  $\theta = 120^\circ$ (g)  $\theta = 150^\circ$ 

**Figura 55.** Módulo do erro da curvatura para os volumes que contêm a interface e são vizinhos à parede após um passo de tempo: erros para volume<sub>cl</sub>, volume<sub>adjacente</sub> e volume<sub>parede</sub>. Comparação entre os resultados do algoritmo antigo (linhas tracejadas) e os resultados do algoritmo modificado (linhas contínuas).

A Figura 56 mostra o campo do módulo das velocidades espúrias para o caso com ângulo de contato igual a  $45^\circ$ , obtido a partir da simulação com o algoritmo original e com uma malha com  $160 \times 40$  volumes. Constata-se dessa figura que a avaliação da curvatura é pior na região de contato da interface com a superfície, pois é nessa região que as correntes espúrias são maiores.



**Figura 56.** Módulo das velocidades espúrias após um  $\Delta t$ .

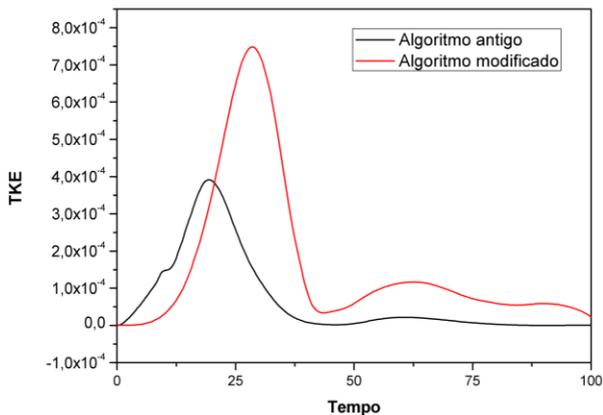
Em seu artigo de 2008, Afkhami e Bussmann apresentam o comportamento da norma  $L_1$  do erro da curvatura dos volumes da linha de contato para valores do ângulo iguais a  $60^\circ$ ,  $90^\circ$  e  $120^\circ$ . Assim como neste trabalho, aqueles pesquisadores também obtiveram erros de primeira ordem para  $\theta$  igual a  $60^\circ$  e de segunda ordem para  $\theta$  igual a  $90^\circ$ . Já para ângulo de  $120^\circ$ , eles obtiveram erros com tendência de primeira ordem. Entretanto, não é especificado em que tempo de simulação foram obtidos os valores dessa norma, nem o passo de tempo empregado e os valores dos critérios de convergência. Portanto, tal resultado não será utilizado para efeito de comparação.

Para avaliar o comportamento do erro da estimativa da curvatura após 100.000 passos de tempo e a performance dos dois algoritmos, simulações considerando ângulos de contato de  $30^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $120^\circ$  e  $150^\circ$  foram realizadas, com malhas de  $160 \times 40$  volumes para os três primeiros valores de  $\theta$  e malha com  $80 \times 80$  volumes para  $\theta = 120^\circ$  e  $150^\circ$ . Para tanto, foram empregados um passo de tempo de  $10^{-3}$  e os seguintes critérios de convergência:  $10^{-5}$  para as componentes da velocidade,  $10^{-3}$  para a pressão e  $10^{-5}$  para a fração volumétrica.

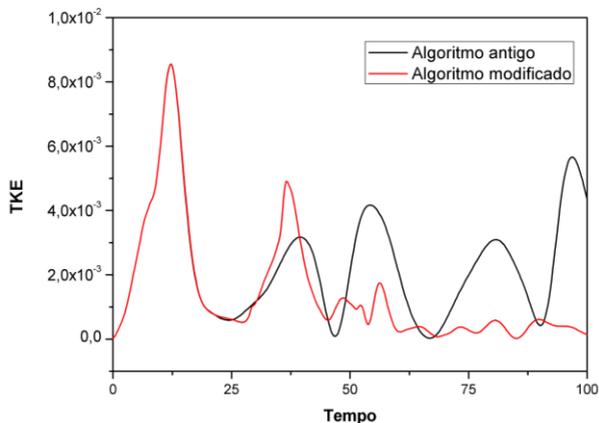
Como pode ser observado na Figura 57, em todos os casos simulados a energia cinética total do escoamento (TKE, definida pela

equação (5.4)) decresce com o tempo, independentemente do ângulo de contato ou do algoritmo empregado. Ou seja, como a geração de correntes espúrias está relacionada a erros na determinação da curvatura, esses erros também decrescem com o tempo.

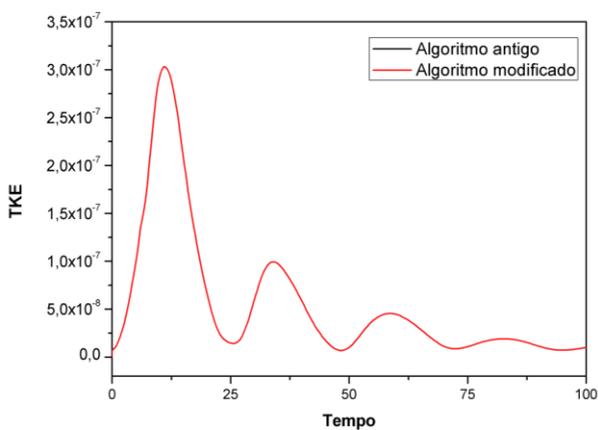
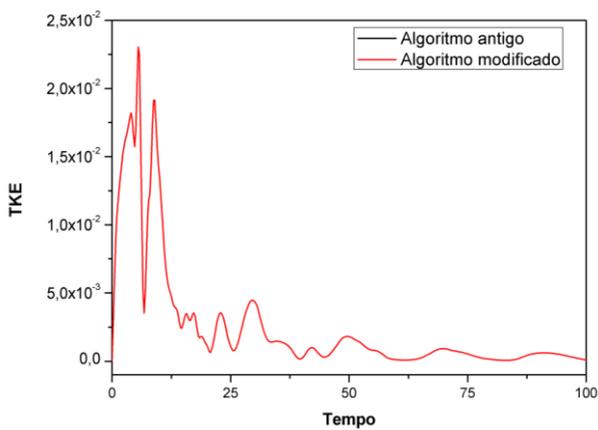
$$TKE = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \rho_i V_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i \quad (5.4)$$

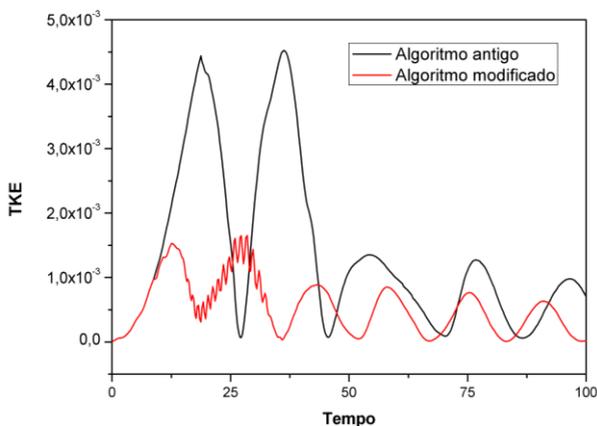


(a)  $\theta = 30^\circ$



(b)  $\theta = 45^\circ$

(c)  $\theta = 60^\circ$ (d)  $\theta = 120^\circ$

(e)  $\theta = 150^\circ$ 

**Figura 57.** Comportamento da Energia Cinética Total (TKE) ao longo do tempo ( $\Delta t = 10^{-3}$ ).

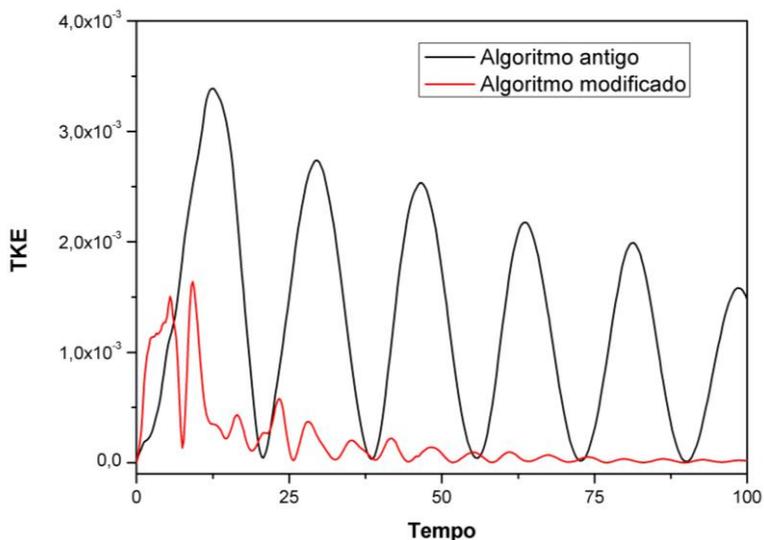
Para ângulos de contato iguais a  $60^\circ$  e  $120^\circ$ , o algoritmo antigo e o modificado apresentam os mesmos resultados. Isso ocorre porque em nenhum momento no cálculo das funções altura é empregado um estêncil perpendicular à superfície sólida, condição necessária para a ativação do novo algoritmo. Já para  $\theta$  igual a  $30^\circ$  e  $45^\circ$ , a energia cinética obtida com o algoritmo modificado difere da obtida com o outro algoritmo, apresentando aquele um maior amortecimento das correntes espúrias. No caso do ângulo de  $45^\circ$ , essa diferença é devida unicamente ao cálculo da curvatura para o volume<sub>adjacente</sub>, uma vez que, para o volume<sub>cl</sub>, o estêncil paralelo à parede é adotado.

A energia cinética para uma gota com ângulo de contato de  $30^\circ$  apresenta um maior pico quando o algoritmo modificado é aplicado, porém, ao longo do tempo as velocidades espúrias são amortecidas e a energia tende à mesma ordem atingida quando o algoritmo antigo é empregado.

Ótimos resultados são atingidos para a configuração com ângulo de contato de  $150^\circ$  com ambos os algoritmos. O algoritmo proposto neste trabalho apresenta uma melhor performance do que o algoritmo antigo, ao gerar correntes espúrias de menor intensidade, que são amortecidas a uma taxa maior ao longo do tempo.

Tendo em vista o comportamento crescente do erro com o refinamento da malha após um único passo de tempo para  $\theta$  igual a  $150^\circ$ , simulou-

se esse mesmo caso para uma malha com  $160 \times 160$  volumes. A deterioração do resultado observada com o refino da malha após um único passo de tempo não é mantida quando um tempo mais longo é simulado, como pode ser constatado da Figura 58. Para essa malha mais fina, o novo algoritmo apresentou um desempenho ainda melhor do que o algoritmo antigo.



**Figura 58.** Comportamento da Energia Cinética Total (TKE) ao longo do tempo para um ângulo igual a  $150^\circ$  e malha com  $160 \times 160$  volumes.

Em termos de magnitude da energia cinética, a situação com ângulo de contato igual a  $60^\circ$  resultou em menores correntes espúrias. Este fato era esperado, tendo em vista o comportamento da norma  $L_2$  do erro da curvatura na linha de contato (Figura 49). Por outro lado, maior magnitude dessa energia foi alcançada para  $\theta$  igual a  $120^\circ$ , fato justificado pelos altos erros obtidos na estimativa da curvatura da linha de contato logo após o primeiro passo de tempo.

Afkhami e Bussmann (2007) apresentam o comportamento ao longo do tempo da norma  $L_1$  da velocidade, expressa pela equação (5.5). Naquele artigo, foi utilizada uma malha com refino adaptativo, cujo menor incremento espacial vale  $1/64$ , e ângulos de contato variando de  $30^\circ$  a  $150^\circ$ , resultando em valores para o número de Ohnesorge entre

$5,8 \times 10^{-3}$  e  $1,4 \times 10^{-2}$ . Como pode ser visto nos resultados obtidos por aqueles pesquisadores, a norma  $L_1$  das velocidades espúrias atinge valores diferentes após 100 mil passos de tempo, que dependem do ângulo de contato, conforme mostrado na Tabela 5-3.

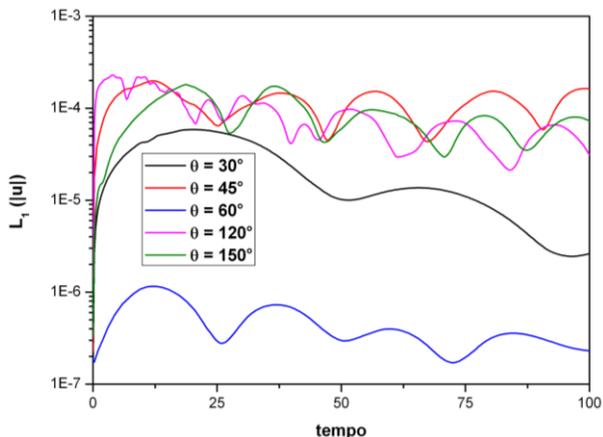
$$L_1(\mathbf{u}) = \frac{\sum_{i=1}^N |\mathbf{u}|}{N} \quad (5.5)$$

**Tabela 5-3.** Valores aproximados obtidos por Afkhami e Bussmann (2007) da norma  $L_1$  da velocidade após 100 mil passos de tempo.

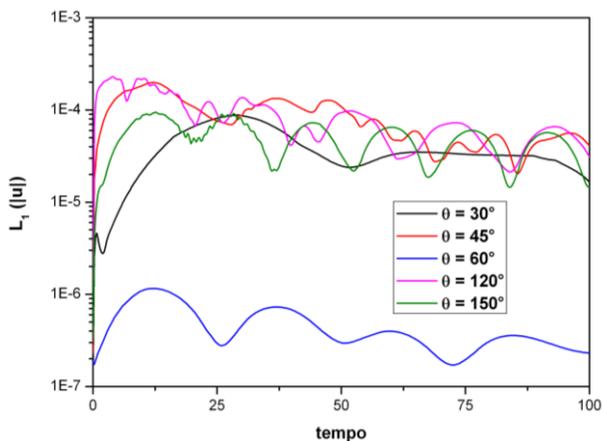
Ângulo de contato	$L_1( \mathbf{u} )$
30°	$8 \times 10^{-6}$
45°	$3 \times 10^{-6}$
60°	$3 \times 10^{-7}$
90°	$9 \times 10^{-8}$
120°	$2 \times 10^{-6}$
150°	$6 \times 10^{-5}$

Nesta tese, a norma  $L_1$  da velocidade apresentou um comportamento mais oscilatório ao longo do tempo, diferentemente do obtido por Afkhami e Bussmann. Além da discrepância no comportamento, os valores de  $L_1(|\mathbf{u}|)$  após 100 mil passos de tempo também diferem dos obtidos por aqueles pesquisadores, conforme pode ser observado na Figura 59. Essas diferenças são devidas a dois fatores: a malha empregada neste estudo ( $\Delta x = 0,0125$ ) é mais fina do que a utilizada por Afkhami e Bussmann; e o vetor normal à interface para o cálculo das componentes da força devido à tensão interfacial foi determinado por meio do gradiente da fração volumétrica neste trabalho e por meio do gradiente das funções altura naquele artigo.

Nesta mesma Figura 59 são mostrados os resultados para a norma  $L_1$  obtidos utilizando tanto o algoritmo antigo, quanto o algoritmo modificado. A alteração na estratégia de cálculo das funções altura para  $\theta$  igual a 45° e 150° resultou num menor valor  $L_1(|\mathbf{u}|)$  após 100 mil passos de tempo, enquanto que para o ângulo de contato de 30° o valor desta norma aumentou em uma ordem de grandeza.



(a) Resultados obtidos com o algoritmo antigo.



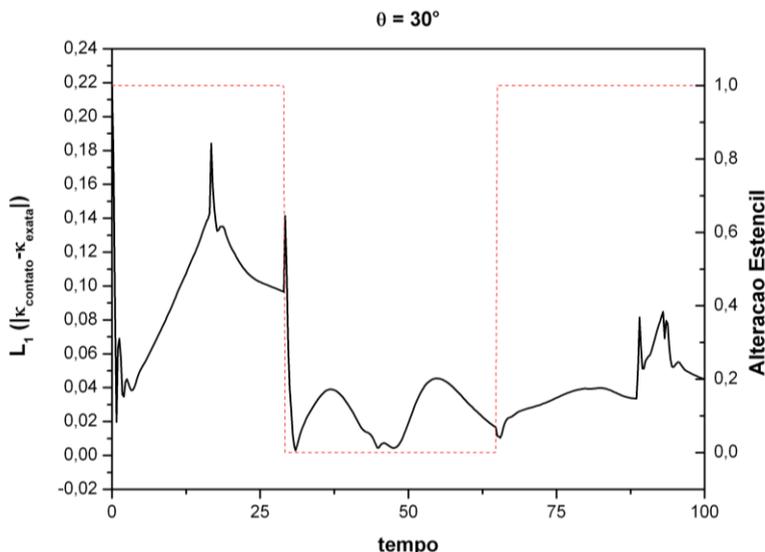
(b) Resultados obtidos com o algoritmo modificado.

**Figura 59.** Norma  $L_1$  da velocidade espúria para a gota estática ao longo de 100 mil passos de tempo para malha com  $\Delta x = 0,0125$  m.

Ao analisar o comportamento da solução do escoamento para o ângulo de  $30^\circ$ , verificou-se que, para a malha empregada, em nenhum momento a direção do estêncil de cálculo das funções altura para o  $\text{volume}_{c1}$  foi alterada para paralela à parede pelo algoritmo modificado. Essa alteração não foi efetuada porque, nos instantes em que os limites da malha não eram respeitados pela  $H_{c1}$  obtida com um estêncil

perpendicular, a nova função  $H_{cl}$  obtida com estêncil paralelo também não obedecia a esses limites.

Já para o **volum**e<sub>adjacente</sub> o estêncil foi alterado de perpendicular para paralelo durante um intervalo de tempo significativo, como pode ser observado na Figura 60. Nesta figura também é apresentada a norma  $L_1$  do erro da curvatura calculada pelo algoritmo modificado nos volumes vizinhos à superfície sólida.



**Figura 60.** Norma  $L_1$  do erro da curvatura da interface nos volumes vizinhos utilizando o algoritmo modificado (linha preta) e o status da alteração do estêncil para a determinação das funções altura para o volume<sub>adjacente</sub> (linha vermelha): valor unitário indica que a inversão do estêncil foi efetuada.

Portanto, pode-se creditar essa piora nos resultados ao cálculo da curvatura apenas no volume<sub>adjacente</sub>.

Considerando os resultados obtidos no teste clássico da gota estática, conclui-se que o método *Height Functions* (HF) estima satisfatoriamente a curvatura da interface para volumes da linha de contato, principalmente quando ângulos de contato menores ou iguais a  $90^\circ$  são impostos. Para ângulos maiores do que  $90^\circ$ , após um único passo de tempo é observado um comportamento crescente do erro da curvatura com o refino da malha. Entretanto, após 100 mil passos de

tempo, verifica-se que as correntes espúrias geradas por erros na estimativa daquele parâmetro são amortecidas, conduzindo a um comportamento desejado da energia cinética total do escoamento ao longo do tempo.

Em geral, o novo algoritmo proposto no presente trabalho apresentou um melhor desempenho do que o algoritmo antigo quando os erros da curvatura após um único passo de tempo foram avaliados. Essa melhora na estimativa da curvatura também pode ser observada na geração de correntes espúrias de menor magnitude para  $\theta$  igual a  $45^\circ$  e  $150^\circ$  após 100 mil passos de tempo.

## 5.2. GOTA EM DESEQUILÍBRIO

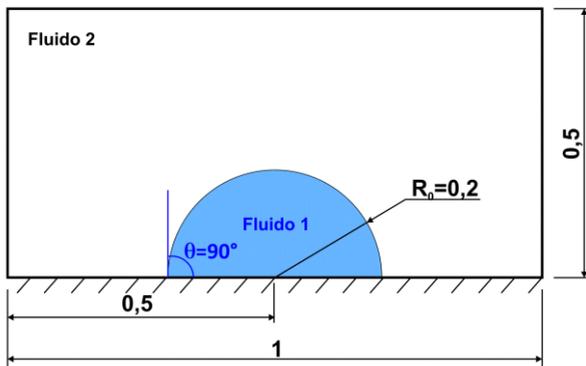
Visando a analisar qualitativamente a evolução do escoamento com o tempo, um segundo problema foi simulado: uma gota inicialmente em equilíbrio à qual é imposto um novo valor do ângulo de contato, provocando o seu escoamento até atingir uma nova configuração de equilíbrio, que respeite o novo valor de  $\theta$ .

A configuração inicial do problema é ilustrada na Figura 61. Inicialmente a gota se encontra em equilíbrio, formando um ângulo de  $90^\circ$  com a superfície. Novamente os efeitos gravitacionais são desprezados.

Os fluidos 1 e 2 possuem os mesmos valores para as propriedades físicas utilizados no teste da gota estática, resultando em um número de Ohnesorge de aproximadamente  $1,33 \times 10^{-2}$ , mesmo valor usado por Afkhami e Bussmann (2008).

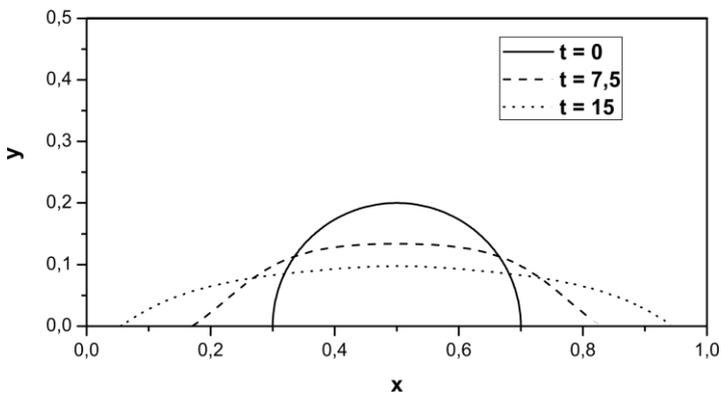
Assim como no caso da gota estática, são aplicadas condições de impermeabilidade e deslizamento a todas as fronteiras, com exceção da fronteira sul, à qual é imposta condição de impermeabilidade e não-deslizamento. Para atender às restrições no tamanho do passo de tempo impostas pelos métodos VOF e CSF (ver capítulo 3), foi utilizado um  $\Delta t$  igual a  $10^{-4}$  e a simulação foi realizada por 150 mil passos de tempo. Foram empregados critérios de convergência de  $10^{-5}$  para as componentes da velocidade,  $10^{-3}$  para a pressão e  $10^{-5}$  para a fração volumétrica.

Duas situações foram simuladas: na primeira um ângulo de contato de  $30^\circ$  é imposto à gota, provocando seu espalhamento e, na segunda, um ângulo de  $150^\circ$  é aplicado à gota, causando a sua contração. Em ambos os casos, o domínio foi discretizado por uma malha com  $160 \times 80$  volumes.

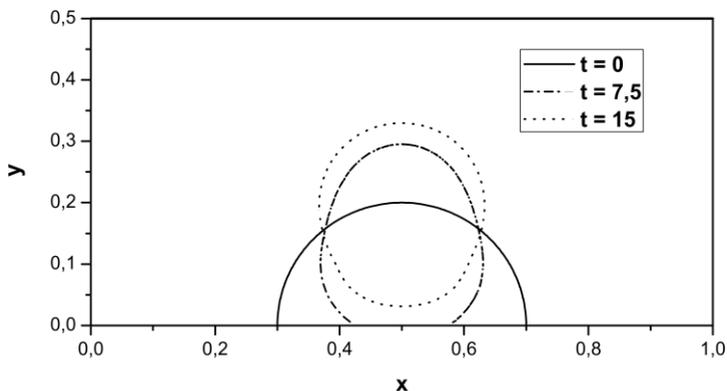


**Figura 61.** Configuração inicial do segundo teste: a uma gota inicialmente em equilíbrio é imposto um novo ângulo de contato.

A forma adquirida pela gota em diferentes instantes é mostrada na Figura 62. Para o ângulo de  $30^\circ$ , a gota se espalha sobre a superfície, adquirindo uma forma mais plana. Já para  $\theta$  igual a  $150^\circ$ , a gota se contrai e, por fim, se destaca da superfície. Segundo Afkhami e Bussmann (2008), esse desprendimento da gota é devido às fortes forças interfaciais e à ausência de efeitos da gravidade. Esses comportamentos concordam com os obtidos por Afkhami e Bussmann (2007; 2008).

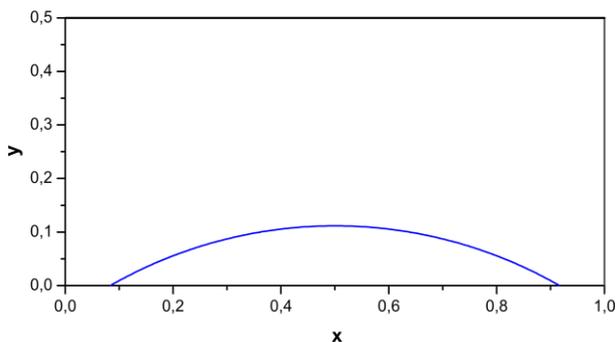


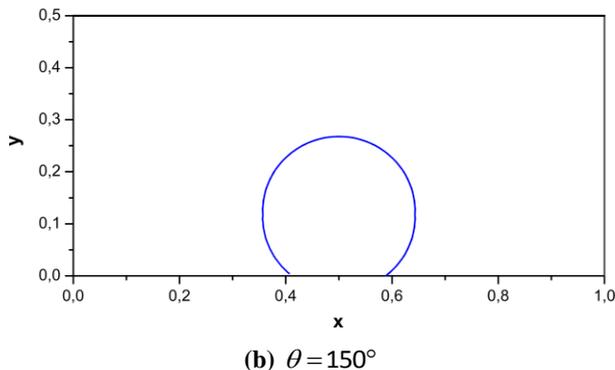
(a) Ângulo de contato de  $30^\circ$ .

(b) Ângulo de contato de  $150^\circ$ .

**Figura 62.** Forma da gota em diferentes instantes de tempo após a imposição de novos valores de  $\theta$ .

Quando o escoamento atingir o regime permanente, isto é, quando a magnitude do campo de velocidade for da ordem da magnitude das velocidades espúrias obtidas no teste da gota estática, a forma da gota respeitará o valor do novo ângulo de contato e sua área será equivalente à área de uma semicircunferência de raio igual a 0,2. Ou seja, para o ângulo de contato de  $30^\circ$ , o raio final da gota será igual a 0,833 e, para  $\theta$  igual a  $150^\circ$ , o raio final será igual a 0,144, resultando nas formas mostradas na Figura 63.

(a)  $\theta = 30^\circ$



**Figura 63.** Forma da gota em equilíbrio após imposição de novos ângulos de contato.

Para medir o desvio da forma da gota ao longo do tempo de sua forma esperada no equilíbrio, foi empregada a norma  $L_1$  do erro da fração volumétrica, dada por

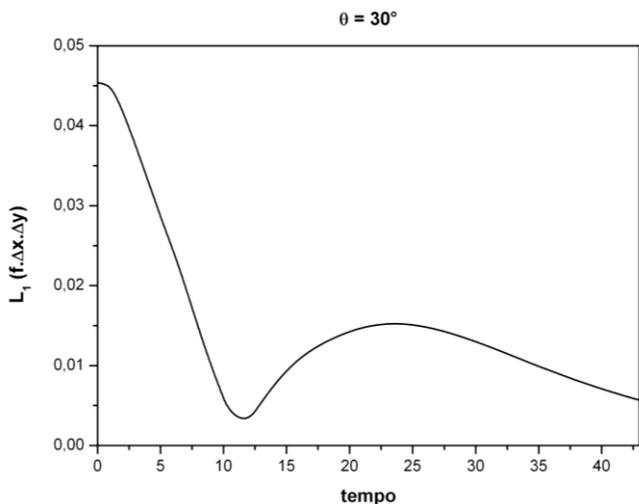
$$L_1(f \cdot \Delta x \cdot \Delta y) = \sum_{i=1}^N |f_{i,exata} - f_i| \Delta x \cdot \Delta y \quad (5.6)$$

onde  $f_{i,exata}$  é a fração volumétrica do volume  $i$  correspondente à gota ilustrada na Figura 63.

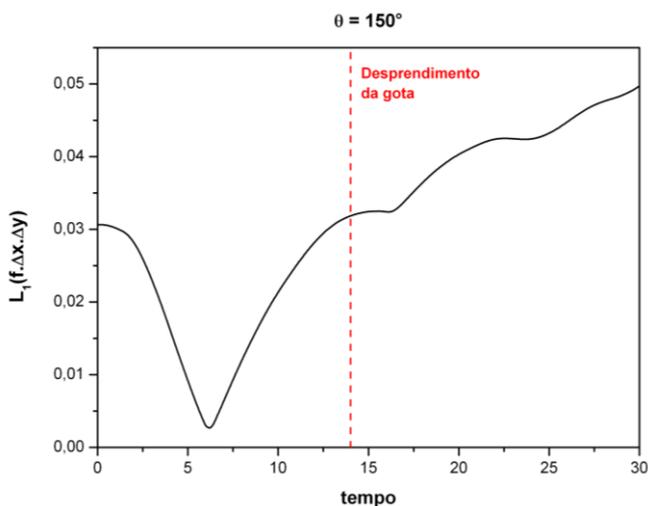
Os resultados obtidos para essa norma para os dois valores de  $\theta$  são mostrados na Figura 64. Com o decorrer do tempo, após passar por oscilações em sua interface decorrentes do campo induzido de velocidade pelo novo ângulo, a gota tende a adquirir sua forma final de equilíbrio apenas para a situação com ângulo de  $30^\circ$ . Já para  $\theta$  igual a  $150^\circ$ , o desprendimento da gota provoca uma mudança drástica em suas forma e posição, quando comparadas à configuração que ela atingiria no equilíbrio, aumentando a norma  $L_1$  do erro da fração volumétrica.

Para essas duas situações, também é apresentado o comportamento da velocidade média do escoamento ao longo do tempo (norma  $L_1$  da velocidade), mostrado nos gráficos da Figura 65. Como pode ser constatado do gráfico para  $\theta$  igual a  $30^\circ$ , no equilíbrio, a magnitude da velocidade tende aos valores das correntes espúrias, indicando que o regime permanente foi atingido. Neste caso, após 430 mil passos de tempo, o equilíbrio ainda não foi atingido, porém, a

velocidade média continua decrescendo com o tempo e, ao final da simulação, seu valor é de  $8,2 \times 10^{-4}$ .



(a)  $\theta = 30^\circ$



(b)  $\theta = 150^\circ$

**Figura 64.** Norma  $L_1$  do erro no campo de fração volumétrica após a imposição de um novo ângulo de contato.

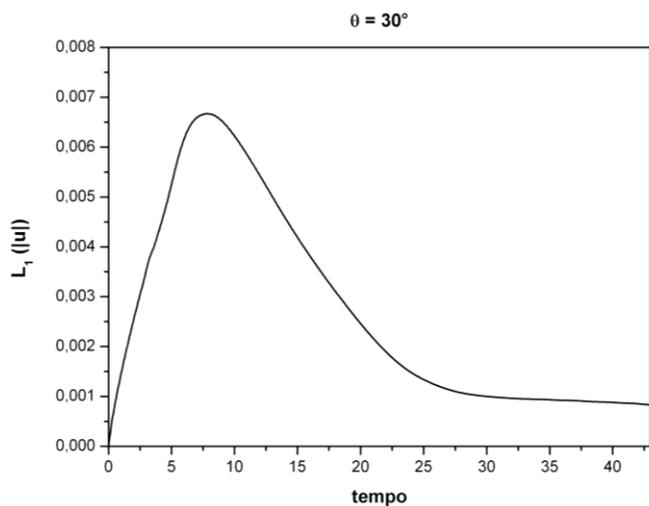
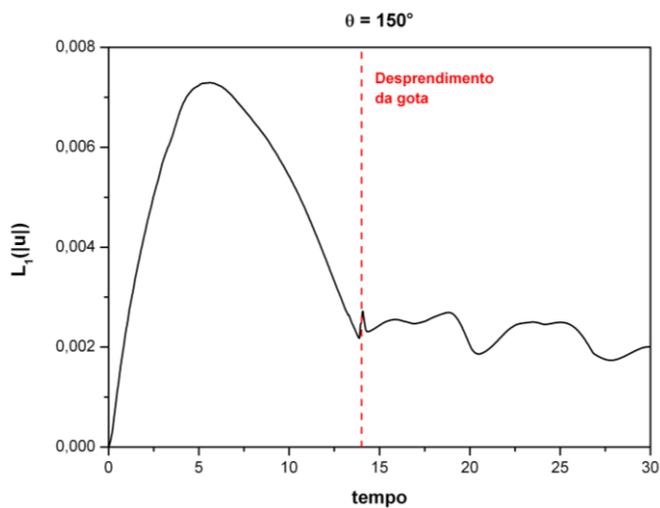
Já para o segundo valor do ângulo, o momento em que a gota se destaca da superfície é refletido sob a forma de um pico na velocidade média do escoamento (em torno de 140 mil passos de tempo). Após o desprendimento da gota, a velocidade apresenta um comportamento levemente decrescente com o tempo.

Outro ponto explorado neste trabalho é a questão do comprimento de *escorregamento* (*slip length*) que, conforme mencionado anteriormente, para o método dos volumes finitos empregando o método VOF, é igual a  $\Delta y/2$  (metade do incremento espacial, considerando uma parede horizontal). Para verificar a variação da posição da linha de contato da gota com o refino da malha, simulações foram realizadas empregando passo de tempo igual a  $10^{-4}$  e quatro tamanhos diferentes de malhas: 40 x 20, 80 x 40, 160 x 80 e 320 x 160 volumes. O mesmo caso abordado anteriormente foi resolvido: a uma gota com formato de uma semicircunferência inicialmente em equilíbrio é imposto um novo ângulo de contato de  $60^\circ$ . A gota e o fluido que a envolve possuem os mesmos valores das propriedades físicas dos problemas anteriores e ela se encontra centrada num domínio com comprimento igual a 1 e altura igual a 0,5, cuja fronteira sul é impermeável e com condição de não-deslizamento. Neste caso, a ação da gravidade também é desprezada.

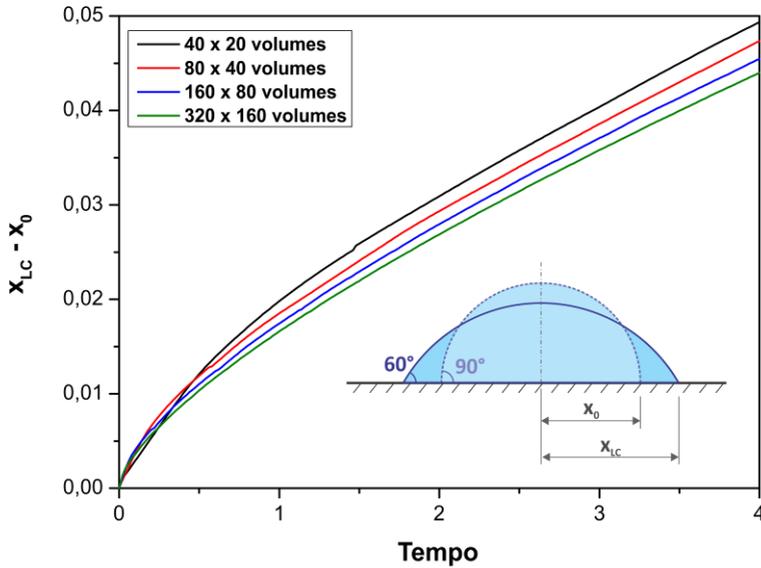
Com essas novas simulações, constatou-se que, após 40 mil passos de tempo, a distância percorrida pela linha de contato é menor quanto mais refinada a malha (Figura 66). Entretanto, a diferença entre a posição final da linha de contato obtida com as malhas mais grossa e mais fina é de apenas  $5,36 \times 10^{-3}$ . Ou seja, é menor do que o lado de um volume da malha com 160 x 80 volumes. Assim, como pode ser observado na Figura 67, a posição da gota não é significativamente afetada.

Os resultados obtidos no teste da gota em desequilíbrio concordam qualitativamente com aqueles publicados na literatura, inclusive no aspecto de desprendimento da gota para o ângulo de  $150^\circ$ . Na situação em que não há desprendimento ( $\theta = 30^\circ$ ), a velocidade média do escoamento tende ao valor espúrio, obtido no problema da gota estática.

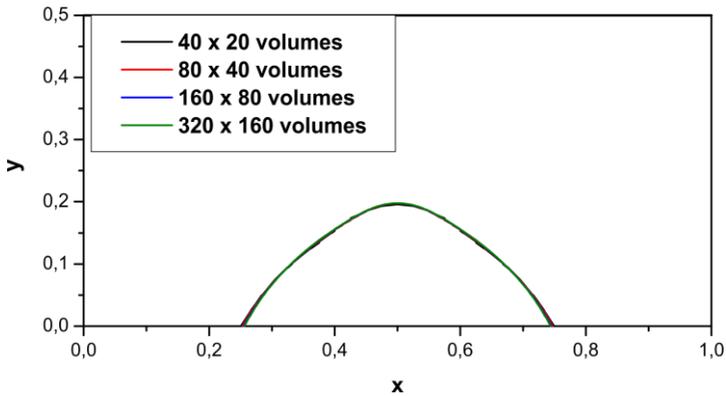
Mostrou-se também que, para o caso com ângulo de contato igual a  $60^\circ$ , a linha de contato percorre distâncias diferentes em um mesmo tempo de simulação quando diferentes tamanhos de malha são empregados. Porém, essa diferença não afeta significativamente a posição final da gota.

(a)  $\theta = 30^\circ$ (b)  $\theta = 150^\circ$ 

**Figura 65.** Norma  $L_1$  da velocidade após a imposição de um novo ângulo de contato.



**Figura 66.** Posição da linha de contato para diferentes tamanhos de malha e  $\theta = 60^\circ$ .



**Figura 67.** Interface da gota após 40 mil passos de tempo. Foi imposto um novo ângulo igual a  $60^\circ$ .

### 5.3. CONCLUSÕES

Neste capítulo foi validado o modelo HF para o cálculo da curvatura da interface nos volumes vizinhos a uma parede. Constatou-se que este método apresenta uma deficiência quando a função altura  $H_{cl}$  – obtida por meio de um estêncil perpendicular à parede – não respeita os limites da malha ( $h_{inf}$  e  $h_{sup}$ ). Propôs-se então uma modificação no algoritmo original do método, a qual resultou em menores erros na estimativa da curvatura da interface após um único passo de tempo para ângulos de contato menores do que  $60^\circ$ . Outro benefício agregado por este método modificado foi a redução das correntes espúrias para  $\theta$  igual a  $45^\circ$  e  $150^\circ$ .

Como será visto no sétimo capítulo, o algoritmo original produz resultados incoerentes na simulação do efeito Jamin, os quais foram corrigidos pela aplicação do algoritmo modificado.

O método HF também foi validado em uma situação dinâmica (desequilíbrio da gota), concordando qualitativamente os resultados obtidos neste trabalho com aqueles publicados na literatura. E, apesar de existir na literatura uma discussão sobre o comprimento de escorregamento e sua influência nos resultados, verificou-se que a posição final da gota praticamente não foi afetada por esse comprimento.

## 6. PARALELIZAÇÃO

Neste capítulo será apresentada a estratégia de paralelização do código computacional proposta por esta tese para simular os escoamentos bifásicos abordados aqui.

As restrições ao passo de tempo impostas pelos métodos VOF e CSF (equações (3.28) e (2.10)) podem ser muito rígidas, resultando em um  $\Delta t$  muito pequeno. Além disso, alguns dos escoamentos simulados neste trabalho envolvem escalas de comprimento muito pequenas, cuja discretização espacial resulta em pequenos valores de  $\Delta x$  e  $\Delta y$ , os quais, por sua vez, implicam menores valores do passo de tempo. Esse é o caso, por exemplo, da simulação do efeito Jamin, que será apresentada no sétimo capítulo. Para que este efeito seja significativo, as forças capilares devem ser da mesma ordem que as forças inerciais e viscosas e isso só ocorre em canais com pequenas dimensões ou quando a tensão interfacial é muito alta.

Tendo em vista essas limitações, a simulação computacional de alguns desses escoamentos é inviável de ser realizada em um único processador, considerando-se o tempo que ele despenderia para executar toda a simulação. Portanto, a paralelização do programa computacional desenvolvido nesta tese foi imprescindível.

Paralelizar um problema significa dividi-lo em partes menores e resolvê-las em diferentes processadores, objetivando um ganho em termos de tempo computacional. Essa é uma alternativa à capacidade limitada de processamento dos computadores pessoais.

O processo de paralelização do código computacional pode ser realizado de diversas formas. Pode-se, por exemplo, paralelizar apenas o *solver* do sistema linear, optar-se por decompor o domínio no espaço e/ou no tempo ou utilizar o método de Multiblocos (FERZIGER; PERIC, 2002).

Nesta tese, optou-se pelo método de Multiblocos por ser uma forma relativamente simples de tratar o problema.

Nesse tipo de método, o domínio computacional é dividido em  $n$  subdomínios (denominados partições) de acordo com a geometria do problema e cada um desses subdomínios é associado a um processador diferente. Em cada um deles, é obtida a solução do escoamento (variáveis  $u$ ,  $v$  e  $P$ ). Uma vez que a solução do escoamento em um subdomínio depende da solução do escoamento nas partições vizinhas, deve haver a comunicação entre eles dos valores das variáveis na região de sobreposição entre as partições, conforme ilustrado na Figura 68. Isto

é necessário, pois as variáveis nessa região em comum atuam como condição de contorno da partição vizinha.

A Figura 68 mostra o particionamento de um domínio computacional, para um escoamento bidimensional, em dois subdomínios.

Nesta Figura 68, a área hachurada indica a região de sobreposição entre as partições. Na paralelização do código computacional, decidiu-se empregar apenas duas colunas/linhas como região comum a partições vizinhas, que corresponde ao tamanho mínimo dessa região para um arranjo desencontrado de variáveis.

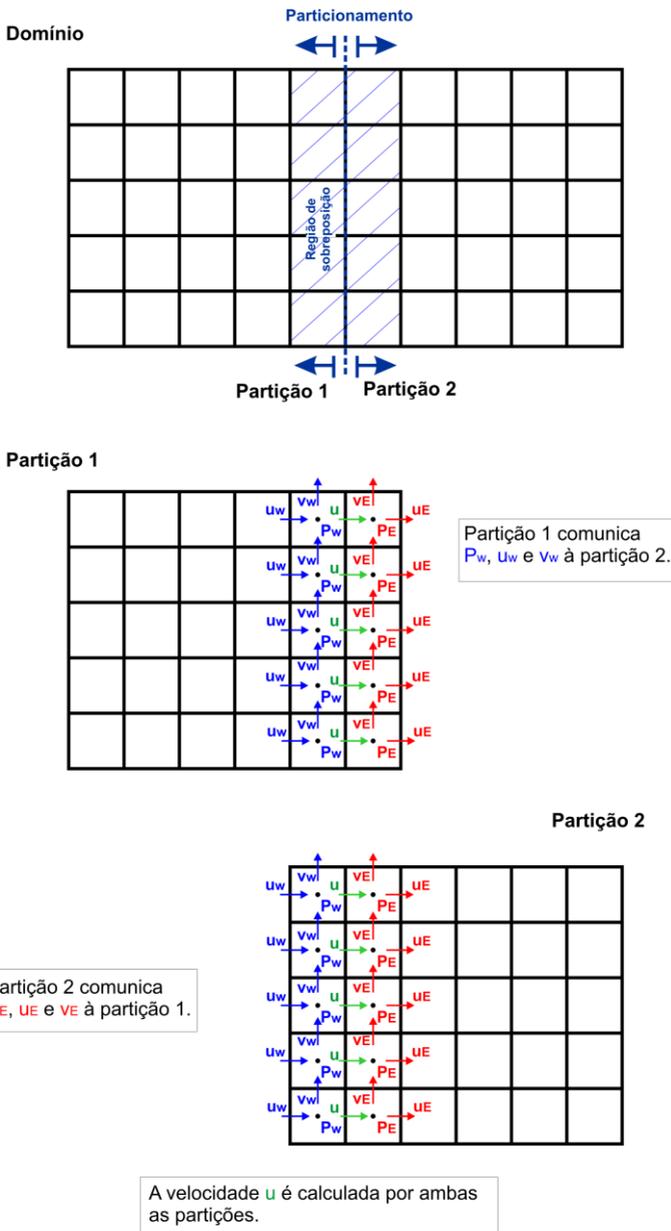
Tomando-se a Figura 68 como referência, tem-se que as variáveis  $u$ ,  $v$  e  $P$  em vermelho correspondem às condições de contorno<sup>35</sup> da partição 1 e são calculadas pela partição 2. Já as variáveis em azul são condições de contorno para a partição 2 e são obtidas da solução do escoamento na partição 1. Logo, a partição 1 comunicará os valores das variáveis em azul para a partição 2 e esta partição informará à partição 1 os valores das variáveis em vermelho.

Já a velocidade  $u$  em verde na Figura 68 corresponde à variável calculada por ambas as partições na região de sobreposição. Como é utilizado o método PRIME (*Pressure Implicit Momentum Explicit*) para a solução do problema do acoplamento pressão-velocidade, os valores dessa velocidade calculados por ambas as partições só diferem entre si se os campos das propriedades físicas (massa específica e viscosidade) forem diferentes nessa região para cada subdomínio.

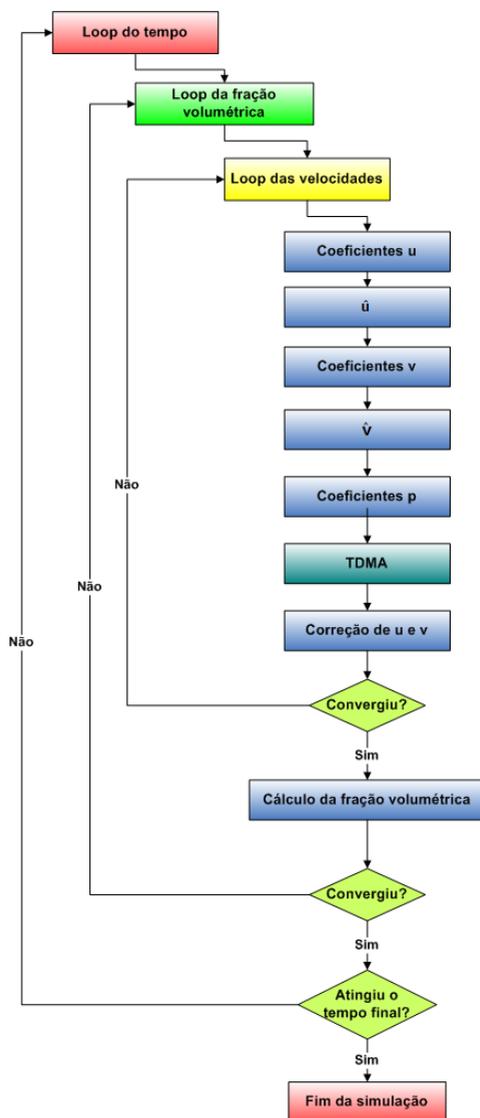
Deve-se ressaltar que a divisão do domínio em subdomínios deve ser realizada procurando-se manter o mesmo número de volumes de controle em cada partição, de forma que nenhum dos subdomínios fique sobrecarregado. A sobrecarga de um dos processos implica maior tempo ocioso dos demais processos, tendo em vista que os outros processadores deverão esperar até o processador com carga excessiva terminar o seu cálculo para haver a troca de informações.

---

<sup>35</sup> Valores prescritos da pressão e das componentes da velocidade.



**Figura 68.** Particionamento de um domínio para um problema bidimensional.



**Figura 69.** Algoritmo do programa serial<sup>36</sup>.

<sup>36</sup> O termo “serial” se refere à solução do problema não-paralelizado executado em um único processador.

Em relação a essa comunicação entre as partições, o momento em que ela deve ocorrer depende da estratégia de paralelização e do método de solução do escoamento adotados. No problema abordado neste trabalho, conforme exposto no capítulo 3, primeiramente são determinados os coeficientes de  $u$ ,  $v$  e  $P$  e os valores de  $\hat{u}$  e  $\hat{v}$ ; então resolve-se o sistema linear da pressão  $e$ , com esse novo campo de pressão, as velocidades são corrigidas. Quando o campo de velocidade satisfizer o critério de convergência, calcula-se o novo campo de fração volumétrica  $e$ , conseqüentemente, os novos campos de massa específica e de viscosidade. Esse algoritmo é mostrado na Figura 69.

Uma vez que foi escolhido o método de Multiblocos para paralelizar o algoritmo, a comunicação dos novos valores das pressões nas regiões de sobreposição deve ser feita logo após a resolução do sistema linear (indicado na Figura 69 pelo bloco TDMA<sup>37</sup>). Por sua vez, os novos valores das velocidades  $u$  e  $v$  serão informados às partições vizinhas após a correção das velocidades.

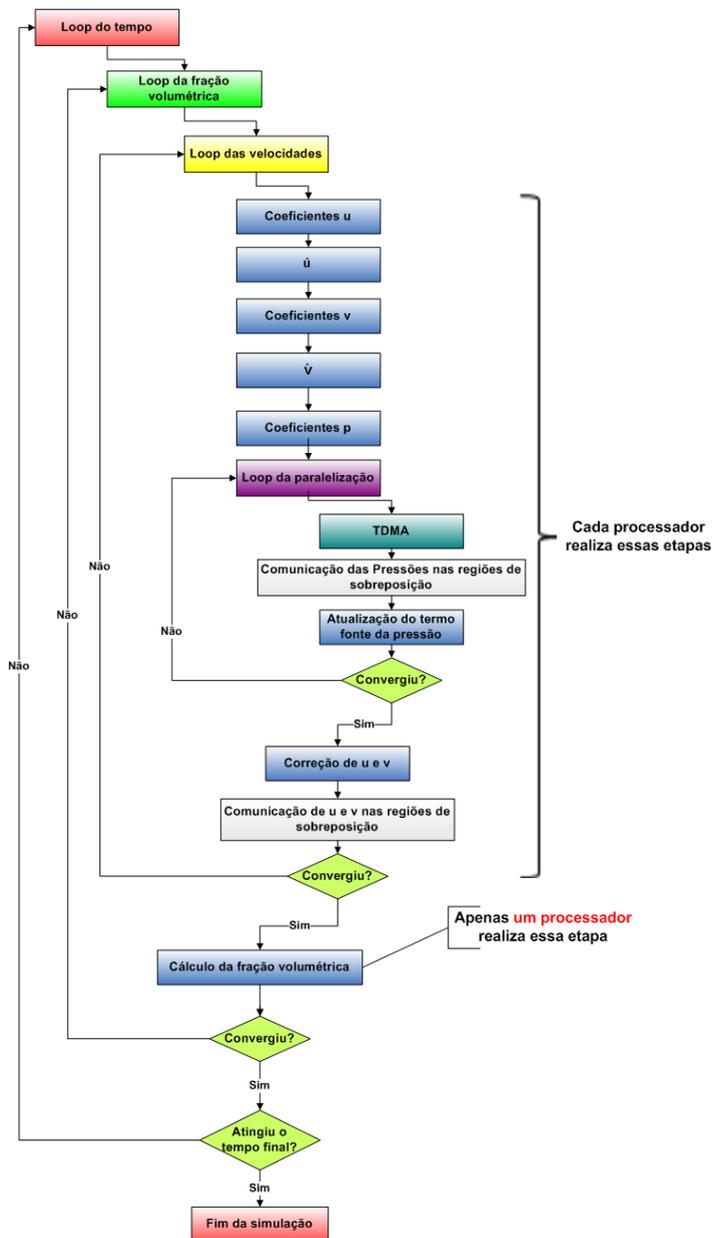
No caso de se optar por também paralelizar o cálculo do campo de fração volumétrica, deve-se comunicar os novos valores dessa variável na região de sobreposição a cada partição vizinha após o cálculo de todo o campo, possibilitando a determinação dos valores das propriedades físicas naquela região. Neste trabalho, optou-se por realizar o cálculo desse campo de forma serial<sup>38</sup>, ou seja, empregando-se apenas um processador que, ao final desta etapa, informará a todas as partições os novos valores de  $\rho$  e  $\mu$  em todo o domínio. Os motivos que conduziram a essa escolha serão expostos adiante.

Portanto, como apenas o cálculo de  $u$ ,  $v$  e  $P$  será paralelizado, a paralelização do programa seguirá o algoritmo apresentado na Figura 70.

---

<sup>37</sup> Na solução do sistema linear empregou-se o método TDMA linha por linha (*Tri-diagonal matrix algorithm*).

<sup>38</sup> O cálculo dos ângulos de contato e da curvatura da interface também é feito por um único processador.



**Figura 70.** Algoritmo do programa paralelo (GLITZ; SILVA; DONATTI; MALISKA, 2010).

Como pode ser observado nesta figura, há um processo iterativo (iniciado no bloco “Loop da paralelização”<sup>39</sup>) que compreende a solução do sistema linear (indicada pelo bloco TDMA). O emprego deste processo iterativo é um artifício computacional para que menos tempo seja despendido corrigindo-se as velocidades com um campo de pressão dito “menos correto”. Assim, o sistema linear do campo de pressão é resolvido em cada processador e, após essa solução, as pressões nas regiões de sobreposição são comunicadas às partições vizinhas e os termos fonte dessa variável são atualizados em cada processador. Volta-se então a resolver o sistema linear da pressão. Apenas quando um determinado critério de convergência é satisfeito é que se procede à correção das velocidades.

O critério de convergência nessa primeira etapa é definido como:

$$\left| P_{\text{overlap}} - P_{\text{overlap}}^{\text{old}} \right| < \text{Critério}_{\text{sistema linear}}, \quad (6.1)$$

onde o subscrito *overlap* indica que a pressão é avaliada na região de sobreposição; o sobrescrito *old* indica o valor da pressão na iteração anterior e o subscrito *sistema linear* indica que é utilizado o mesmo critério de convergência empregado na solução do sistema linear da pressão.

Após a correção das velocidades, outro critério deve ser checado, qual seja:

$$\left| u - u^{\text{old}} \right| \text{ e } \left| v - v^{\text{old}} \right| < \text{Critério}_{u,v}, \text{ em todo o domínio.} \quad (6.2)$$

Conforme mencionado anteriormente, como neste trabalho a etapa de cálculo do campo de fração volumétrica não foi paralelizada, não há a necessidade de se avaliar as velocidades na região de sobreposição (velocidades em verde na Figura 68), já que seus valores calculados por diferentes partições coincidirão. Essa coincidência ocorre porque, como as velocidades só são corrigidas após a troca de informações sobre a pressão, as velocidades em verde na Figura 68 só variarão caso  $\hat{u}$  (considerando uma fronteira vertical) varie. Entretanto,  $\hat{u}$  só é atualizada após a correção das velocidades e o intercâmbio de seus valores entre as partições. Assim, seu valor será o mesmo para as partições que a compartilham.

---

<sup>39</sup> De maneira alguma deve-se entender que o processo de paralelização ocorre apenas nesse ponto. Para tanto, são indicadas em todo o fluxograma as etapas que sofrem o processo de paralelização.

O último critério a ser satisfeito para que o programa avance no tempo é o mesmo critério do programa serial para o campo de fração volumétrica:

$$|f - f^{\text{old}}| < \text{Critério}_{\text{fração}}, \text{ em todo o domínio.} \quad (6.3)$$

Após a convergência do cálculo do campo de fração volumétrica, os valores de todas as variáveis calculados em cada uma das partições são informados a um único processador, que os ordena e posteriormente os comunica a cada uma das partições onde serão considerados como campos iniciais para o próximo passo de tempo.

Toda a etapa de comunicação entre os processadores foi realizada pela biblioteca MPI (*Message Passing Interface*) empregada no código computacional em Fortran (ANL, 2010; BARNEY, 2010).

Todas as simulações em paralelo foram executadas em dois clusters de processadores: no cluster SGI Altix ICE-8200 com 64 nós (cada um deles composto por 8 processadores) do Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC) e no cluster com 2892 processadores do Centro de Pesquisas da Petrobras (Centro de Pesquisas Leopoldo Américo Miguez de Mello – Cenpes).

Para avaliar o desempenho do algoritmo de paralelização e outros aspectos concernentes a esse procedimento, foram simulados três escoamentos bidimensionais:

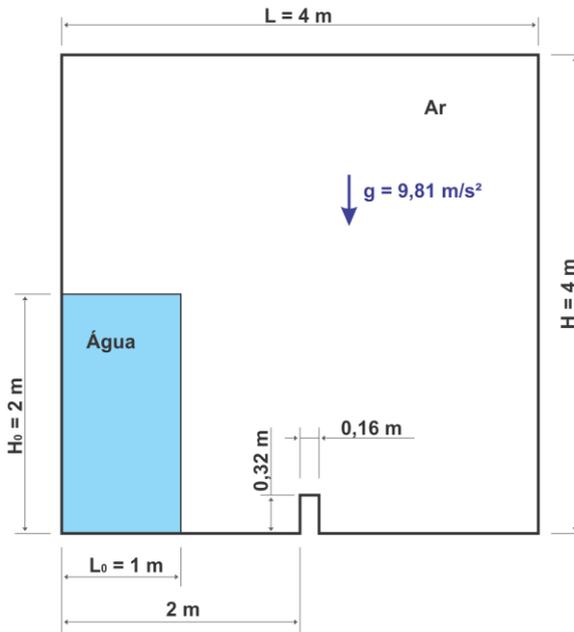
1. O primeiro caso é o do rompimento de uma barragem. Neste problema é posicionado um obstáculo na metade do comprimento do domínio computacional, que se opõe ao escoamento da água, cuja tensão interfacial com o ar não foi considerada;
2. O segundo caso também consiste no rompimento de uma barragem (*broken dam*), que libera uma coluna de 2 m de água. Porém, neste problema, não há um obstáculo à passagem da água. Neste caso também não é considerada a tensão interfacial;
3. O último caso é o de uma bolha de um fluido 1 em movimento ascendente no interior de um reservatório de um outro fluido (fluido 2) em repouso. Neste problema, os efeitos da tensão interfacial são modelados.

Nos três escoamentos simulados, os resultados para todas as variáveis obtidos com as simulações em paralelo são comparados aos resultados da simulação serial a fim de validá-los. Por sua vez, as

soluções obtidas com o programa serial para todos os três escoamentos foram validadas em capítulos anteriores.

### 6.1. ROMPIMENTO DE UMA BARRAGEM COM OBSTÁCULO (BROKEN DAM WITH AN OBSTACLE):

Este problema é o mesmo apresentado na seção 3.4 e é novamente ilustrado na Figura 71. Neste problema, quando a “tromba” d’água atinge a parede oposta, há uma grande variação da pressão em um curto intervalo de tempo.



**Figura 71.** Configuração inicial do problema do rompimento da barragem com obstáculo.

A simulação desse escoamento tem por objetivo testar a capacidade da estratégia de paralelização de propagar essa variação da pressão da partição em que ela ocorre até a partição mais afastada. Trata-se de um teste bastante rigoroso tendo em vista o alto gradiente de pressão envolvido. E, como o interesse neste problema é o de avaliar apenas o método de paralelização e a reprodução dos resultados obtidos

com o programa serial, uma malha uniforme grossa com 100 x 100 volumes foi utilizada.

Os valores dos parâmetros utilizados nas simulações numéricas são listados na Tabela 6-1.

**Tabela 6-1.** Valores dos parâmetros numéricos empregados nas simulações do rompimento da barragem com obstáculo.

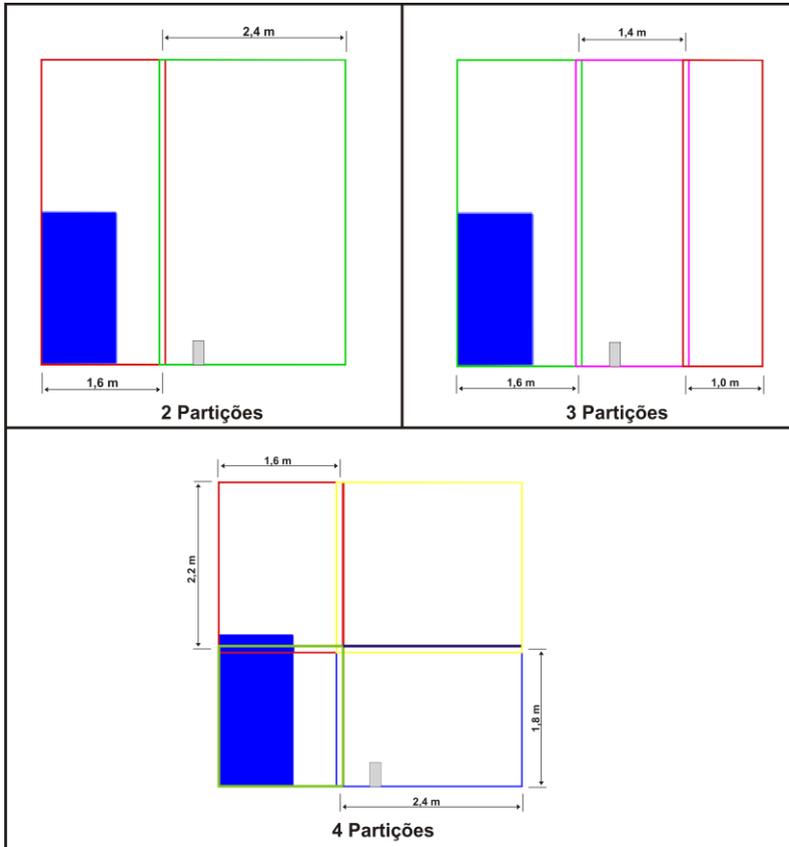
<b>Parâmetro</b>	<b>Valor</b>
Passo de tempo	$10^{-4}$ s
Tempo final da simulação	1,25 s
Critério <sub>sistema linear</sub>	1 Pa
Critério <sub>u,v</sub>	$10^{-3}$ m/s
Critério <sub>fracção</sub>	$10^{-5}$
Número de partições	2, 3 e 4 partições

Foram utilizadas condições de contorno de não-deslizamento e impermeabilidade em todas as fronteiras do domínio.

Nas simulações em paralelo, empregaram-se os mesmos critérios da simulação em serial, cujos resultados foram utilizados como padrão nas comparações com os resultados obtidos com o código em paralelo. O particionamento do domínio deste problema é mostrado na Figura 72.

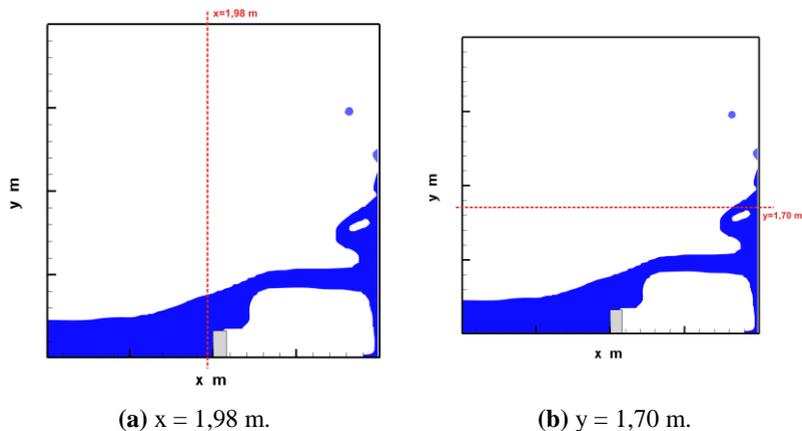
A região de sobreposição nesses três particionamentos é formada pelas seguintes porcentagens de volumes de controle do domínio: 2% (duas partições), 4% (três partições) e 3,96% (quatro partições). Quanto maior o número de volumes de controle abrangido por essa região, maior o tempo gasto com a comunicação entre as partições.

Para esse problema, a comparação entre a solução obtida pelo processamento em paralelo com a obtida por um único processador foi feita em três tempos distintos: em  $t=0,85$  s (antes do impacto da tromba contra a parede), em  $t=0,92$  s (durante o impacto) e em  $t=1,25$  s (tempo final da simulação). Em todos esses instantes de tempo, os resultados das simulações em paralelo coincidiram com os da simulação em serial.



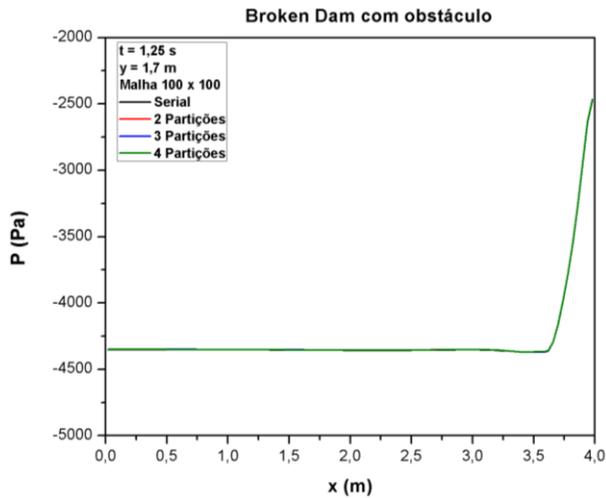
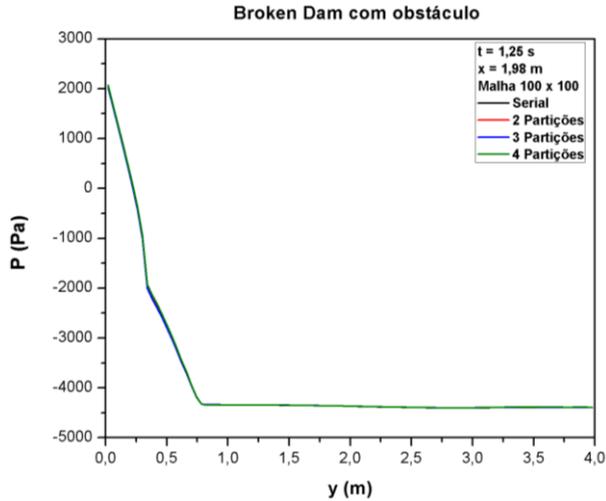
**Figura 72.** Particionamento do domínio para o problema da *broken dam* com obstáculo.

A título de ilustração, são apresentados nas Figura 74, Figura 75 e Figura 76 apenas os gráficos, para o instante de tempo  $t=1,25$  s, da comparação dos valores da pressão e das componentes da velocidade ao longo de uma linha que corta o domínio na vertical ( $x = 1,98$  m) e ao longo de outra linha que corta o domínio na horizontal ( $y=1,70$  m), conforme indicado na Figura 73.

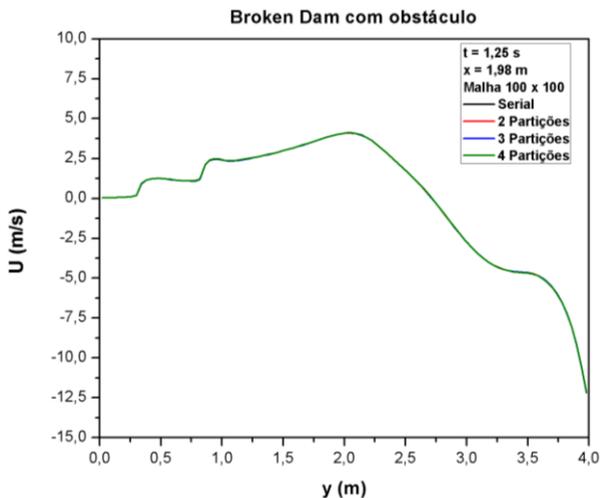
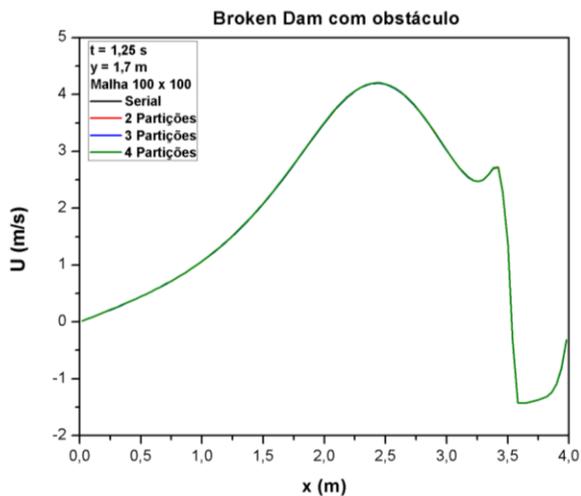


**Figura 73.** Campo de fração volumétrica em  $t = 1,25$  s e linhas de referência para os gráficos das comparações entre os resultados obtidos serial e paralelamente.

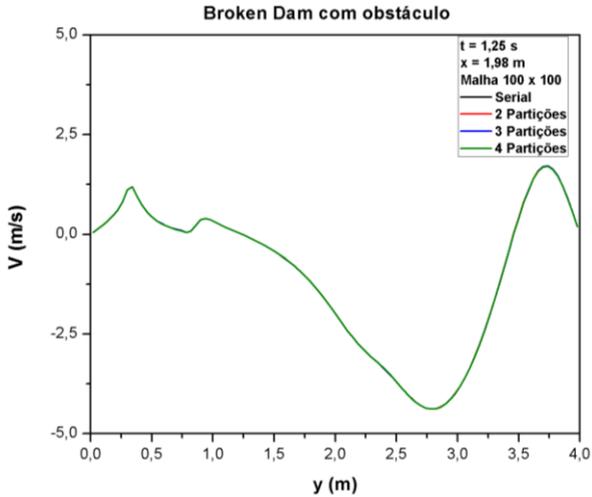
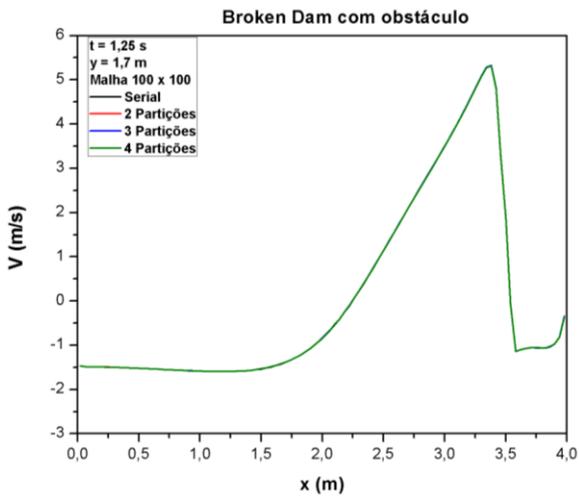
Como pode ser observado nessas figuras, todos os resultados são coincidentes. Com base neles, pode-se concluir que o objetivo deste teste foi atingido e que o algoritmo de paralelização conseguiu reproduzir os resultados obtidos com o código serial.



**Figura 74.** Comparação de valores da pressão obtidos nas simulações em paralelo e em serial em  $t = 1,25$  s.

(a)  $x = 1,98 \text{ m}$ .(b)  $y = 1,70 \text{ m}$ .

**Figura 75.** Comparação de valores da componente horizontal da velocidade obtidos nas simulações em paralelo e em serial em  $t = 1,25 \text{ s}$ .

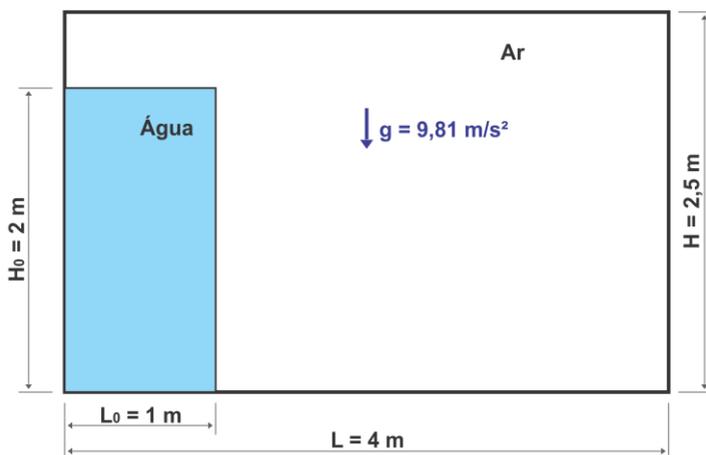
(a)  $x = 1,98 \text{ m}$ .(b)  $y = 1,70 \text{ m}$ .

**Figura 76.** Comparação de valores da componente vertical da velocidade obtidos nas simulações em paralelo e em serial em  $t = 1,25 \text{ s}$ .

## 6.2. ROMPIMENTO DE UMA BARRAGEM SEM OBSTÁCULO (BROKEN DAM)

Este problema é semelhante ao anterior, porém agora não há mais um obstáculo ao escoamento da água.

Na simulação deste escoamento aplicaram-se condições de contorno de não-deslizamento e impermeabilidade em todas as fronteiras. A configuração inicial do problema é ilustrada na Figura 77.



**Figura 77.** Configuração inicial do problema da *broken dam* sem obstáculo.

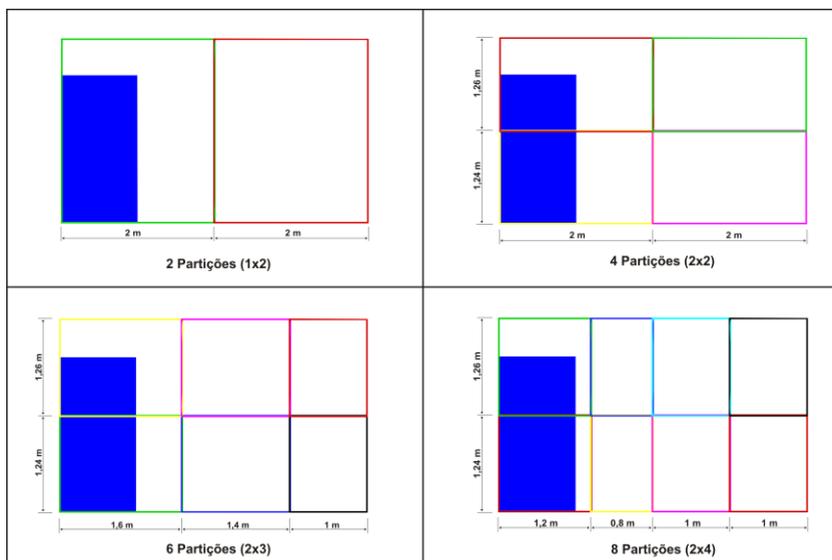
O domínio computacional foi discretizado em uma malha uniforme com  $800 \times 500$  volumes de controle, resultando em  $\Delta x = \Delta y = 5 \text{ mm}$ . A Tabela 6-2 apresenta os valores de alguns parâmetros utilizados nas simulações.

**Tabela 6-2.** Valores dos parâmetros numéricos empregados nas simulações do rompimento da barragem sem obstáculo.

Parâmetro	Valor
Passo de tempo	$10^{-4} \text{ s}$
Tempo final da simulação	0,7 s
Critério <sub>sistema linear</sub>	1 Pa
Critério <sub>u,v</sub>	$10^{-3} \text{ m/s}$
Critério <sub>fracção</sub>	$10^{-5}$

Como um dos objetivos desta etapa é testar a estratégia de paralelização do algoritmo, o domínio foi dividido de quatro formas distintas, as quais são ilustradas na Figura 78:

- Duas partições no formato matricial  $1 \times 2$ , com 0,25% dos volumes do domínio na região de sobreposição;
- 4 partições ( $2 \times 2$ ), com 0,649% dos volumes do domínio na região de sobreposição;
- 6 partições ( $2 \times 3$ ), com 0,898% dos volumes do domínio na região de sobreposição;
- 8 partições ( $2 \times 4$ ), com 1,147% dos volumes do domínio na região de sobreposição.



**Figura 78.** Particionamento do domínio do problema da *broken dam* sem obstáculo.

Neste problema, além da validação dos resultados em paralelo, o tempo computacional despendido em cada uma dessas simulações é comparado ao consumido pela simulação em serial. O ideal seria que, quanto maior o número de partições, menor o tempo gasto pela simulação. Entretanto, com o aumento do número de subdomínios, a quantidade de volumes na região de sobreposição cresce. Isso implica um maior tempo de comunicação entre os processadores. Logo, há um

limite acima do qual um aumento do número de partições acarretará em um aumento do tempo computacional.

Os resultados para todas as variáveis obtidos com os diferentes esquemas de particionamentos do domínio coincidiram com os resultados obtidos na simulação serial e não serão apresentados aqui.

Já os tempos gastos em cada simulação assim como os tempos consumidos na solução do sistema linear da pressão e o fator de *speed-up* são apresentados na Tabela 6-3. Ressalta-se que, nesta tabela, os valores do tempo consumido na solução do sistema linear pelas simulações em paralelo correspondem ao maior tempo acumulado gasto nessa etapa por uma das partições.

O fator de *speed-up* é um parâmetro usualmente utilizado na análise de desempenho de simulações em paralelo. Esse parâmetro corresponde à razão entre o tempo total consumido pela simulação serial e o tempo gasto pela simulação em paralelo (FERZIGER; PERIC, 2002):

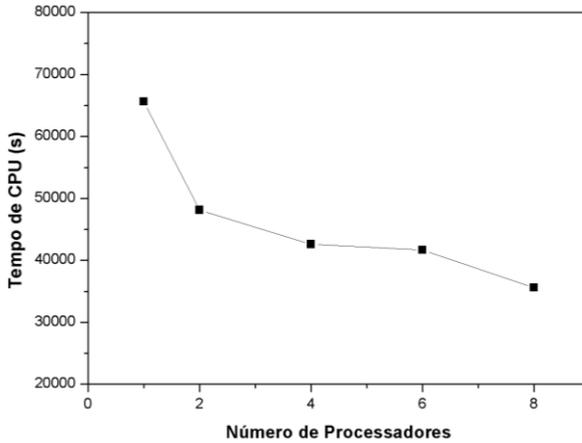
$$S_n = \frac{T_s}{T_n}, \quad (6.4)$$

onde  $n$  corresponde ao número de processadores. Quanto maior o valor desse fator, menor é o tempo gasto por uma simulação utilizando  $n$  processadores em relação ao tempo da simulação serial. O valor ideal do fator de *speed-up* é igual a  $n$ , mas, geralmente, ele é menor do que esse valor.

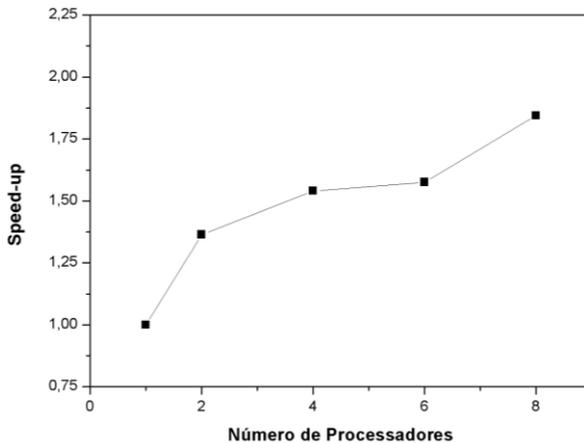
**Tabela 6-3.** Tempos computacionais gastos pelas simulações da *broken dam* e fator de *speed-up*.

Número de Processadores	Tempo consumido na solução do sistema linear (s)	Tempo computacional total (s)	Fator de <i>speed-up</i> ( $S_n$ )
1	24374,21	65613,26	1
2	10401,58	48112,02	1,36
4	6891,21	42599,60	1,54
6	3592,6	41640,81	1,57
8	859,74	35577,68	1,84

O comportamento do tempo total de computação e do fator de *speed-up* em função do número de processadores pode ser observado na Figura 79.



(a) Tempo total de CPU.

(b) Fator de *speed-up*.

**Figura 79.** Tempo total de computação e fator de *speed-up* em função do número de processadores para o problema da *broken dam* sem obstáculo.

De acordo com os valores apresentados na Tabela 6-3, não houve uma economia expressiva de tempo computacional e a eficiência da paralelização diminuiu com o aumento do número de processadores. Atribuiu-se esse baixo desempenho à não-otimização do algoritmo paralelizado. Contudo, na seção 6.3, será apresentada uma ação que melhorou a performance das simulações em paralelo.

Apesar do baixo desempenho apresentado, os tempos despendidos na solução do sistema linear foram reduzidos significativamente, como pode ser constatado da segunda coluna da Tabela 6-3. Isto indica que o desempenho global do algoritmo foi prejudicado pelo tempo gasto no cálculo dos coeficientes das componentes da velocidade.

Na simulação serial, o tempo consumido pela solução do sistema linear corresponde a mais de um terço do tempo computacional total, como pode ser observado na Tabela 6-3. Como em todas as simulações a etapa de mapeamento da interface gastou em média 4000 segundos, verificou-se que o cálculo dos coeficientes constituiu a etapa mais onerosa da simulação, correspondendo a aproximadamente 46% do tempo total de computação da simulação serial.

Com o intuito de diminuir o tempo gasto no cálculo dos coeficientes, testou-se um novo ciclo no algoritmo serial. A decisão de implementá-lo no algoritmo em paralelo foi tomada de acordo com seu desempenho nos testes seriais.

Nesse novo ciclo, o problema do acoplamento pressão-velocidade é separado do problema não-linear. Ou seja, em vez de se atualizar os coeficientes das componentes da velocidade logo que elas são corrigidas, atualiza-se o termo fonte da pressão e resolve-se o sistema linear novamente. Proceda-se desta forma por  $n$  iterações. Os coeficientes das velocidades só são atualizados após esse número  $n$  de iterações, conforme ilustrado na Figura 80.

O problema da *broken dam* sem obstáculo foi simulado por um único processador utilizando o novo ciclo iterativo para diferentes números de iterações e empregando diferentes tamanhos de malhas. O tempo final gasto na computação de cada um desses casos é apresentado na Tabela 6-4.

Desta tabela, conclui-se que o número ótimo de iterações do ciclo do acoplamento pressão-velocidade é igual a dois para todas as malhas empregadas. Para um ciclo com mais de duas iterações, a economia de tempo computacional no cálculo dos coeficientes é menor do que o aumento no gasto de tempo nas etapas de solução do sistema linear, de correção das componentes da velocidade e de cálculo de  $\hat{u}$ ,  $\hat{v}$  e do termo fonte da pressão.

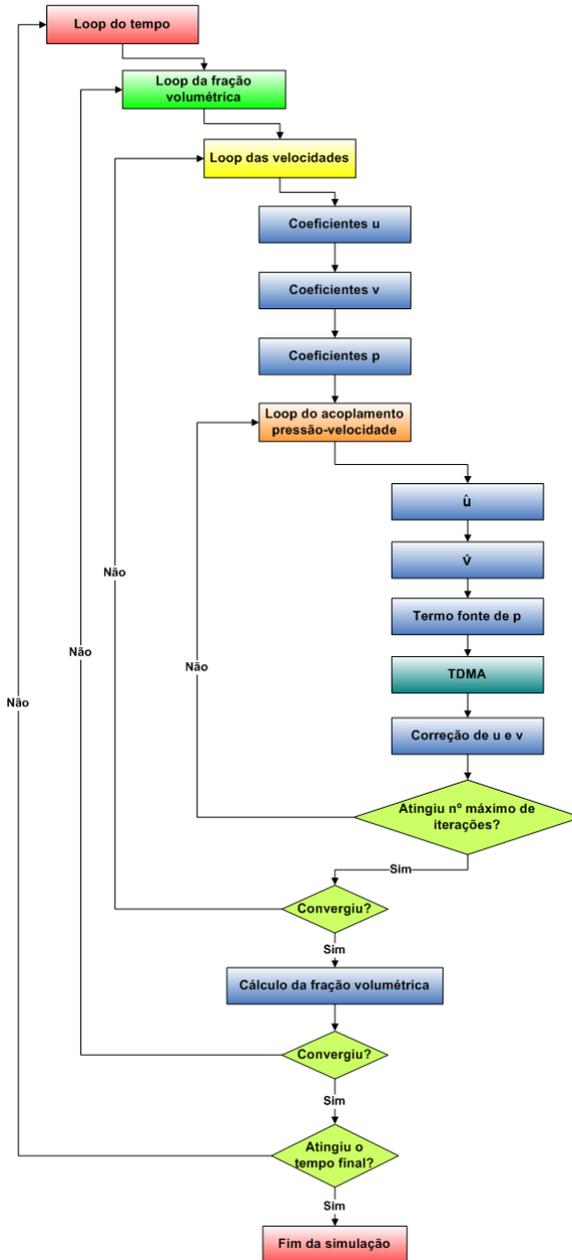


Figura 80. Algoritmo serial alternativo.

**Tabela 6-4.** Tempos computacionais gastos pelas simulações seriais utilizando o algoritmo da Figura 80.

<b>Malha</b>	<b>Número de iterações do ciclo acoplamento pressão-velocidade</b>	<b>Tempo computacional total (s)</b>
40 x 25	1	14,73
	2	14,48
	3	15,92
80 x 50	1	71,16
	2	63,89
	3	69,09
120 x 75	1	199,41
	2	173,13
	3	184,67
800 x 500	1	79233,35 <sup>40</sup>
	2	66003,20
	3	68162,24
	4	78830,35
	5	83240,20

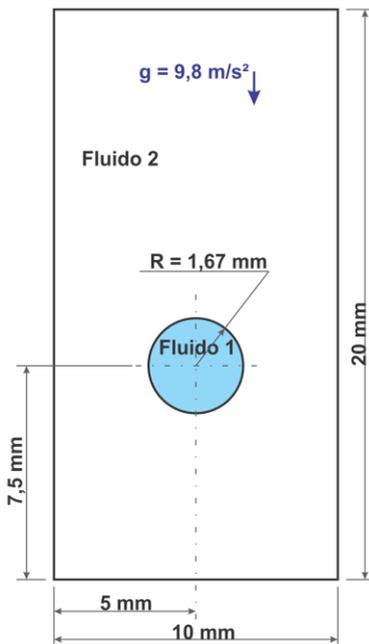
Como não há garantia de que esse ganho se estenderá ao algoritmo paralelizado, não foi adotado o novo ciclo iterativo nas simulações em paralelo.

### 6.3. BOLHA ASCENDENTE

Nesta seção é abordado novamente o problema de uma bolha de um fluido imersa em outro fluido mais denso, que se encontra em repouso. Devido à diferença de densidade entre os dois fluidos, a bolha sobe em direção ao topo do domínio. A Figura 81 ilustra a configuração inicial deste problema.

Os valores das propriedades físicas de ambos os fluidos empregados nas simulações desse problema são apresentados na Tabela 6-5, bem como os valores dos demais parâmetros computacionais utilizados nas simulações. Assim, para esses valores, os números de Morton e de Eötvös são respectivamente iguais a 0,1 e 104.

<sup>40</sup> O tempo computacional despendido neste caso não coincide com o valor apresentado na Tabela 6-3, pois as simulações foram executadas em programas diferentes, já que um novo programa foi confeccionado para realizar o algoritmo alternativo.



**Figura 81.** Configuração inicial do problema da bolha ascendente.

**Tabela 6-5.** Propriedades físicas dos fluidos e parâmetros numéricos.

Parâmetro	Valor
Massa específica do fluido 2 ( $\text{kg/m}^3$ )	1000
Massa específica do fluido 1 ( $\text{kg/m}^3$ )	25
Viscosidade dinâmica do fluido 2 (Pa s)	$1,04 \times 10^{-2}$
Viscosidade dinâmica do fluido 1 (Pa s)	$1,22 \times 10^{-4}$
Tensão interfacial (N/m)	$1,047 \times 10^{-3}$
Passo de tempo	$5 \times 10^{-5}$ s
Tempo final da simulação	0,09 s
Critério <sub>sistema linear</sub>	$10^{-3}$ Pa
Critério <sub>u,v</sub>	$10^{-5}$ m/s
Critério <sub>fracção</sub>	$10^{-5}$

Nas simulações do escoamento, o domínio computacional foi discretizado em uma malha uniforme com  $256 \times 512$  volumes e foram atribuídas condições de contorno de deslizamento e impermeabilidade a todas as fronteiras do domínio.

A curvatura da interface foi modelada utilizando o método das Funções Altura (HF) (Capítulo 4).

Assim como no problema anterior, nesta seção também será avaliada a redução do tempo computacional com o aumento do número de processadores utilizados e o impacto do cálculo da força devido à tensão interfacial no tempo de computação empregando a estratégia de paralelização escolhida.

Nesta análise, foram utilizados os seguintes particionamentos do domínio (Figura 82):

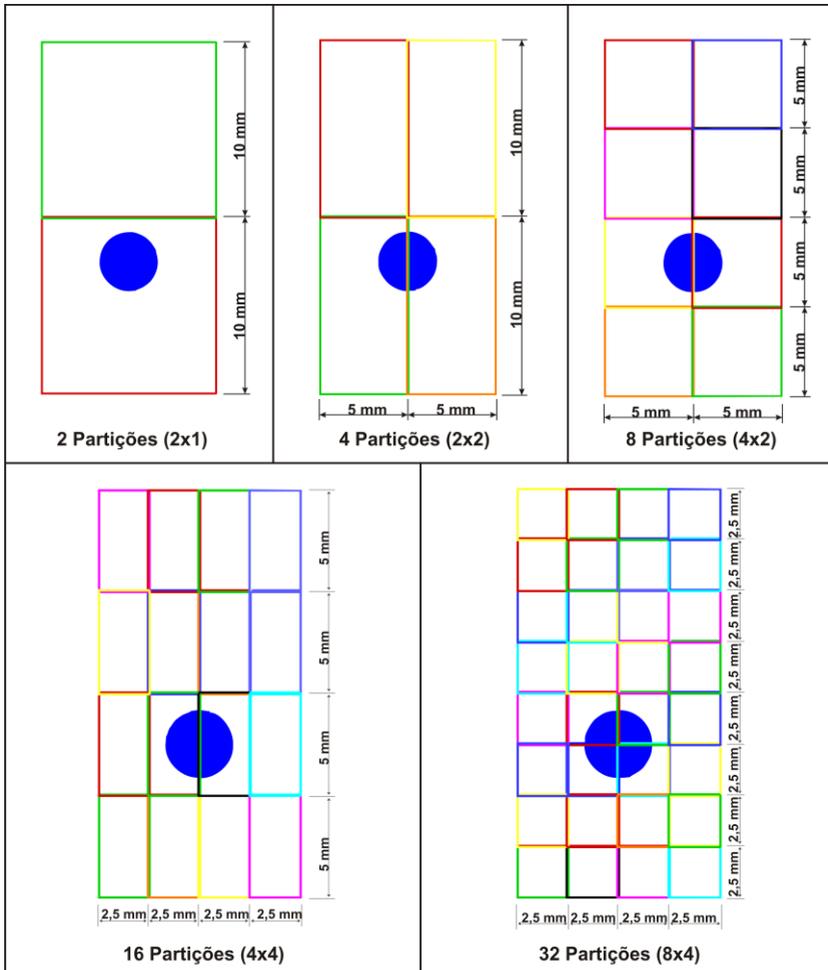
- Duas partições (2x1), com 0,39% dos volumes do domínio na região de sobreposição;
- 4 partições (2x2), com 1,17% dos volumes na região de sobreposição;
- 8 partições (4x2), com 1,94% dos volumes na região de sobreposição;
- 16 partições (4x4), com 3,49% dos volumes na região de sobreposição;
- 32 partições (8x4), com 5,01% dos volumes na região de sobreposição.

Assim como nas seções anteriores, os resultados para as variáveis do escoamento obtidos nas simulações em paralelo foram coincidentes com os obtidos pela simulação serial. A comparação entre esses resultados não será apresentada aqui.

Já os tempos computacionais e o fator de *speed-up* de cada uma das simulações são apresentados na Tabela 6-6 e seus comportamentos em função do número de processadores são exibidos na Figura 83.

Nesse caso, a redução no tempo de computação com o particionamento do domínio foi mais significativa do que no caso anterior, inclusive com melhores resultados para um número menor de processadores.

Entretanto, o desempenho do algoritmo paralelo ainda não é o esperado. Na tentativa de melhorar essa performance, limitou-se o número máximo de iterações do ciclo de paralelização a dez. Esse ciclo é representado pelo bloco “Loop da paralelização” na Figura 70. Essa restrição exigirá um maior número de iterações no loop das velocidades. Contudo, constatou-se que essa maior quantidade de iterações só é necessária na primeira iteração da fração volumétrica, sendo reduzida na segunda iteração. Além disso, verificou-se que essa alteração no algoritmo não prejudicou os resultados, que continuaram coincidindo com o resultado obtido por um único processador.



**Figura 82.** Particionamento do domínio do problema da bolha ascendente.

Na Tabela 6-7 são mostrados os valores do fator de *speed-up* para as partições para um máximo de dez loops da paralelização. O comportamento desse fato com o número de processadores é mostrado no gráfico da Figura 84.

**Tabela 6-6.** Tempos computacionais gastos pelas simulações da bolha ascendente e fator de *speed-up*.

Número de Processadores	Tempo computacional total (s)	Fator de <i>speed-up</i> ( $S_n$ )
1	129055,13	1
2	115282,75	1,12
4	70993,52	1,82
8	39824,31	3,24
16	30075,52	4,29
32	29927,86	4,31

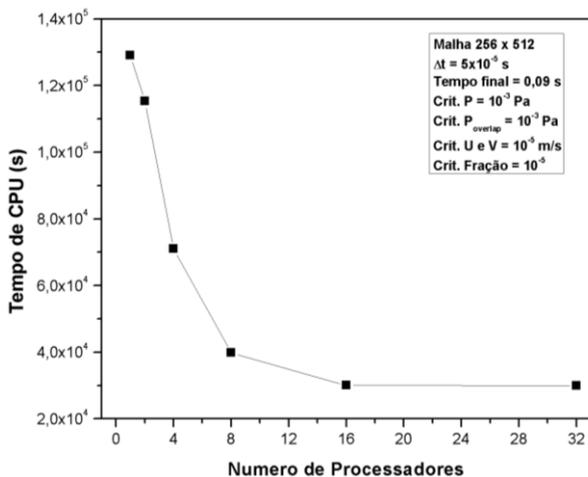
**Tabela 6-7.** Fator de *speed-up* das simulações da bolha ascendente com um número máximo de dez ciclos de paralelização.

Número de Processadores	Fator de <i>speed-up</i> ( $S_n$ )
1	1
2	1,85
4	3,50
8	6,48
16	8,30
32	9,49

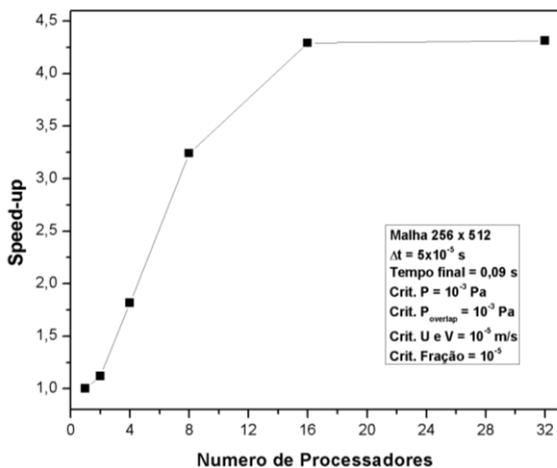
Como pode ser constatado desses resultados, a limitação do ciclo de paralelização incrementou o ganho em termos de tempo computacional das simulações em paralelo. Para até oito processadores, o fator de *speed-up* atingido foi muito bom, se distanciando pouco do desempenho ideal (que corresponde a um fator de *speed-up* igual ao número de processadores). Para 16 e 32 processadores, a troca de informações entre os processadores passa a onerar mais a simulação. Isso é refletido no fator de *speed-up* sob a forma de uma redução de sua taxa de crescimento.

Um aspecto que se desejava avaliar com a simulação do escoamento da bolha ascendente era o impacto no tempo de computação do cálculo da força devida à tensão interfacial. As componentes dessa força, como descrito no capítulo 3, são calculadas após a atualização do campo de fração volumétrica e sua determinação é considerada parte da etapa de “Cálculo da fração volumétrica” no fluxograma da Figura 70. A estimativa dessa força envolve a determinação da curvatura da

interface, o que acaba onerando essa etapa em termos de tempo de computação.

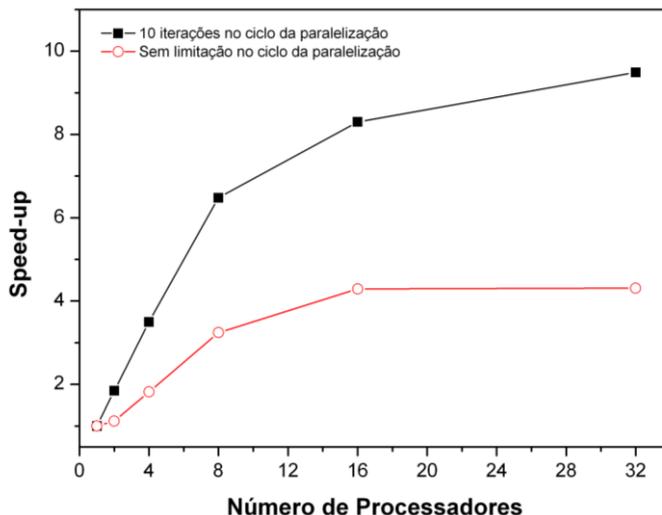


(a) Tempo total de CPU.



(b) Fator de *speed-up*.

**Figura 83.** Tempo total de computação e fator de *speed-up* em função do número de processadores para o problema da bolha ascendente.



**Figura 84.** Comparação entre os fatores de *speed-up* limitando a dez iterações no ciclo de paralelização (linha preta) e sem limitação (linha vermelha).

Como o tempo médio consumido por todas as simulações (serial e em paralelo) na etapa que envolve o mapeamento da interface e a determinação da força devido à tensão interfacial foi de aproximadamente 2000 segundos, número esse que representa apenas 14% do tempo total gasto pela simulação em paralelo mais rápida, conclui-se que o cálculo dos efeitos da tensão interfacial, por ser realizado de forma serial, não afeta significativamente o tempo de computação. Portanto, o tratamento serial desse cálculo consiste em uma opção adequada e não contribui com o aumento de informações compartilhadas pelos processadores. Caso se optasse por realizar essa etapa em mais de um processador, os valores das frações volumétricas, dos fluxos advectivos dessa variável e das componentes da força devida à tensão interfacial na região de sobreposição deveriam ser comunicados entre os processadores, o que poderia aumentar o tempo gasto pela etapa de comunicação e espera dos processos. Além disso, a necessidade de troca de informações acerca dos fluxos advectivos da fração volumétrica entre os processadores poderia causar um impacto maior na exatidão das soluções do escoamento obtidas pelas simulações em paralelo, uma vez que o mapeamento da interface é feito com um passo intermediário para alterar a direção de varredura do campo de fração volumétrica.

## 6.4. CONCLUSÕES

Nesse capítulo foram apresentados o algoritmo de paralelização e os resultados obtidos em três casos distintos utilizando esse algoritmo. No primeiro caso, limitou-se a avaliar a estratégia de paralelização e sua capacidade de propagar os campos das variáveis do escoamento a todas as partições do domínio. Já o segundo e o terceiro testes avaliaram a escalabilidade do código. O terceiro problema teve ainda como objetivo determinar os efeitos da inclusão da tensão interfacial no tempo total de computação e avaliar se a escolha por tratar de forma serial essa etapa do cálculo, bem como a determinação do campo de fração volumétrica, foi adequada.

Como pode ser constatado dos resultados, a escalabilidade do algoritmo de paralelização não foi tão satisfatória. Entretanto, como o objetivo da paralelização neste trabalho era o de reduzir os elevados tempos computacionais gastos pelas simulações, tornando-as viáveis, o aumento conseguido do fator de *speed-up* proporcionou uma boa redução do tempo computacional. Este foi o caso, por exemplo, da bolha ascendente. Com um único processador, a simulação consumia 36 horas e, quando 16 processadores foram empregados, ela passou a gastar pouco mais do que quatro horas.

Dos resultados, pode-se ainda verificar que o impacto do cálculo serial da força devida à tensão interfacial no tempo computacional foi pequeno e que a opção por tratar os parâmetros relativos à interface (fração volumétrica, curvatura da interface e força) de forma serial se mostrou adequada, não onerando excessivamente a computação do problema em paralelo como um todo.

Durante o desenvolvimento desta tese, não foi encontrado um trabalho na literatura que descrevesse em detalhes um algoritmo de paralelização da solução das equações de Navier-Stokes aplicada a um escoamento bifásico, onde a interface entre os fluidos é mapeada pelo método VOF associado ao método PLIC e os efeitos interfaciais são considerados. Portanto, pode-se creditar a esta tese também essa contribuição.



## 7. MODELO NUMÉRICO DO EFEITO JAMIN

Conforme mencionado na introdução desta tese, os modelos e técnicas aqui estudados para descrever parâmetros da interface foram aplicados à simulação de um efeito importante na área de Engenharia de Reservatórios de Petróleo, o Efeito Jamin, que foi apresentado no segundo capítulo.

Neste capítulo, será proposta uma modelagem deste fenômeno que permite a sua simulação numérica. A partir das simulações, é possível identificar a diferença de pressão crítica necessária para a liberação da gota no interior de um conduto e também a velocidade terminal que essa gota atinge.

Aqui também é proposto um modelo baseado no balanço de forças no canal para o cálculo dessa velocidade terminal da gota. Este modelo foi elaborado com base em outros modelos apresentados na literatura para escoamentos semelhantes (*slug flow* e *dry-plug flow*).

A escassez de artigos que abordem experimental ou numericamente o efeito Jamin motivou a aplicação dos métodos e técnicas estudados nesta tese na reprodução de tal fenômeno e na modelagem de parâmetros da interface. No presente trabalho pretendeu-se reproduzir o efeito Jamin, empregando-se os mesmos fluidos e sólido utilizados por Boukellal et al. (2009), por meio de simulações numéricas do escoamento bidimensional de uma gota presa às paredes de um canal. Cabe ressaltar que, pelo código implementado durante o desenvolvimento desta tese simular o escoamento bidimensional, uma comparação dos resultados aqui obtidos com aqueles publicados no trabalho de Boukellal et al. não é possível.

Conforme mostrado no capítulo 2, a diferença de pressão necessária para deslocar a gota aprisionada no canal deve ser no mínimo igual à diferença de pressão capilar crítica, expressa pela equação (2.53). Entretanto, essa equação não contempla efeitos viscosos e de aceleração dos fluidos em seu balanço e, portanto, pode ser aplicada apenas a uma situação estática.

### 7.1. MODELO NUMÉRICO

Para uma análise mais aprofundada e realista do Efeito Jamin, simulou-se numericamente o problema. Nessas simulações, é permitido à interface se deformar de forma que sua curvatura varie. Já o ângulo de contato foi tratado empregando-se uma combinação de duas estratégias:

- Na primeira estratégia, considerada no período em que a gota está imóvel e presa às paredes do canal, as linhas de contato mantêm as mesmas coordenadas do início da simulação (ou seja, permanecem fixas) e o ângulo de contato é calculado de forma a satisfazer essa condição, além de respeitar os novos valores do campo de fração volumétrica calculados após a sua advecção.
- Já na segunda estratégia, tomada quando a gota é deslocada pelo escoamento do fluido injetado, as linhas de contato são liberadas e modelos da literatura são empregados na determinação dos ângulos de contato dinâmicos de recuo e de avanço.

Ao utilizar a combinação dessas duas estratégias, duas perguntas concernentes ao problema são levantadas:

1. Qual a diferença de pressão crítica que deve ser aplicada ao canal, acima da qual a gota é desprendida das paredes dele?
2. Para uma pressão suficientemente alta, em que momento da simulação as linhas de contato devem ser liberadas e a gota entrará em movimento?

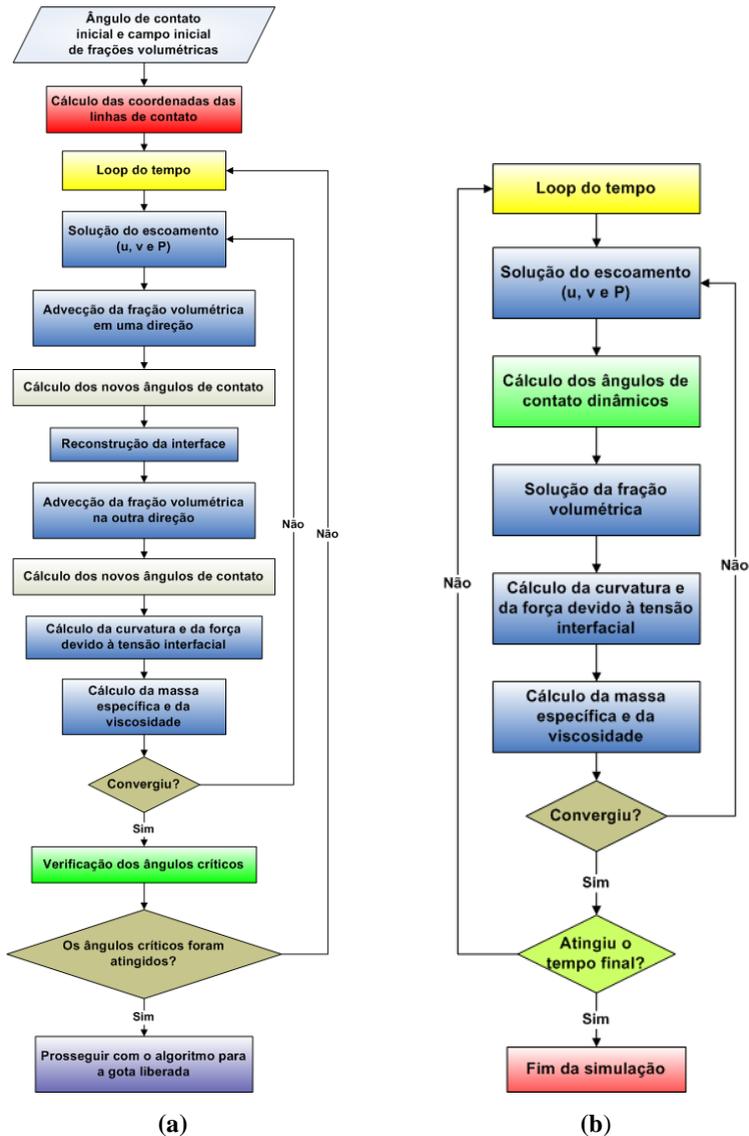
Para concluir a modelagem do problema, deve-se responder a essas duas questões.

A fim de determinar a diferença de pressão crítica, uma série de simulações foi executada, como será explicado adiante.

Já a resposta à segunda questão é simples e se baseia na histerese do ângulo de contato estático, cujos valores limites dos ângulos de avanço e de recuo podem ser medidos experimentalmente, como comentado anteriormente. Esse valor obtido experimentalmente representa o valor crítico para o ângulo de avanço (recuo) acima (abaixo) do qual a gota entra em movimento. Logo, no modelo numérico, estabelece-se que a gota entrará em movimento caso os ângulos de contato de avanço e de recuo ultrapassem seus valores críticos obtidos experimentalmente.

Quando a gota está presa, a cada novo passo de tempo são conferidos os valores dos ângulos de contato, a fim de verificar se seus valores críticos não foram atingidos. Após a liberação da gota, os ângulos de contato dinâmicos devem ser modelados. Para isso, são usados os modelos de Jiang e Tanner, que serão apresentados adiante.

Os algoritmos empregados nessas duas etapas são ilustrados na Figura 85.



**Figura 85.** Fluxogramas das estratégias adotadas na modelagem dos ângulos de contato quando: (a) a gota permanece presa e (b) a gota é liberada.

O cálculo das coordenadas das linhas de contato, indicado na Figura 85 (a), é feito com base no campo inicial de fração volumétrica, aproximando-se a interface por uma reta no volume que contém a linha de contato.

### 7.1.1. Dinâmica do escoamento

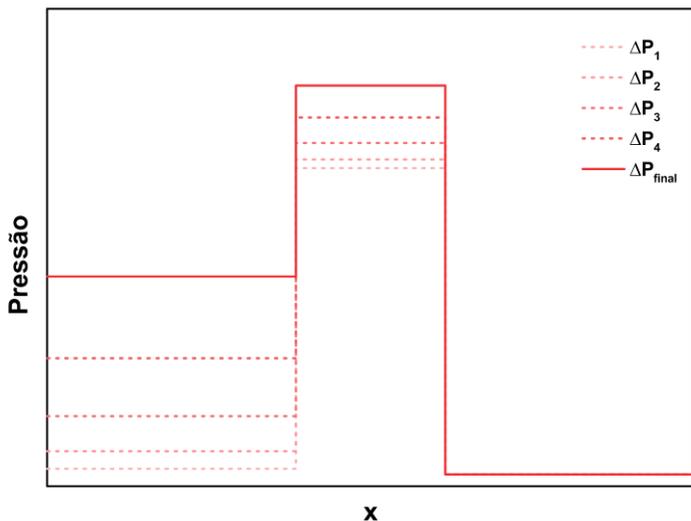
Considere a Figura 86 e suponha que  $P_E$  é igual a  $P_W$  e, portanto, não há escoamento no canal e a gota não se encontra deformada. A partir deste estado, suponha que  $P_W$  sofra uma série de aumentos infinitesimais, enquanto que a pressão na saída do canal é mantida nula (apenas para efeitos ilustrativos).



Figura 86. Esquema do efeito Jamin.

Então, a diferença de pressão no canal onde a gota se encontra presa começa a aumentar. Essa elevação da pressão provoca a deformação das duas interfaces da gota e, após um tempo suficiente para que as pressões à montante e à jusante da gota se uniformizem, a condição de equilíbrio é atingida, com  $(P_{\text{montante}} - P_{\text{jusante}})$  igual à diferença de pressão capilar  $(\Delta P_c)$ . Aplicando-se um novo aumento infinitesimal à pressão na entrada do canal, a gota se deforma mais um pouco, até a diferença de pressão capilar equivaler à diferença de pressão no canal. Continuando com esse processo de elevação gradual da pressão, uma sucessão de situações de equilíbrio ocorre até a situação limite, a partir da qual a gota escoará. Nessa situação, os ângulos da interface atingirão valores críticos e  $(P_{\text{montante}} - P_{\text{jusante}})$  se igualará à diferença de pressão capilar **crítica**. Por fim, com um novo aumento da pressão, a gota se desprenderá da superfície. Essa situação é prevista pela equação (2.53), que não considera efeitos dinâmicos, e está mostrada esquematicamente

na Figura 87 sob a forma do perfil de pressão no centro do canal em função de sua coordenada axial.



**Figura 87.** Perfil de pressão ao longo do canal em alguns instantes para um aumento infinitesimal de  $P_w$ .

Como as simulações numéricas mostrarão adiante, a introdução de uma variação abrupta na pressão na entrada do canal resulta em um aumento imediato dela ao longo de todo o canal. A gota então reage a esse aumento da pressão por meio de sua deformação. Com o tempo, a dinâmica do escoamento faz com que a deformação da gota aumente gradualmente. Por a gota estar presa, a pressão à montante dela aumenta com tempo, enquanto a pressão à jusante diminui. Enquanto estiver presa, a deformação da gota só cessará (e a pressão à montante e à jusante dela deixarão de variar) quando a diferença de pressão capilar se igualar à diferença de pressão aplicada ao canal ou quando a gota atingir seu estado crítico, a partir do qual ocorrerá o seu desprendimento. Ou seja, todo esse processo não é estático, é influenciado pelo atrito viscoso e pela aceleração dos fluidos e acredita-se que seja exatamente esse o comportamento do escoamento na realidade.

Portanto, se a pressão na entrada do canal for aumentada infinitesimalmente, a equação (2.53) prevê fielmente a diferença de pressão crítica. Mas, se este aumento da pressão for abrupto, será que

essa equação continuará válida, já que ela não considera efeitos dinâmicos? Ou seja, será que a diferença de pressão mínima **no canal** para que a gota seja deslocada é igual à diferença de pressão capilar crítica? Como será visto adiante, os efeitos dinâmicos exercem uma influência significativa na dinâmica que conduz ao desprendimento da gota e não deveriam ser desprezados quando se deseja determinar a diferença de pressão que deve ser aplicada ao canal. Além disso, a hipótese de que as pressões à montante e à jusante da gota se uniformizam nem sempre é verdadeira e, portanto, a diferença de pressão na gota não é igual à diferença de pressão no canal.

A dinâmica do efeito Jamin conduz a duas situações possíveis: numa delas a gota não é desprendida porque a diferença de pressão aplicada ao canal não é suficiente para vencer os efeitos capilares e, na outra, o efeito da diferença de pressão é maior do que os efeitos capilares e dinâmicos, sendo capaz de deformar a gota até seu estado crítico, quando então ela será desprendida das paredes do canal.

Na explicação que segue, quando houver referência à aceleração da gota, na verdade pretende-se dizer que o fluido em seu interior está acelerando, sem que necessariamente a gota esteja solta das paredes do canal.

Como mencionado anteriormente, o que ocorre durante a dinâmica do efeito Jamin não é um processo estático, com consecutivas uniformizações da pressão ao longo de todo o canal.

Ao ser aplicada uma diferença de pressão ao canal, a pressão em todo ele aumenta, dando origem a um gradiente de pressão. Esse gradiente provoca o escoamento dos fluidos, os quais, por sua vez, causam a deformação das interfaces da gota. Essa deformação faz com que surja uma diferença de pressão capilar, cuja magnitude aumenta com a progressiva deformação das interfaces.

Como as linhas de contato estão presas às paredes do canal, há um aumento da diferença de pressão na **gota**, que provoca a aceleração dos fluidos. Novamente o escoamento provoca a deformação da gota, implicando um aumento da força de adesão e, como os ângulos críticos ainda não foram atingidos e a gota não foi liberada, a diferença de pressão na gota aumenta, acelerando os fluidos e assim por diante. Esse processo persiste até que o crescimento das forças de adesão e viscosa seja maior do que o aumento da diferença de pressão na gota. A partir desse ponto, a aceleração dos fluidos diminui até que o fluido no interior da gota atinja sua velocidade máxima. Como a inércia dos fluidos continua provocando a deformação da gota em direção à saída do canal,

a força de adesão continua aumentando mesmo com a desaceleração dos fluidos. Esse aumento da força de adesão, por sua vez, aumenta a desaceleração dos fluidos.

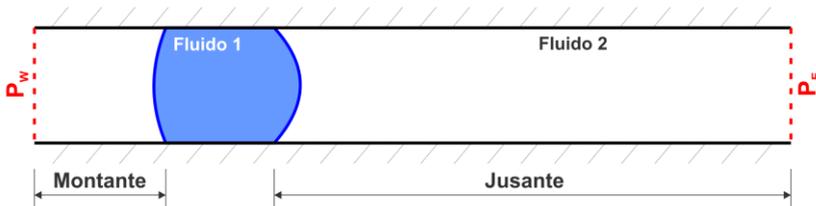
Ao longo deste processo, três situações podem ocorrer:

1. Os ângulos críticos são atingidos e a gota é liberada durante sua aceleração;
2. Durante a desaceleração dos fluidos com a gota ainda presa, a inércia deles continua provocando a deformação da gota até que seus ângulos críticos sejam alcançados. Nesse momento, a gota é liberada das paredes do canal;
3. Os ângulos de contato críticos nunca são atingidos e a gota permanece presa ao canal.

Para a discussão que segue, considere o balanço de forças num volume de controle envolvendo a gota:

$$\Delta P_{gota} \cdot H \cdot w = F_{QM} + F_{adesão} + F_{viscosa}, \quad (7.1)$$

onde  $F_{QM}$  é a taxa de variação da quantidade de movimento linear do fluido no interior da gota,  $H$  é a altura do canal e  $w$  é a sua largura (dimensão perpendicular ao plano do papel). Considere também a Figura 88, que ilustra as regiões do canal à montante e à jusante da gota.



**Figura 88.** Regiões à montante e à jusante da gota.

### Liberação da gota durante a sua aceleração

Tome-se um canal com comprimento 40 vezes maior do que a sua altura (distância entre as paredes). O perfil de pressão neste canal em diferentes instantes de tempo é mostrado na Figura 89 para a situação em que uma diferença de 300 Pa é aplicada aos extremos do canal. Os resultados apresentados nessa figura foram obtidos em uma simulação empregando uma malha com 800 x 20 volumes e correspondem ao perfil de pressão ao longo da linha  $j=10$ . Essa

diferença de pressão é suficiente para deformar a gota até seu estado crítico ainda no período em que os fluidos estão sendo acelerados.

Como pode ser observado na Figura 89 (a), (b) e (c), durante a aceleração do fluido no interior da gota, a pressão à montante dela aumenta, enquanto que a pressão à jusante diminui quando a gota ainda se encontra presa. Esse comportamento é devido justamente ao fato de a gota estar presa.

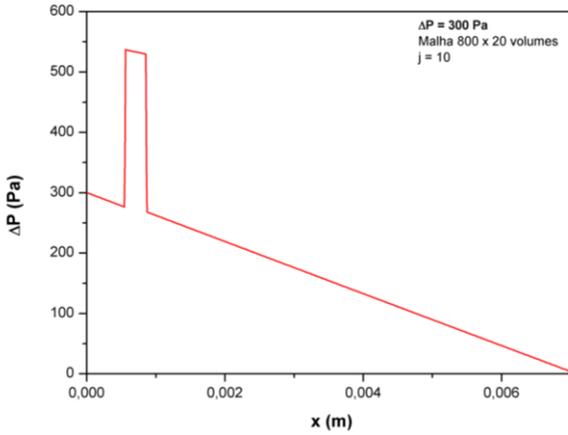
Com o prosseguimento da deformação da gota, haverá um momento em que finalmente os ângulos críticos são atingidos e a gota é desprendida. A partir deste instante, a pressão à montante da gota diminui e a pressão à jusante dela aumenta (Figura 89 (d) e (e)). Após o seu desprendimento, a gota é acelerada em direção à saída do canal até que a resistência imposta pelos efeitos capilares e viscosos seja igual à força devido à diferença de pressão aplicada ao canal. Neste momento, ela passa a se deslocar a uma velocidade constante e o gradiente de pressão ao longo do canal e da gota se mantém constante, apenas acompanhando a translação dela (Figura 89 (f)).

Em resumo:

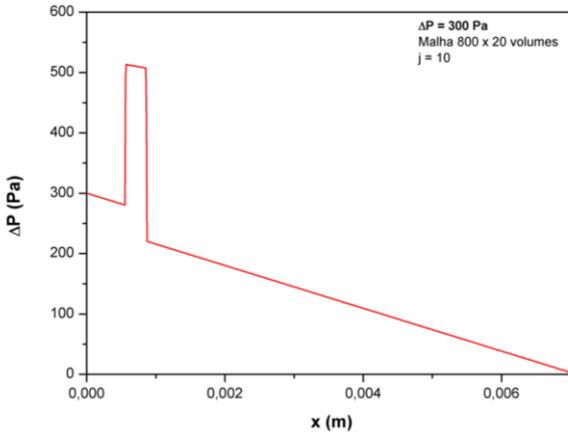
1. Aplica-se uma diferença de pressão ao canal, que provoca o escoamento dos fluidos;
2. O escoamento, por sua vez, provoca a deformação das interfaces da gota;
3. Essa deformação gera uma diferença de pressão capilar, que se opõe ao escoamento dos fluidos;
4. Como as linhas de contato das interfaces permanecem fixas (uma vez que os ângulos críticos não foram atingidos), a pressão à montante da gota aumenta, enquanto que a pressão à jusante diminui, resultando em um aumento da diferença de pressão na gota e entre as porções à montante e à jusante dela;
5. Esse aumento na diferença de pressão acelera os fluidos, provocando uma maior deformação das interfaces e o aumento da diferença de pressão capilar;
6. Esse cenário prossegue com a aceleração dos fluidos e a deformação da gota até que os ângulos críticos sejam atingidos e a gota seja liberada.

Durante o deslocamento da gota após ela ser liberada, é interessante verificar que as pressões imediatamente à montante e à jusante da gota não são constantes ao longo da seção transversal do

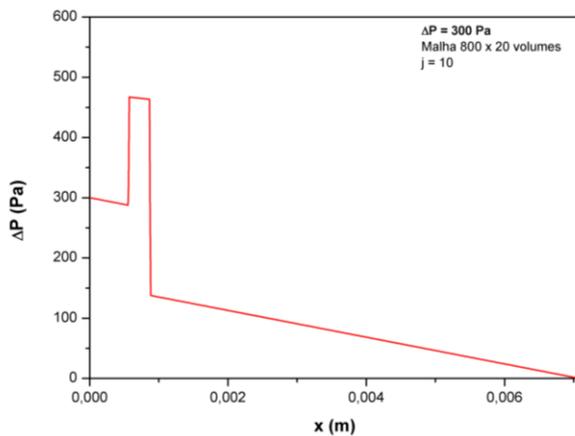
canal. A distribuição de pressão é mostrada na Figura 90 para uma diferença de 300 Pa e após 50 mil passos de tempo.



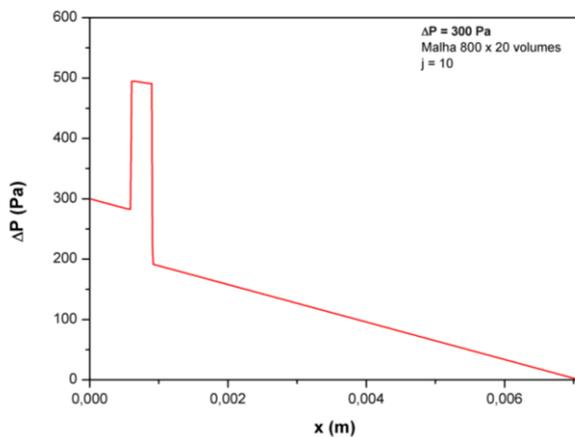
(a) Após  $5 \times 10^{-7}$  s (um  $\Delta t$ ): gota acelerando.



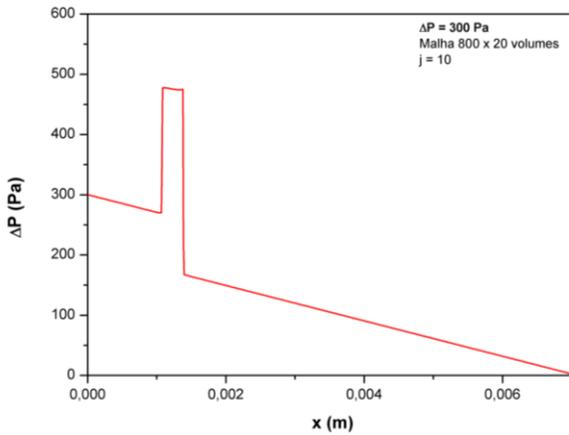
(b) Após  $5 \times 10^{-4}$  s: gota acelerando.



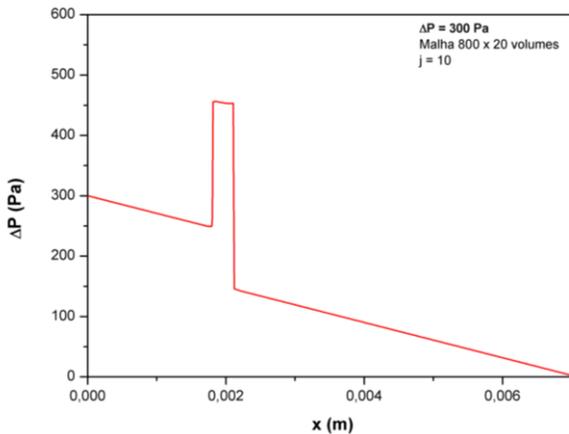
(c) Após  $8,75 \times 10^{-4}$  s (iminência de desprender a gota): gota acelerando.



(d) Após  $2,5 \times 10^{-3}$  s.



(e) Após 0,0125 s.

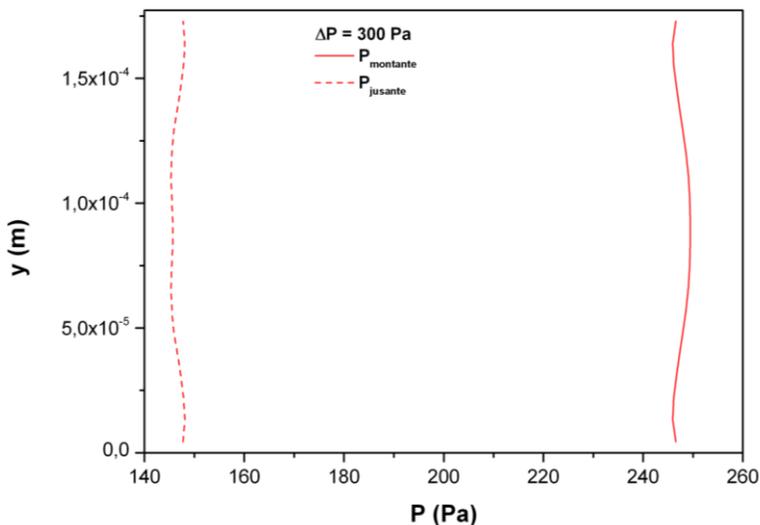


(f) Após 0,025 s: gota se deslocando à velocidade terminal.

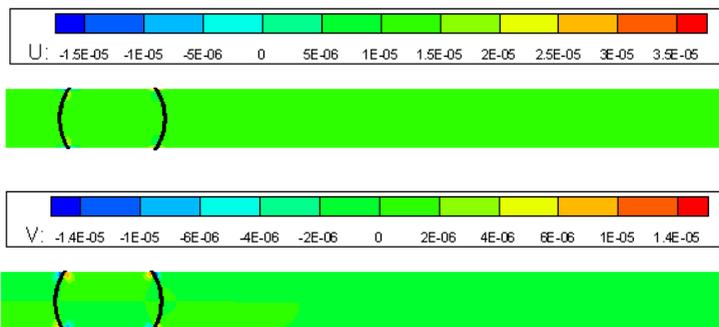
**Figura 89.** Comportamento do perfil de pressão ao longo do tempo para a situação em que a gota é despreendida do canal quando o fluido em seu interior está acelerando

A Figura 91 mostra os campos das componentes da velocidade correspondentes a cada instante de tempo da Figura 89, para uma diferença de 300 Pa. Na Figura 91, é mostrado o trecho do canal entre 0,4 mm e 2,5 mm. Como os fluidos são incompressíveis, a diferença de pressão aplicada aos extremos do canal é “sentida” imediatamente ao

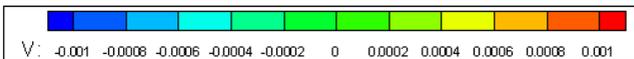
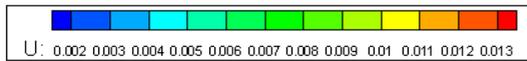
longo de todo o seu comprimento, resultando em um perfil de pressão linear.



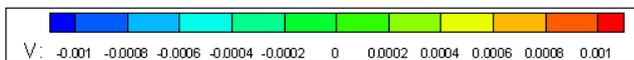
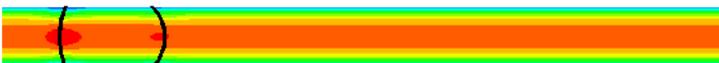
**Figura 90.** Distribuição da pressão à montante e à jusante da gota ao longo de  $y$ .



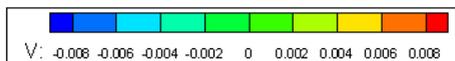
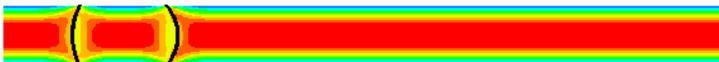
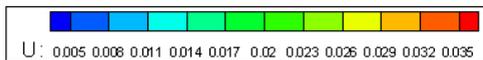
(a)  $5 \times 10^{-7}$  s.



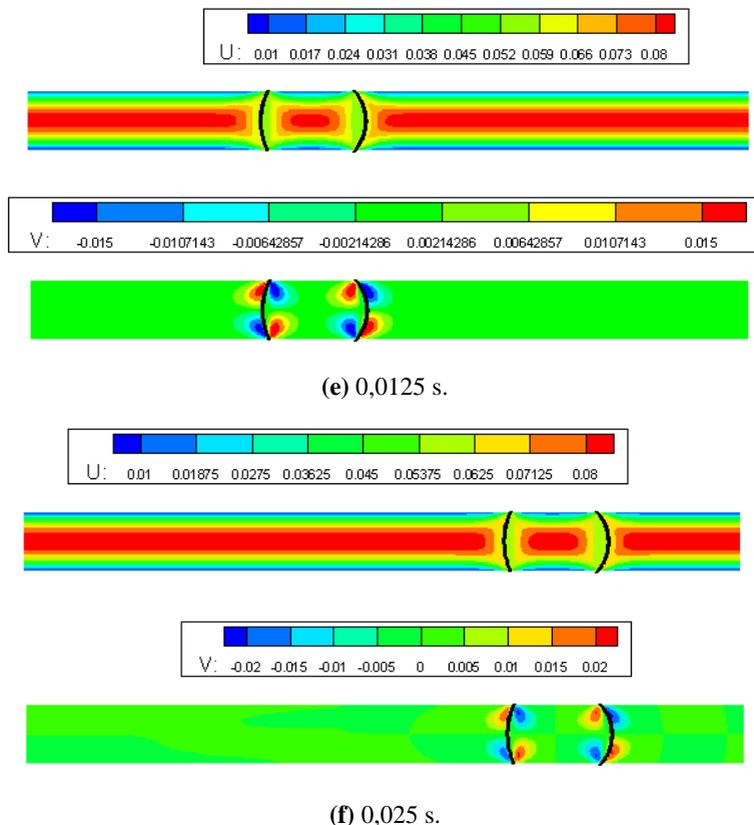
(b)  $5 \times 10^{-4}$  s.



(c)  $8,75 \times 10^{-4}$  s.



(d)  $2,5 \times 10^{-3}$  s.



**Figura 91.** Campos das componentes da velocidade (em m/s) em diferentes instantes para  $\Delta P=300$  Pa.

Para a  $\Delta P$  de 300 Pa no canal, a diferença de pressão em torno da **gota** no instante de sua liberação é igual a 177,10 Pa. Já a equação (2.53), prevê que esse valor deveria ser igual a 173,61 Pa. Como essa equação não contempla os efeitos dinâmicos, pode-se concluir que aproximadamente 3,5 Pa são consumidos para acelerar o fluido e pela dissipação viscosa na gota.

#### Liberação da gota durante a sua desaceleração

Agora tome-se o mesmo canal do cenário anterior, porém, sujeito a uma diferença de 120 Pa em suas extremidades. Nesta nova situação, a deformação da gota não é tão rápida quanto no cenário anterior, pois as

velocidades dos fluidos são menores. E, portanto, os ângulos críticos demoram mais a serem atingidos.

Assim como no cenário anterior, como a gota ainda se encontra presa ao canal, durante o período de **aceleração** do fluido em seu interior, a pressão à montante da gota aumenta, enquanto que a pressão à jusante diminui, resultando num aumento de  $\Delta P_{gota}$  com o tempo. Esse comportamento pode ser observado na Figura 92 (a), (b) e (c), que apresenta a pressão ao longo da linha  $j=10$  obtida em uma simulação empregando uma malha com  $800 \times 20$  volumes.

Devido ao aumento gradual dos efeitos capilares e viscosos com o aumento da velocidade dos fluidos e a progressiva deformação das interfaces da gota, haverá um momento em que a  $\Delta P_{gota}$  não será mais suficiente para acelerar o fluido. Nesse momento, o fluido no interior da gota atinge sua velocidade máxima. A partir de então, como a inércia dos fluidos continua promovendo a deformação das interfaces da gota e, conseqüentemente, a força de adesão continua aumentando, o fluido no interior da gota será desacelerado. E, portanto, a dissipação viscosa diminuirá.

Neste período de desaceleração, os efeitos inerciais atuam juntamente com a diferença de pressão na gota, contribuindo com a sua deformação em direção à saída do canal e combatendo a resistência imposta pelo atrito viscoso e pela força de adesão.

Como a força de desaceleração possui a mesma ordem de grandeza da força viscosa, haverá um instante em que elas se igualarão, já que a desaceleração da gota aumenta com o tempo e a dissipação viscosa diminui. Neste momento, pelo balanço expresso por (7.1), a diferença de pressão na gota se iguala à diferença de pressão capilar e as pressões à montante e à jusante da gota estarão uniformizadas. Ou seja,  $\Delta P_{gota}$  será igual a  $\Delta P_{canal}$ . Essa situação pode ser observada na Figura 92 (d).

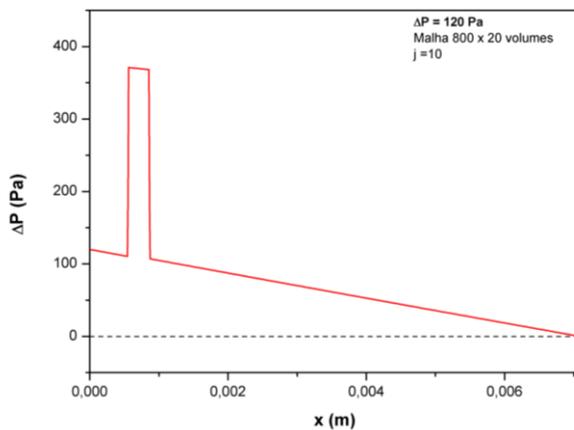
A partir de então, devido à inércia do fluido, a gota continua se deformando em direção à saída do canal. Com isso, a força de adesão continua aumentando e a desaceleração dos fluidos tanto da gota quanto do canal também aumenta. Isto provoca a inversão do gradiente de pressão<sup>41</sup>, como pode ser visto na Figura 92 (e) e (f). Repare que essa

---

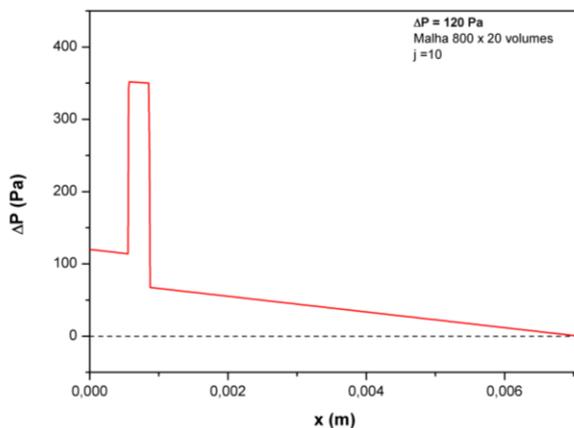
<sup>41</sup> Em uma simulação envolvendo uma gota de óleo sujeita à injeção de água em um canal com  $1\mu\text{m}$  de altura, observou-se que a força inercial era uma ordem de grandeza menor do que a força viscosa e, conseqüentemente, não houve a inversão do gradiente de pressão no canal (GLITZ et al., 2012).

inversão do gradiente de pressão é uma consequência do comportamento dinâmico do fenômeno e não é prevista pela equação (2.53).

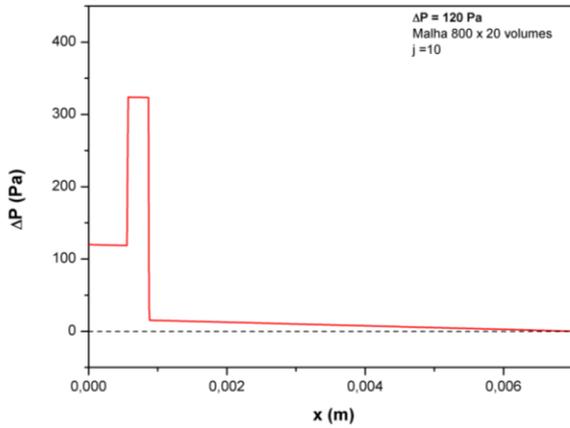
Com a crescente inversão do gradiente de pressão, a diferença de pressão na gota aumenta. Uma vez que a deformação da gota prossegue, em um determinado instante seus ângulos críticos serão atingidos e a gota será desprendida das paredes, sendo transportada pelo fluido injetado (Figura 92 (g) e (h)).



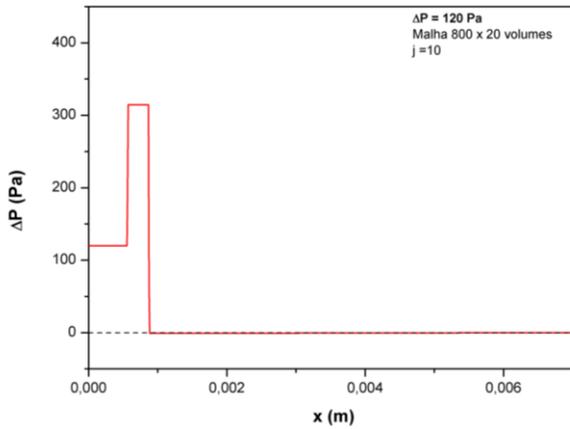
(a) Após  $5 \times 10^{-7}$  s (um  $\Delta t$ ): gota acelerando.



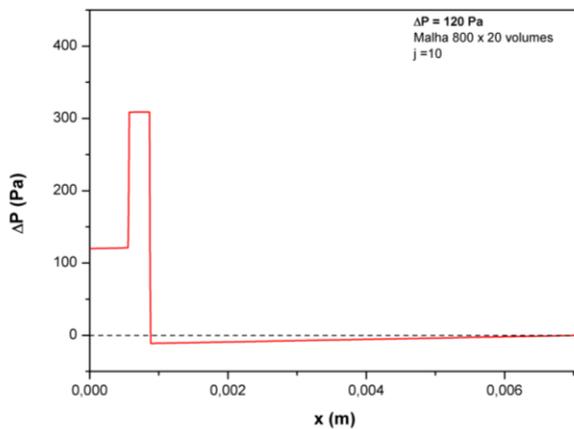
(b) Após  $7,5 \times 10^{-4}$  s: gota acelerando.



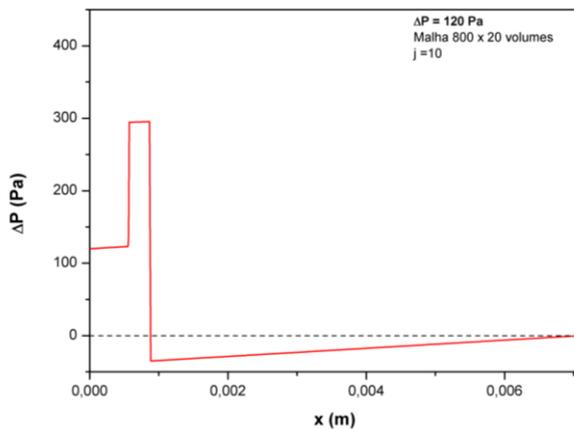
(c) Após  $1,25 \times 10^{-3}$  s: gota acelerando.



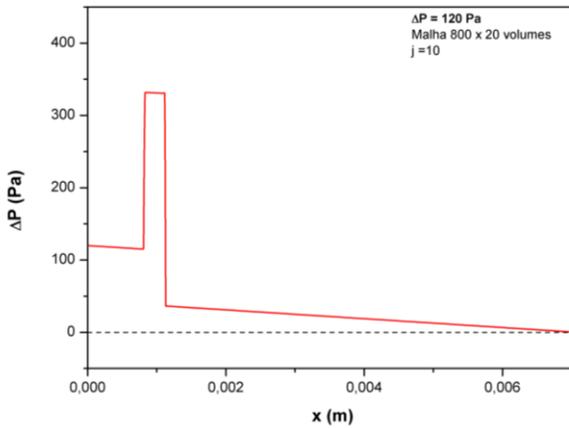
(d) Após  $1,4 \times 10^{-3}$  s: gota desacelerando.



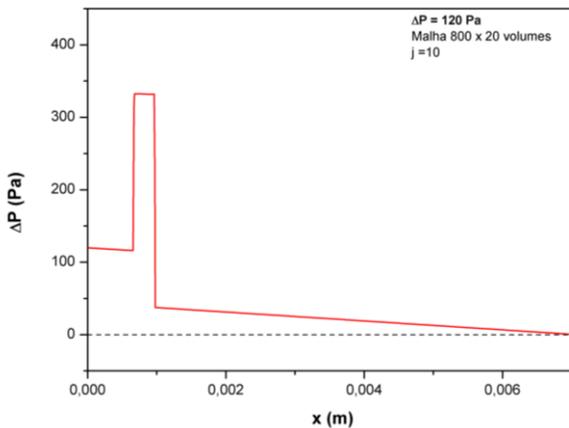
(e) Após  $1,5 \times 10^{-3}$  s: gota desacelerando.



(f) Após  $1,75 \times 10^{-3}$  s: gota desacelerando (iminência de sua liberação).



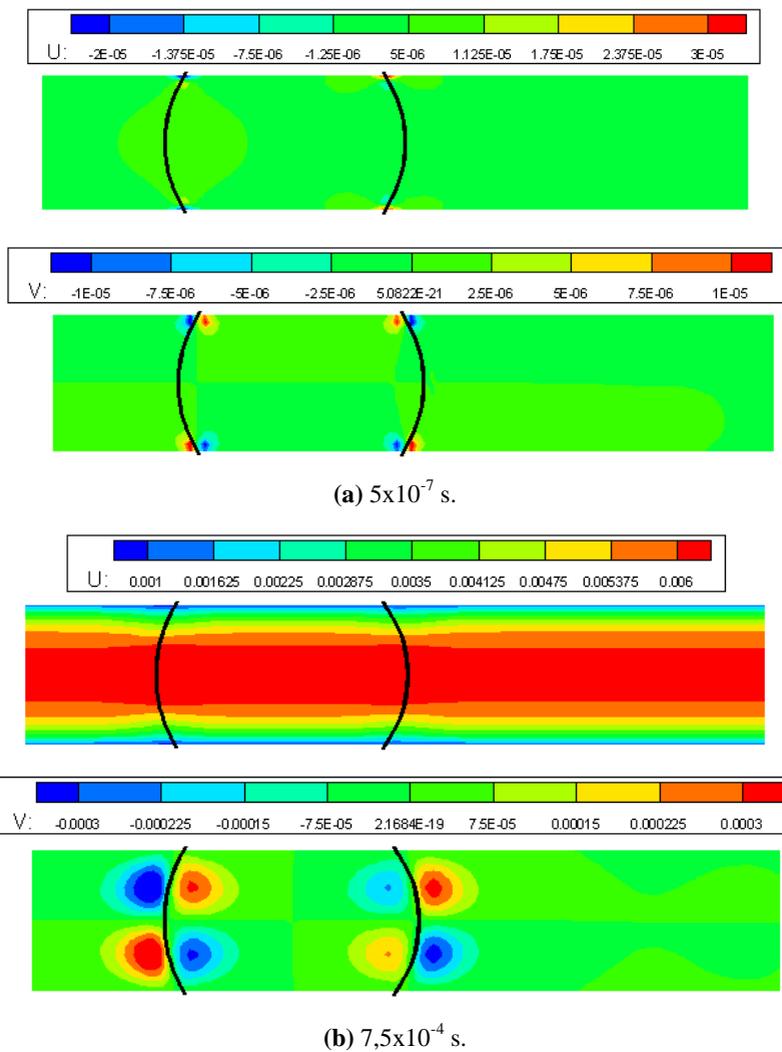
(g) Após 0,0125 s.

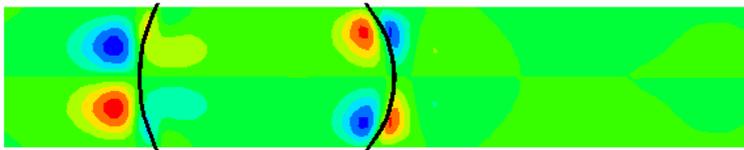
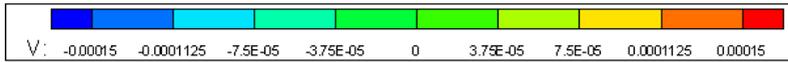
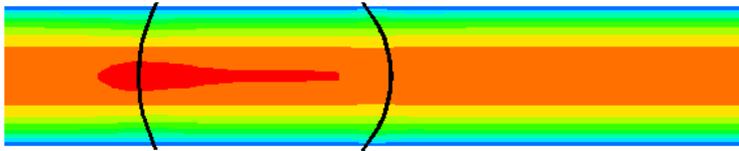
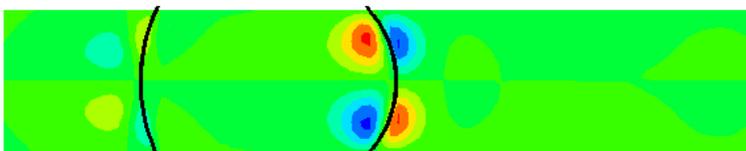
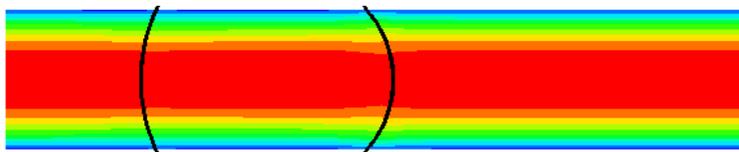
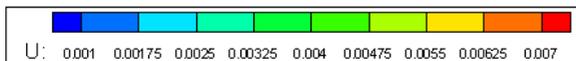


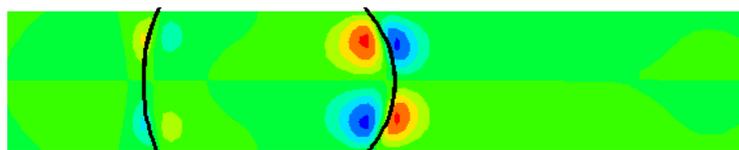
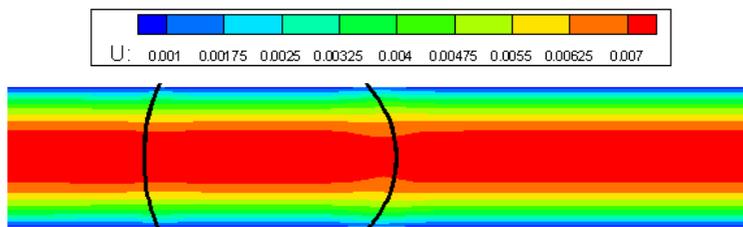
(h) Após 0,025 s: gota se deslocando à velocidade terminal.

**Figura 92.** Comportamento do perfil de pressão ao longo do tempo para a situação em que a gota é despreendida do canal quando o fluido em seu interior está desacelerando.

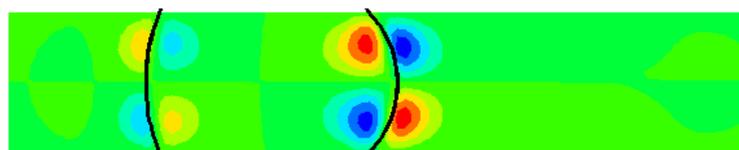
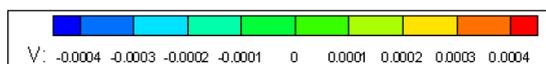
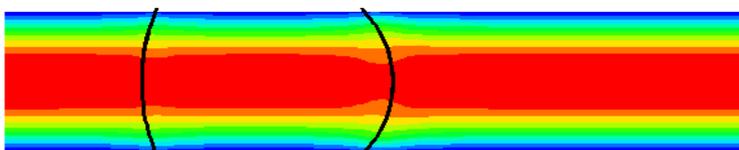
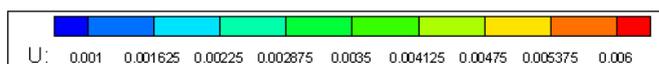
A Figura 93 mostra os campos das componentes da velocidade correspondentes a cada instante de tempo da Figura 92, para uma diferença de 120 Pa aplicada ao canal. Na Figura 93, é mostrado o trecho do canal entre 0,4 mm e 1,3 mm.



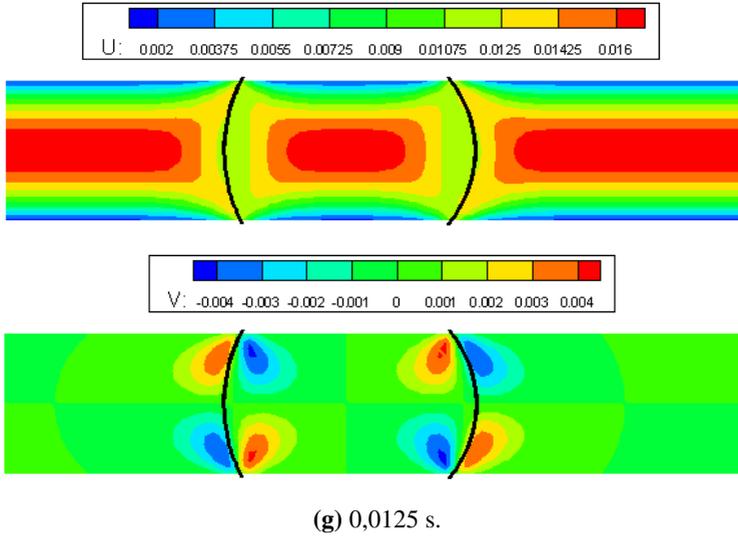
(c)  $1,25 \times 10^{-3}$  s.(d)  $1,4 \times 10^{-3}$  s.



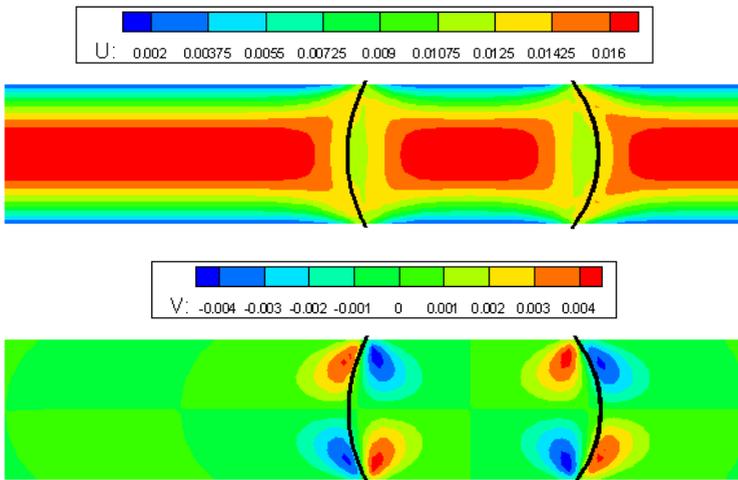
(e)  $1,5 \times 10^{-3}$  s.



(f)  $1,75 \times 10^{-3}$  s.



(g) 0,0125 s.



(h) 0,025 s.

**Figura 93.** Campos das componentes da velocidade (em m/s) em diferentes instantes para  $\Delta P = 120$  Pa.

Em resumo:

1. Aplica-se uma diferença de pressão ao canal, que provoca o escoamento dos fluidos;

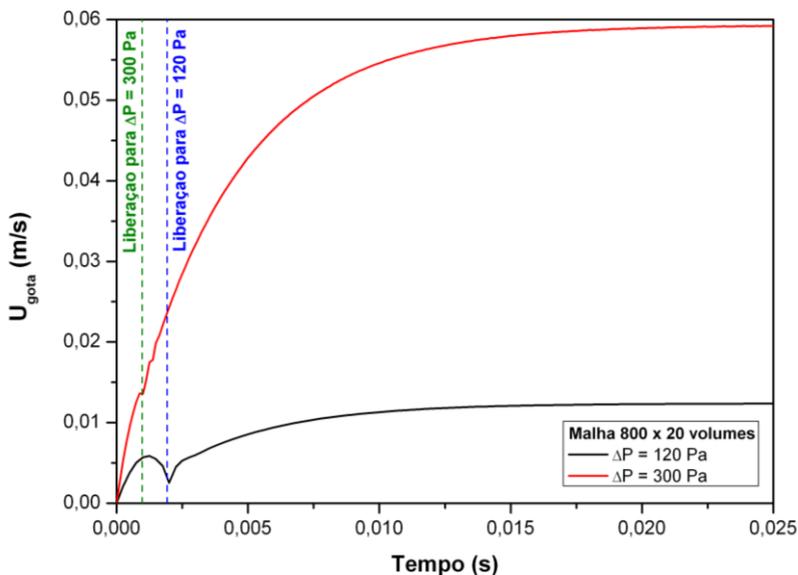
2. O escoamento, por sua vez, provoca a deformação das interfaces da gota;
3. Essa deformação gera uma diferença de pressão capilar, que se opõe ao escoamento dos fluidos;
4. Como as linhas de contato das interfaces permanecem fixas (uma vez que os ângulos críticos não foram atingidos), a pressão à montante da gota aumenta, enquanto que a pressão à jusante diminui, resultando em um aumento da diferença de pressão na gota e entre as porções à montante e à jusante dela;
5. Esse aumento na diferença de pressão acelera os fluidos, provocando uma maior deformação das interfaces e o aumento da diferença de pressão capilar;
6. A partir de determinado momento, a taxa com que as forças de adesão e viscosa aumentam será maior do que a taxa com que a diferença de pressão na gota (e nas porções à montante e à jusante dela) aumenta, reduzindo a aceleração dos fluidos até que eles atinjam uma velocidade máxima;
7. A partir deste momento, os fluidos passarão a ser desacelerados. Como a gota continua sendo deformada em direção à saída do canal devido à inércia dos fluidos, a diferença de pressão capilar continua aumentando. Isso provoca um aumento na desaceleração dos fluidos;
8. Em determinado momento, a magnitude da força de desaceleração será igual à magnitude da força viscosa. Neste instante, a diferença de pressão na gota é igual à diferença de pressão capilar e a pressão em todo o canal é uniformizada (Figura 92 (d));
9. Como os ângulos críticos ainda não foram atingidos e como a gota continua se deformando em direção à saída do canal, a desaceleração dos fluidos aumenta, provocando a inversão do gradiente de pressão ao longo do canal. Isto causa um aumento na diferença de pressão na gota;
10. Este cenário prossegue até que os ângulos críticos sejam finalmente atingidos e a gota, liberada.

Para a situação cujos resultados são ilustrados na Figura 92, no instante da liberação da gota, a diferença de pressão nela vale 172,31 Pa. E, como mencionado anteriormente, pela equação (2.53), essa diferença de pressão deveria ser de 173,61 Pa. Novamente, essa diferença entre

esses dois valores se deve aos efeitos dinâmicos, que não são contemplados por aquela equação. Contudo, agora, o valor previsto pela equação (2.53) é maior do que o resultado da simulação, pois a força de desaceleração do fluido da gota auxilia no seu desprendimento.

Salienta-se também que, como não há a uniformização das pressões ao longo do canal no instante da liberação da gota, mas há a inversão do gradiente de pressão, a diferença de pressão que deve ser aplicada ao canal (nesse caso, 120 Pa) é menor do que a prevista por aquela equação (173,61 Pa).

O momento em que a gota é liberada depende da magnitude da velocidade com que os fluidos escoam: quanto maior essa velocidade, mais cedo os ângulos críticos serão atingidos, pois a taxa de deformação da gota é maior. Para melhor ilustrar esse fato, a velocidade média do fluido da gota em função do tempo é mostrada na Figura 94 para as situações em que diferenças de 120 Pa e 300 Pa são aplicadas aos extremos do canal.

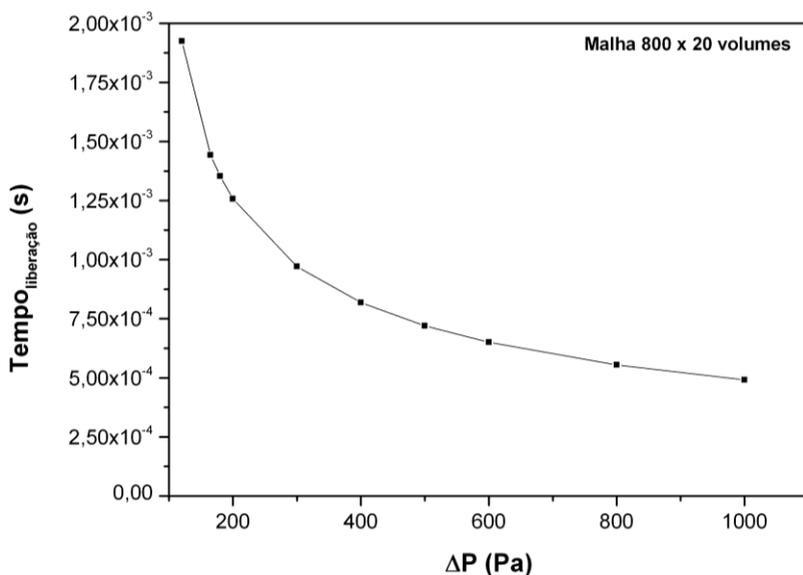


**Figura 94.** Velocidade média do fluido na gota em função do tempo.

A velocidade média da gota foi obtida a partir da seguinte expressão

$$U_{\text{gota}} = \frac{\sum_{j=1}^{N_{\text{linhas}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{colunas}}} f_{i,j} u_{i,j}}{\sum_{j=1}^{N_{\text{linhas}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{colunas}}} f_{i,j}} . \quad (7.2)$$

Como pode ser verificado deste gráfico, a liberação da gota ocorre em instantes diferentes dependendo da diferença de pressão imposta ao canal. Na Figura 95 é apresentado o comportamento do tempo consumido para a liberação da gota em função de alguns valores da diferença de pressão imposta ao canal. Desses resultados, constata-se que, quando uma maior diferença de pressão é aplicada ao canal, uma maior velocidade é alcançada pelos fluidos e, portanto, uma maior taxa de deformação das interfaces da gota é obtida. Logo, o tempo necessário para que os ângulos de contato críticos sejam atingidos é menor.



**Figura 95.** Instante de tempo em que a gota é liberada em função da  $\Delta P$  aplicada ao canal.

#### A gota permanece presa no canal

A dinâmica desta situação é igual à do cenário anterior (o período de aceleração do fluido no interior da gota é seguido de um período de

desaceleração). Entretanto, neste novo cenário os ângulos de contato críticos nunca são atingidos. Essa situação foi observada quando uma diferença de 50 Pa foi aplicada ao canal e é mostrada na Figura 96.

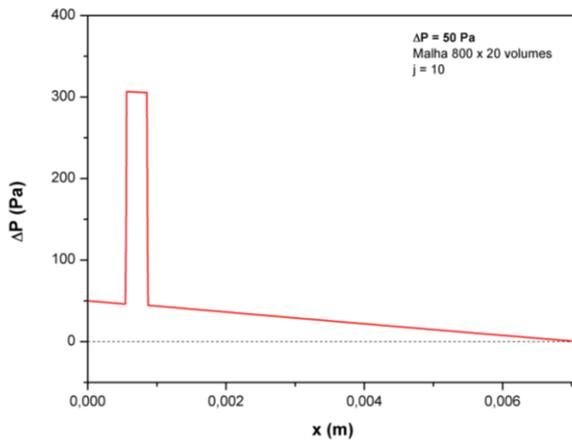
Durante a desaceleração da gota, os efeitos inerciais em conjunto com a diferença de pressão na gota não são suficientes para deformar as interfaces dela até seu estado crítico, mesmo com a inversão do gradiente de pressão no canal (Figura 96 (d)).

A deformação máxima da gota ocorre no momento em que a velocidade média do fluido em seu interior é anulada. Neste instante, a força de adesão é máxima. A partir de então, a gota começa a retroceder, se deformando em direção à entrada do canal e causando uma diminuição da força de adesão. Durante seu retrocesso, a gota é acelerada até o momento em que a redução da força de adesão em conjunto com o aumento da força viscosa provoquem a sua desaceleração. Durante esse novo período de desaceleração, há uma nova inversão do gradiente de pressão.

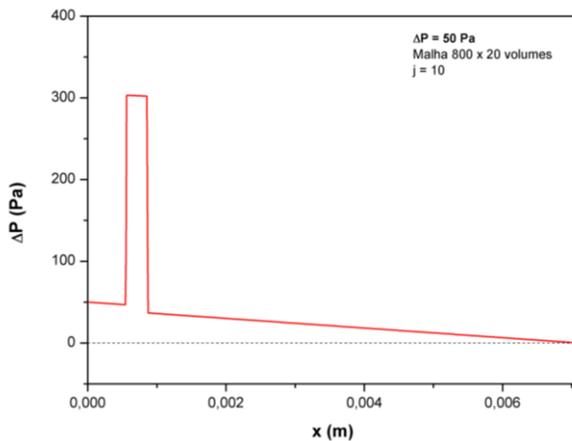
Novamente a gota é desacelerada até que sua velocidade seja anulada. Então o sentido do escoamento dos fluidos é invertido mais uma vez e a gota passa novamente a se deformar em direção à saída do canal.

Essa alternância na direção do escoamento e as inversões do gradiente de pressão são mostradas na Figura 97. Nessa figura é apresentado o comportamento da velocidade média do fluido no interior da gota ao longo do tempo obtido com uma malha com 800 x 20 volumes. Nos detalhes são ilustrados os perfis de pressão ao longo do canal (em  $j=10$ ) em alguns instantes de tempo.

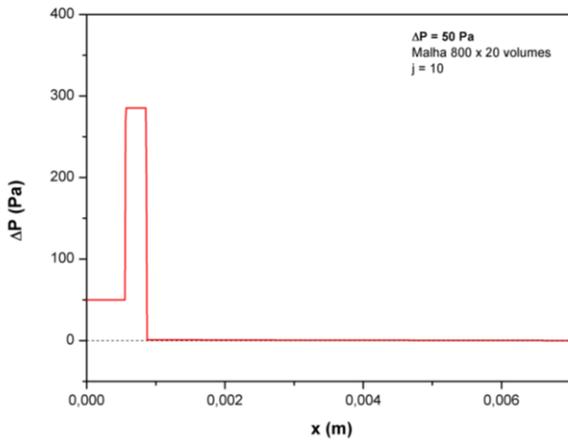
Todo o processo descrito é repetido ao longo da simulação e resulta em oscilações da gota, que são amortecidas com o tempo, como pode ser observado na Figura 98. Ponderou-se que tais oscilações poderiam ter sua origem na forma como a pressão é prescrita na entrada do canal: quando a pressão final é prescrita logo no primeiro passo de tempo, a alteração do campo de pressão no canal é muito brusca, o que levaria à oscilação da gota. Entretanto, ao se elevar gradualmente a pressão na entrada do canal de 0,1 em 0,1 Pa a cada passo de tempo até que a pressão final fosse atingida, verificou-se que as oscilações persistiam, não sendo uma consequência da modelagem do problema. Na verdade, tais oscilações ocorrem na natureza (KORENCHENKO, BESKACHKO, 2007).



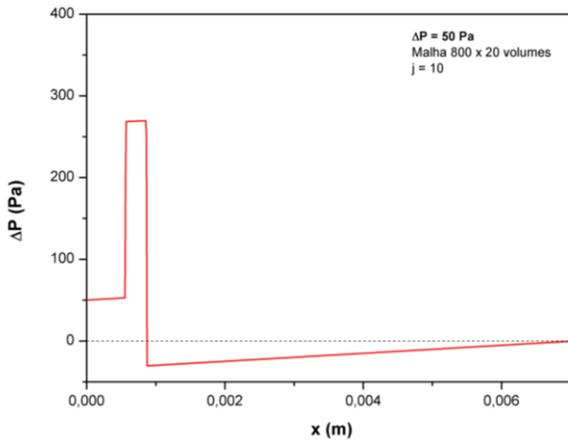
(a) Após  $5 \times 10^{-7}$  s (um  $\Delta t$ ): gota acelerando.



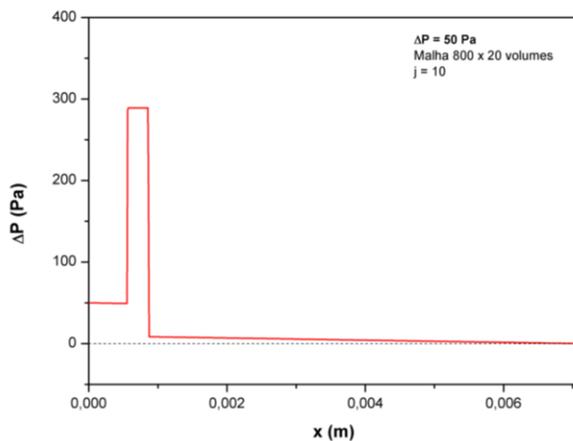
(b) Após  $5 \times 10^{-4}$  s: gota acelerando.



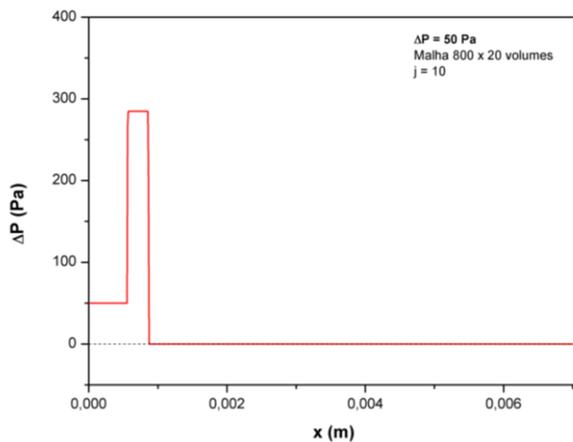
(c) Após  $1,375 \times 10^{-3}$  s: gota desacelerando.



(d) Após  $2,5 \times 10^{-3}$  s: gota desacelerando.

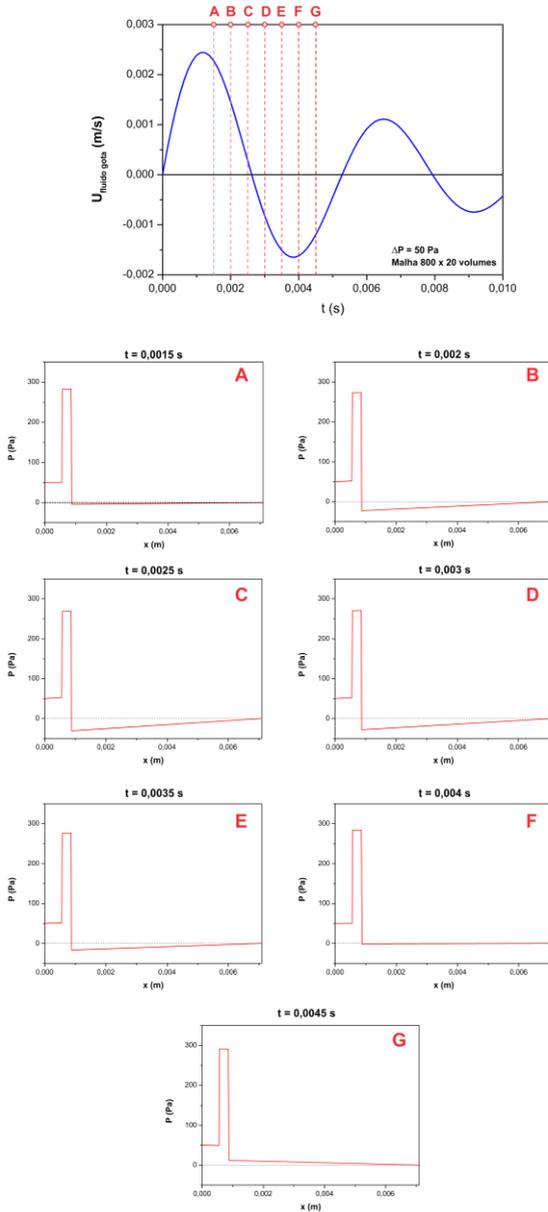


(e) Após 0,011 s.

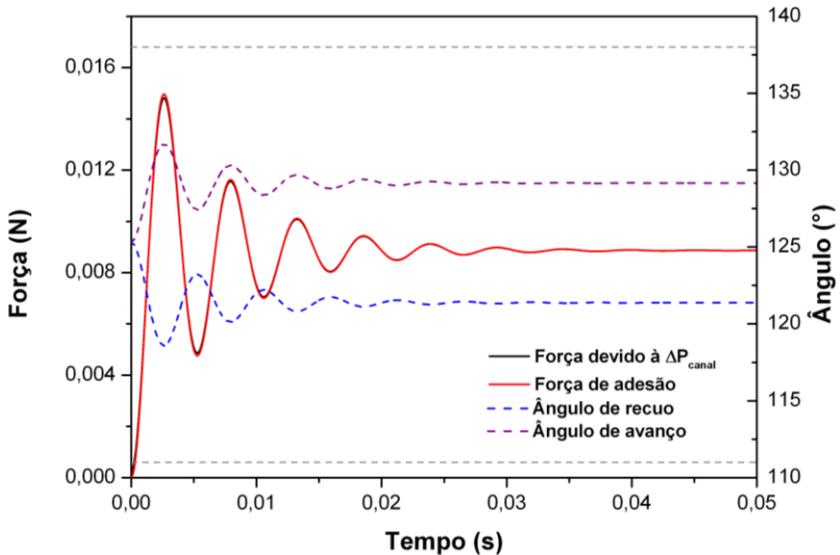


(f) Após 0,05 s: gota em repouso.

**Figura 96.** Comportamento do perfil de pressão ao longo do tempo para a situação em que a gota permanece presa.



**Figura 97.** Comportamento da velocidade média do fluido no interior da gota até 20 mil  $\Delta t$  e perfis de pressão em alguns instantes.



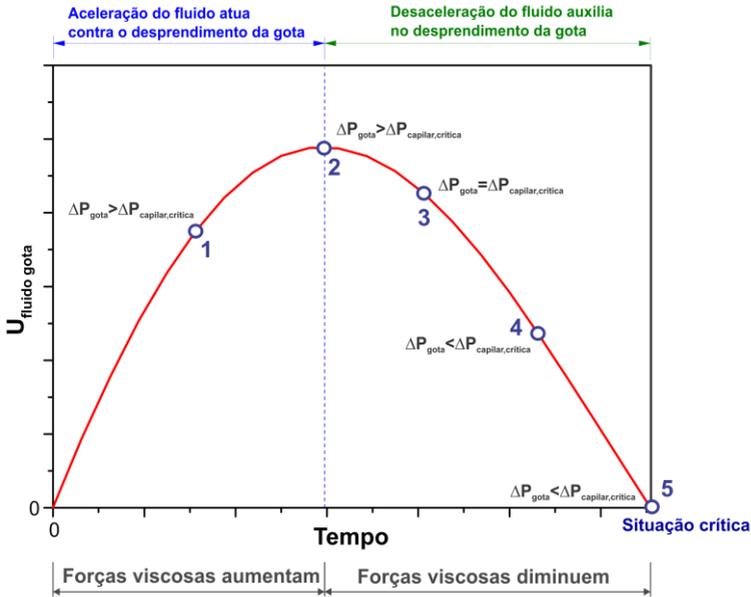
**Figura 98.** Comportamento das forças de adesão e devido à diferença de pressão aplicada ao canal. Também são ilustrados os comportamentos dos ângulos de contato em função do tempo. As linhas tracejadas cinzas correspondem aos ângulos de contato críticos ( $111^\circ$  e  $138^\circ$ ).

Dado o exposto nessa discussão sobre a dinâmica do escoamento, conclui-se que, caso os ângulos críticos sejam atingidos, a gota pode ser desprendida tanto durante a aceleração do fluido em seu interior, como durante a sua desaceleração.

Considerando o balanço de forças expresso pela equação (7.1) e a Figura 99, no período de **aceleração**, como os efeitos inerciais, viscosos e capilares se opõem ao escoamento, deverá ser alcançada uma  $\Delta P_{gota}$  maior do que a prevista pela equação (2.53). Nessa equação é admitido que a diferença de pressão na gota no instante de sua liberação é igual à diferença de pressão capilar crítica ( $\Delta P_{capilar,critica}$ ). A situação apresentada corresponde ao período entre  $t=0$  e o ponto 2 da Figura 99.

Já durante a **desaceleração** do fluido no interior da gota, se a magnitude da força de desaceleração for menor do que a da força viscosa, novamente uma  $\Delta P_{gota}$  maior do que a prevista pela equação (2.53) deverá ser atingida. Este caso é indicado na Figura 99 pelo período compreendido entre os pontos 2 e 3.

Mas se os efeitos viscosos forem menores do que os inerciais durante a desaceleração, estes auxiliarão no desprendimento da gota e, portanto, uma  $\Delta P_{gota}$  menor do que a calculada pela equação (2.53) é necessária (situação entre os pontos 3 e 5 na Figura 99).



**Figura 99.** Esquema de diferentes momentos em que a gota pode ser desprendida.

A Tabela 7-1 ilustra essa explicação. Nela são apresentados os valores de  $\Delta P_{gota}$  no instante de liberação da gota, obtidos em simulações com diferentes valores de  $\Delta P_{canal}$  considerando uma malha com  $800 \times 20$  volumes. Lembrando que a diferença de pressão capilar crítica é expressa por

$$\Delta P_{capilar,critica} = \frac{\sigma}{H/2} (\cos \theta_{r,cr} - \cos \theta_{a,cr}), \quad (7.3)$$

onde os ângulos críticos de avanço e de recuo valem respectivamente  $138^\circ$  e  $111^\circ$ . Assim, a diferença de pressão **capilar** no instante da liberação da gota é igual a 173,61 Pa.

**Tabela 7-1.** Comparação dos valores da diferença de pressão na gota no instante em que ela é despreendida para diferentes  $\Delta P$  no canal.

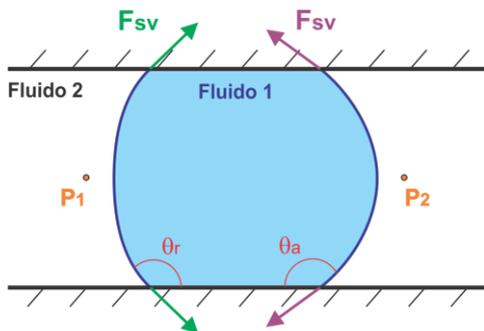
$\Delta P$ no canal (Pa)	Diferença de pressão na gota (Pa)	Estado do fluido da gota no momento da liberação
104	170,00	Desacelerando, com velocidade quase nula
110	170,25	Desacelerando, com $ F_{\text{aceleração}}  >  F_{\text{viscosa}} $
120	172,31	Desacelerando, com $ F_{\text{aceleração}}  >  F_{\text{viscosa}} $
165	173,60	Desacelerando, com $ F_{\text{aceleração}}  \cong  F_{\text{viscosa}} $
170	173,74	Desacelerando, com $ F_{\text{aceleração}}  <  F_{\text{viscosa}} $
300	177,10	Acelerando
500	182,36	Acelerando
800	190,19	Acelerando

### 7.1.2. Força de adesão

A força de adesão imposta pelas interfaces da gota é uma das forças que contrabalançam a diferença de pressão aplicada ao canal. Ela é composta pelas componentes na direção horizontal da força devida à tensão interfacial atuando nas linhas de contato (Figura 100). A componente na direção horizontal da resultante dessas forças corresponde à força de adesão e analiticamente pode ser calculada por:

$$F_{sv,x} = 2 \cdot \sigma \cdot w [\cos(\pi - \theta_r) - \cos(\pi - \theta_o)], \quad (7.4)$$

onde  $w$  representa a profundidade do canal (dimensão na direção perpendicular ao plano do papel). Essa dimensão é tomada igual a 1 m.



**Figura 100.** Forças devido à tensão interfacial atuando nas linhas de contato de uma gota deformada. A componente na horizontal da resultante dessas forças corresponde à força de adesão, que se contrapõe ao movimento da gota.

Conforme explicado anteriormente, o método CSF considera a força devida à tensão interfacial como uma força de corpo. Para cada volume de controle são então calculadas as componentes dessa força por unidade de volume. E, para se determinar a força de adesão, basta multiplicar a componente horizontal da força em cada volume de controle por seu volume e somar a contribuição de todos os volumes:

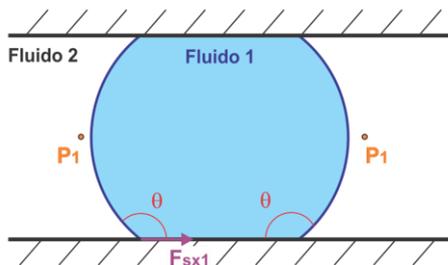
$$F_{sv,x} = \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{i=1}^{N_x} F_{sv,x_{ij}} \Delta x \cdot \Delta y \cdot w, \quad (7.5)$$

para uma malha uniforme.

Para exemplificar o cálculo dessa força pelo método CSF, tome-se a situação mostrada na Figura 101. Nessa figura, o sistema se encontra em equilíbrio e a gota é simétrica. Supondo que o ângulo de contato da gota com a superfície valha  $130^\circ$  e que o coeficiente de tensão interfacial seja igual a  $0,04 \text{ N/m}$ , tem-se que a componente horizontal da força devida à tensão interfacial atuando na linha de contato inferior esquerda<sup>42</sup>, conforme indicado na Figura 101, é obtida analiticamente por:

$$F_{sx1} = \sigma \cdot w \cdot \cos(\pi - \theta) = 2,5711 \cdot 10^{-2} \text{ N}. \quad (7.6)$$

<sup>42</sup> Essa é a força em apenas uma das linhas de contato da interface esquerda, por este motivo ela não é multiplicada por dois.

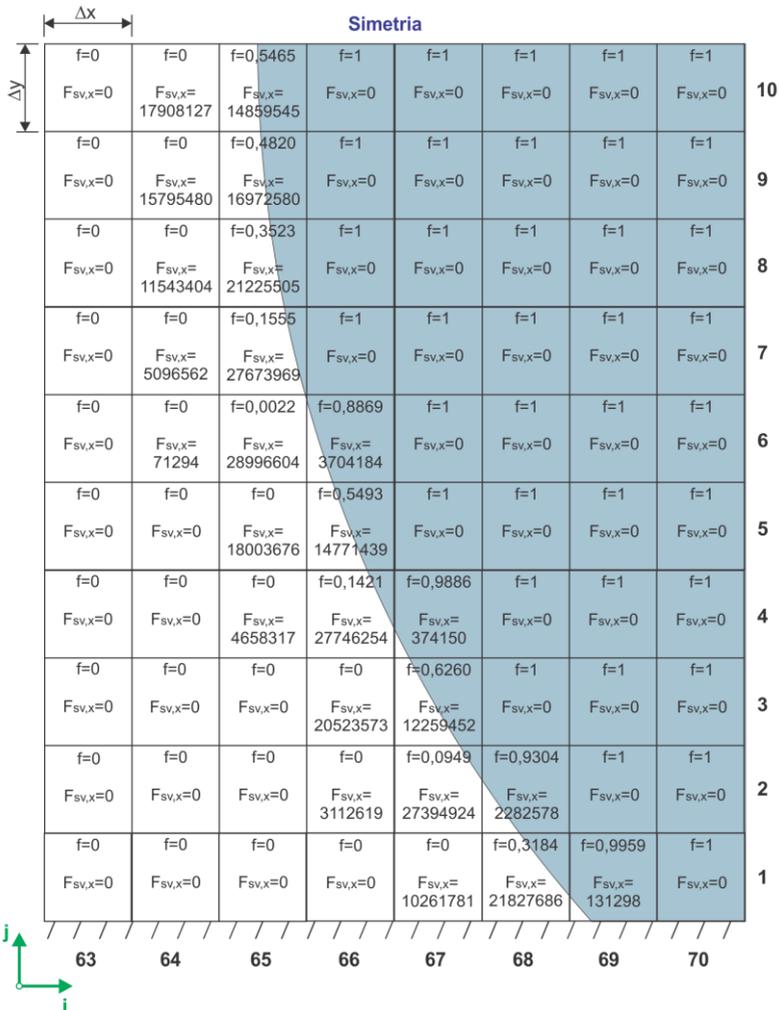


**Figura 101.** Esquema de uma gota simétrica em equilíbrio. As pressões à montante e à jusante da gota são iguais.

Empregando-se uma malha com 160 x 20 volumes para discretizar o domínio com dimensões de 1,4184 mm x 0,1773 mm, tem-se que os incrementos espaciais nas direções horizontal ( $\Delta x$ ) e vertical ( $\Delta y$ ) são iguais a  $8,865 \times 10^{-6}$  m. Para essa malha, os valores da componente horizontal da força devida à tensão interfacial ( $F_{sv,x}$ , em  $N/m^3$ ) calculados pelo método CSF em cada volume de controle são apresentados na Figura 102 juntamente com os valores da fração volumétrica em cada volume ( $f$ ). Ressalta-se que  $F_{sv,x}$  só assume valores diferentes de zero quando a componente do vetor normal à interface na direção  $x$  é não-nula.

E, apesar de a Figura 102 sugerir que a força  $F_{sv,x}$  é avaliada no centro do volume de controle, na realidade essa variável é avaliada no centro das faces do volume.

Como se deseja obter o valor da força de adesão apenas na linha de contato inferior esquerda da gota (como mostrado na Figura 101), deve-se realizar o somatório da equação (7.5) considerando os volumes da metade inferior daquela interface (volumes ilustrados na Figura 102). Desse cálculo, resulta que a força de adesão naquela linha de contato obtida numericamente vale  $2,5714 \times 10^{-2}$  N. Ou seja, o valor obtido pelo método CSF é aproximadamente o mesmo que o obtido pela expressão analítica (equação (7.6)).



**Figura 102.** Campos de fração volumétrica ( $f$ ) e da componente horizontal da força devida à tensão interfacial ( $F_{sv,x}$ ) calculada pelo método CSF para cada volume de controle. A área colorida ilustra uma parte da gota, que abrange metade da primeira interface.

## 7.2. SIMULAÇÕES NUMÉRICAS, RESULTADOS E VALIDAÇÃO

Nas simulações numéricas do efeito Jamin, foi empregado o mesmo conjunto de fluidos e sólido utilizado por Boukellal et al. (2009): uma gota de água presa às paredes de PDMS e sujeita à injeção de óleo FC3283. No início da simulação, admitiu-se que a gota é simétrica, com todos os ângulos iguais a  $125,3^\circ$ . Como o valor do ângulo de contato inicial não é informado pelos autores, calculou-se o volume da gota quando esta atinge seus ângulos críticos. Então, considerando que o volume é mantido e que, na situação inicial, a gota é simétrica, foi estimado o valor inicial dos ângulos de contato.

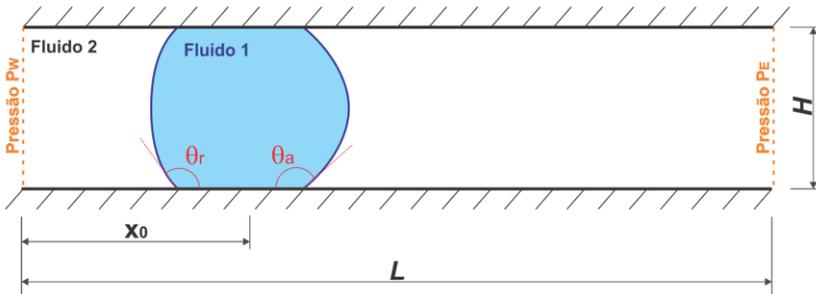
Uma vez que no trabalho de Boukellal et al. não são apresentados os valores dos ângulos críticos, supôs-se que a Figura 16 (a) apresenta a gota na iminência de ser deslocada e que os ângulos críticos equivalem aos ângulos ilustrados nessa foto. Seus valores foram estimados por meio do emprego das equações apresentadas naquele artigo.

A Tabela 7-2 apresenta os valores das propriedades dos fluidos, dos ângulos e das dimensões do domínio (conforme a Figura 103) utilizados nas simulações.

No instante em que as linhas de contato são liberadas, admitiu-se que a interface de avanço se retrai, enquanto que a interface de recuo se expande, devido à ação da tensão interfacial, que tende a minimizar a área superficial da gota. O ângulo de avanço então é reduzido de seu valor crítico a um ângulo igual a  $\theta_{o,lib}$ , enquanto que o ângulo de recuo é aumentado de  $\theta_{r,cr}$  para  $\theta_{r,lib}$ . A partir desse momento, a gota é então carregada pela corrente de óleo e os ângulos de contato dinâmicos passam a ser calculados por dois modelos da literatura: caso o ângulo seja de avanço, emprega-se o modelo de Jiang, Oh e Slattery (1979) e, na situação de recuo, é utilizado o modelo de Tanner (NICHITA; ZUN; THOME, 2010). Ambos os modelos são baseados na relação entre o ângulo de contato dinâmico e o número Capilar, que é expresso por  $Ca = \mu_1 \cdot \bar{U}_{gota} / \sigma$ , sendo  $\bar{U}_{gota}$  a velocidade média da gota. Foi empregada essa velocidade no cálculo de Ca, pois os artigos não são claros quanto à velocidade que deve ser utilizada nessa estimativa.

**Tabela 7-2.** Propriedades dos fluidos, dimensões do canal e ângulos empregados nas simulações numéricas.

Parâmetro	Valor
Massa específica da água ( $\rho_1$ )	1000 kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade da água ( $\mu_1$ )	9x10 <sup>-4</sup> Pa s
Massa específica do óleo ( $\rho_2$ )	1820 kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade do óleo ( $\mu_2$ )	1,3x10 <sup>-3</sup> Pa s
Coeficiente de tensão interfacial ( $\sigma$ )	0,04 N/m
Ângulo estático inicial ( $\theta_0$ )	125,3°
Ângulo crítico de avanço ( $\theta_{a,cr}$ )	138°
Ângulo crítico de recuo ( $\theta_{r,cr}$ )	111°
Ângulo de avanço após a liberação da gota ( $\theta_{a,lib}$ )	130°
Ângulo de recuo após a liberação da gota ( $\theta_{r,lib}$ )	119°
Altura do canal ( $H$ )	1,773x10 <sup>-4</sup> m
Comprimento do canal ( $L$ )	7,092x10 <sup>-3</sup> m
Posição do centro da gota ( $x_0$ )	7,092x10 <sup>-4</sup> m



**Figura 103.** Configuração do problema do efeito Jamin. A simulação é inicializada com uma gota simétrica.

O modelo de Jiang, expresso pela equação

$$\frac{\cos\theta_{a,lib} - \cos\theta_{a,d}}{\cos\theta_{a,lib} + 1} = \operatorname{tgh}(4,96 Ca^{0,702}), \quad (7.7)$$

é baseado em dados experimentais obtidos por Hoffman (1975) para o avanço de um fluido em um tubo capilar. Nesta equação,  $\theta_{a,d}$  é o ângulo de contato dinâmico de avanço.

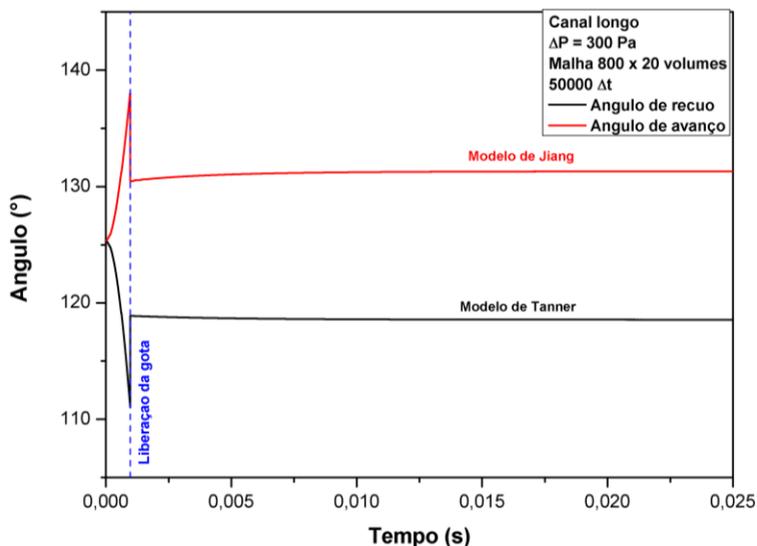
Na determinação do ângulo de contato de recuo adotou-se um modelo baseado na lei de Tanner (1979):

$$\theta_{r,lib}^3 - \theta_{r,d}^3 = 72 Ca, \quad (7.8)$$

onde  $\theta_{r,d}$  é o ângulo de contato dinâmico de recuo.

A liberação das linhas de contato das interfaces de avanço e de recuo ocorre separadamente. Ou seja, caso o ângulo crítico de avanço seja atingido antes do ângulo crítico de recuo, apenas as linhas de contato de avanço serão liberadas, permanecendo as linhas de contato de recuo fixas à parede. Entretanto, constatou-se nas simulações que a liberação da linha de contato de recuo ocorria poucos passos de tempo após a liberação da linha de contato de avanço.

A evolução dos ângulos de contato ao longo do tempo para a situação em que a gota é liberada é ilustrada na Figura 104.



**Figura 104.** Evolução dos ângulos de contato ao longo do tempo para  $\Delta P$  igual a 300 Pa. Quando os ângulos críticos são atingidos, as linhas de contato são liberadas.

Uma restrição da simulação do efeito Jamin é o tamanho do passo de tempo. Conforme mencionado em capítulos anteriores, o valor máximo do passo de tempo está sujeito a duas limitações: uma imposta pelo método VOF e outra, pelo método CSF. Nestas simulações, a restrição imposta pelo tratamento explícito da força devida à tensão interfacial é mais restritiva que aquela do método VOF.

Tome-se como exemplo uma malha com 800 x 20 volumes, onde  $\Delta x$  é igual a 8,865  $\mu\text{m}$  e, portanto, o passo de tempo não deve ser superior a  $1,98 \times 10^{-6}$  s pela equação (2.10). Esta limitação justifica os pequenos passos de tempo empregados nas simulações. Além disso, a própria dinâmica do problema que se está tentando reproduzir ocorre em tempos da ordem de  $10^{-4}$  s, logo, mesmo que não houvesse essa restrição do método CSF, os valores de  $\Delta t$  deveriam ser menores do que  $10^{-4}$  s.

Nas simulações, foram atribuídas condições de abertura (*opening*) às fronteiras leste e oeste do domínio. Na fronteira leste, prescreveu-se pressão nula, enquanto que, na fronteira oeste, a pressão prescrita possui valor positivo diferente de zero. Às demais fronteiras (sul e norte) atribuiu-se condições de não-deslizamento e impermeabilidade.

Foram adotados os seguintes critérios de convergência na simulação:  $10^{-9}$  m/s para as componentes da velocidade,  $10^{-5}$  Pa para a pressão e  $10^{-5}$  para a fração volumétrica. Esses critérios foram estabelecidos após um estudo sobre a influência dos critérios de convergência na solução final do problema.

Onde não estiver escrito o contrário, nas simulações foram utilizados uma malha uniforme com 800 x 20 volumes ( $\Delta x = \Delta y = 8,865 \cdot 10^{-6}$  m) e um passo de tempo igual a  $5 \times 10^{-7}$  s. Em todas as simulações, a curvatura da interface foi calculada empregando-se o método HF usual e a ação da gravidade foi desprezada. Inicializou-se o campo de velocidade com valor zero e às pressões nos volumes foi atribuído valor zero em todo o domínio com exceção do interior da gota, onde a pressão foi calculada pela equação de Laplace:

$$P_1 - P_2 = \sigma \kappa. \quad (7.9)$$

### 7.2.1. Configuração padrão do modelo

Nas simulações do efeito Jamin foi adotada uma configuração padrão de simulação e variantes dessa configuração foram empregadas em estudos específicos como, por exemplo, a influência do refino da

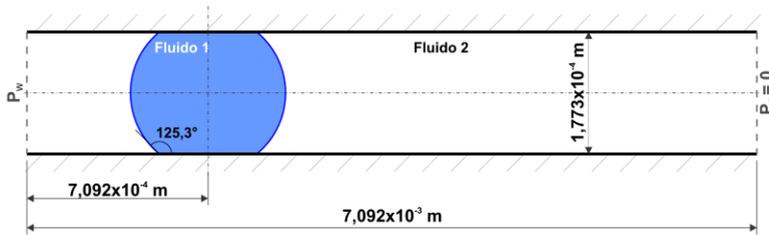
malha na velocidade terminal da gota. A Tabela 7-3 apresenta os parâmetros adotados nessa configuração padrão.

**Tabela 7-3.** Parâmetros adotados na configuração padrão do modelo de simulação do Efeito Jamin.

<b>Parâmetro</b>	<b>Valor/Especificação</b>
Tamanho da malha	800 x 20 volumes
Passo de tempo	$5 \times 10^{-7}$ s
Critério de convergência para as componentes da velocidade	$10^{-9}$ m/s
Critério de convergência para a pressão	$10^{-5}$ Pa
Critério de convergência para a fração volumétrica	$10^{-5}$
Condição de contorno nas fronteiras norte e sul	Não-deslizamento e impermeabilidade
Condição de contorno na fronteira oeste	Abertura, pressão prescrita positiva diferente de zero
Condição de contorno na fronteira leste	Abertura, pressão prescrita igual a zero
Liberação das linhas de contato	Separadamente, quando os respectivos ângulos críticos são atingidos
Altura do canal	$1,773 \times 10^{-4}$ m
Comprimento do canal	$7,092 \times 10^{-3}$ m
Posição do centro da gota	$7,092 \times 10^{-4}$ m da fronteira oeste
Número de partições empregadas nas simulações em paralelo	32 (duas linhas x dezesseis colunas)

Em todas as simulações, o domínio consistiu de um único canal, a cujos extremos é aplicada uma diferença de pressão: na saída do canal (fronteira leste do domínio) é prescrita uma pressão nula, enquanto que na entrada do canal (fronteira oeste do domínio) é prescrito um valor positivo da pressão. Ou seja, as condições de contorno nessas fronteiras correspondem à condição de abertura.

Como no início da simulação a gota é simétrica, inicializou-se o campo de frações volumétricas com seus valores exatos, determinados a partir da integral dos arcos de circunferência que correspondem às interfaces da gota. O domínio e a configuração inicial do problema são mostrados na Figura 105.



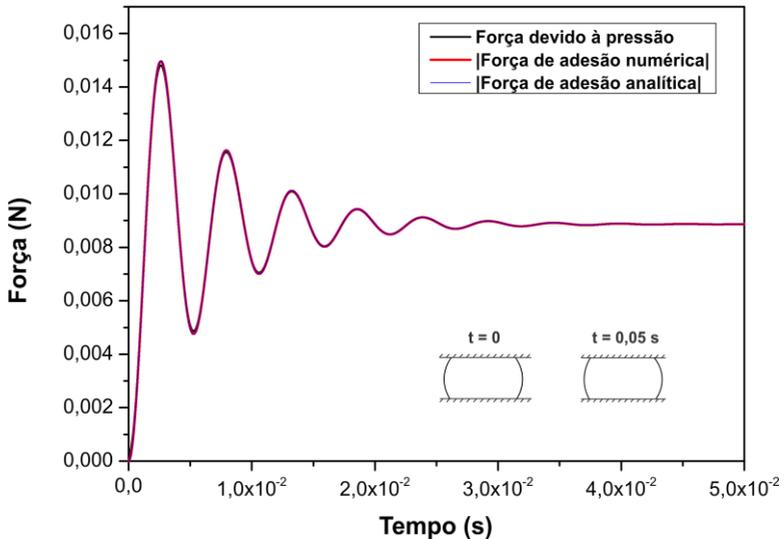
**Figura 105.** Domínio e configuração inicial do problema.

### 7.2.2. Evolução das forças e dos ângulos de contato

Tome-se um canal onde uma gota de um fluido encontra-se presa às suas paredes e envolta por outro fluido. Inicialmente, os dois fluidos se encontram em repouso e a pressão ao longo de todo o domínio é nula, com exceção da pressão no interior da gota, que vale  $\sigma/R_{gota}$ . No início da simulação ( $t=0$ ), a pressão na fronteira oeste do domínio é subitamente elevada a um valor prescrito  $P_w$ . No primeiro passo de tempo, a diferença de pressão no canal é sentida pelos fluidos: a pressão passa a variar gradualmente ao longo do óleo (fluido 2) e a gota começa a se deformar, adquirindo um formato mais fluidodinâmico. Esse novo formato resulta em diferentes ângulos de contato nas porções traseira e dianteira da gota, provocando o surgimento de uma força de adesão resultante, que se opõe ao escoamento. A magnitude dessa força aumenta com o tempo, pois o ângulo de recuo diminui, enquanto que o ângulo de avanço aumenta. É exatamente esta dinâmica que ocorre quando se injeta água na tentativa de remoção do óleo residual preso aos poros de um reservatório de petróleo, num processo denominado recuperação secundária de petróleo.

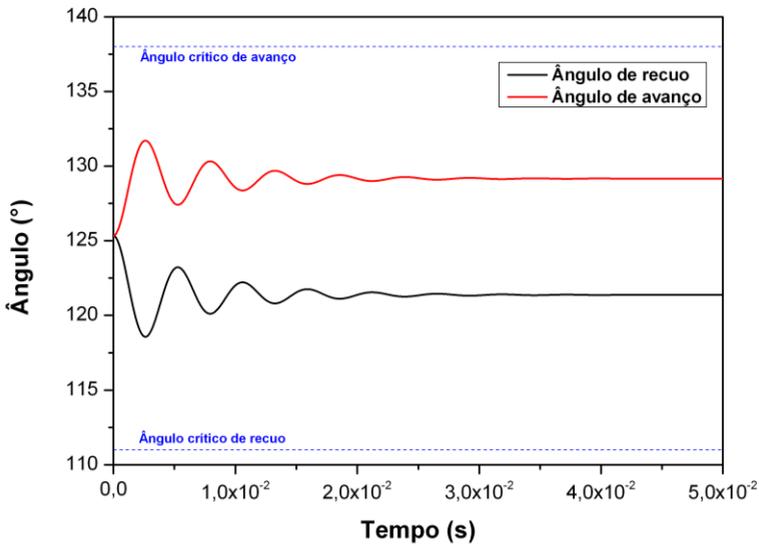
Caso a diferença de pressão aplicada ao canal/poro não seja suficiente para provocar a deformação da gota até que seus ângulos de contato críticos sejam atingidos, a gota permanecerá presa às paredes do canal. Esta situação está ilustrada na Figura 106. Nessa figura, obtida da simulação em que uma gota de água está sujeita à injeção de óleo (situação inversa à da recuperação de petróleo), é mostrada a evolução das forças de adesão (calculada pelo método CSF) e devido à diferença de pressão sobre a gota com o decorrer do tempo. Também é apresentada a força de adesão obtida analiticamente por meio da equação (7.4). A curva dessa força está sobreposta à curva da força de adesão obtida numericamente, validando o cálculo dessa força pelo programa desenvolvido neste trabalho.

Verifica-se que, após 50 mil passos de tempo (0,025 s), a força de adesão se igualou àquela gerada pela diferença de pressão e, como os ângulos críticos não foram atingidos em nenhum momento da simulação (Figura 107), a gota de água não é deslocada pelo óleo injetado.

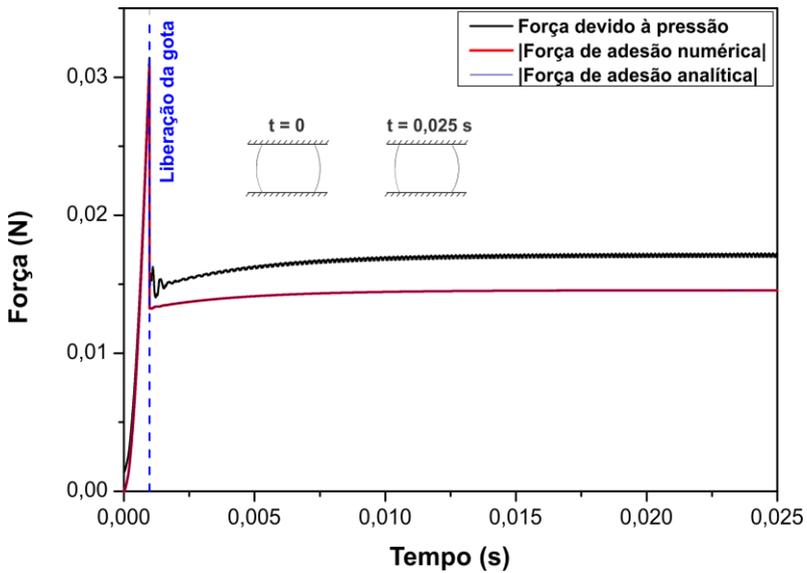


**Figura 106.** Evolução ao longo do tempo das forças de adesão (em módulo) e devido à diferença de pressão na gota para a situação em que ela permanece presa às paredes do canal. Nesta situação, foi aplicada uma diferença de pressão no canal de 50 Pa. Nessa figura também são mostradas as formas inicial e final da gota.

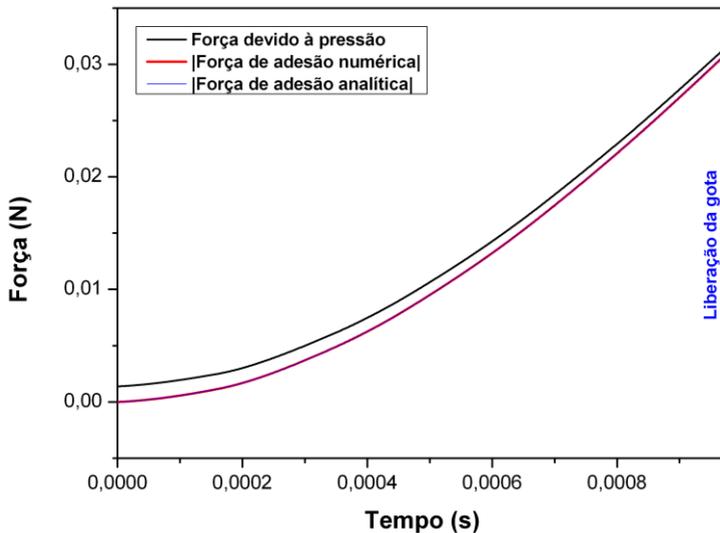
Por outro lado, se a diferença de pressão aplicada aos extremos do canal for suficientemente alta, os ângulos críticos serão atingidos. Assim, a gota se desprenderá, sendo transportada pelo óleo. A Figura 108 mostra a evolução dessas forças para a simulação em que uma diferença de 300 Pa foi aplicada em um canal com 7,092 mm de comprimento. Novamente a curva da força de adesão obtida numericamente concorda com a analítica. A Figura 108 (b) mostra em detalhe a evolução dessas forças antes da liberação da gota. As formas inicial e final da gota, esta última em que ela assume ângulos iguais a  $118,56^\circ$  para a interface de recuo e  $131,31^\circ$  para a interface de avanço (Figura 104), são mostradas no detalhe da Figura 108 (a).



**Figura 107.** Comportamento dos ângulos de contato ao longo do tempo para a mesma simulação da Figura 106.



**(a)** Evolução das forças ao longo de 50 mil passos de tempo.



(b) Evolução das forças no período anterior à liberação da gota.

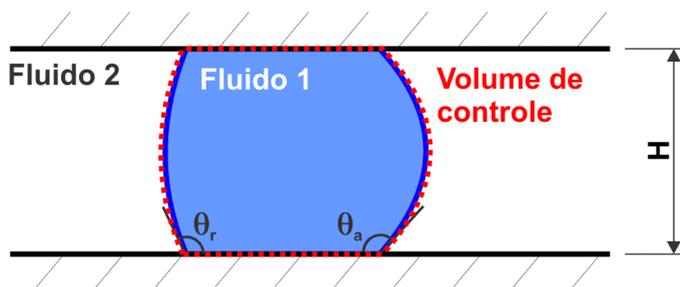
**Figura 108.** Evolução ao longo do tempo das forças de adesão (em módulo) e devido à diferença de pressão na gota para a situação em que ela é deslocada pelo óleo injetado quando uma diferença de pressão de 300 Pa é aplicada no canal.

Há uma queda abrupta no valor da força de adesão na liberação da gota, pois o ângulo de avanço tem seu valor diminuído de  $138^\circ$  para  $130^\circ$ , enquanto que o ângulo de recuo é aumentado de  $111^\circ$  para  $119^\circ$ . Assim, a força de adesão é reduzida em aproximadamente 0,018 N. Como um resultado da simulação, a força devido à diferença de pressão também é reduzida.

As oscilações<sup>43</sup> presentes na curva da força devido à diferença de pressão são devidas à forma como a pressão à montante e à jusante da gota de água são avaliadas. Como o balanço de forças é realizado em um volume de controle envolvendo a gota (Figura 109), tanto a pressão à montante quanto à jusante dela deveriam ser avaliadas exatamente na

<sup>43</sup> Como essas oscilações são resultantes de um pós-processamento de resultados que deveriam ser tomados exatamente na interface mas que não o são, elas não devem ser encaradas como oscilações numéricas do método de solução do escoamento.

interface, o que não é possível quando do emprego do método VOF. A extrapolação de tais pressões para a interface é complicada de ser realizada e, portanto, optou-se por avaliar essas pressões em volumes imediatamente vizinhos à interface e que possuam fração volumétrica nula (ou seja, que estejam preenchidos somente por óleo). Essa situação é mostrada na Figura 110 para metade da interface de recuo, onde a pressão à montante da gota é uma média aritmética da pressão avaliada nos volumes vizinhos à interface (volumes em verde formando degraus).

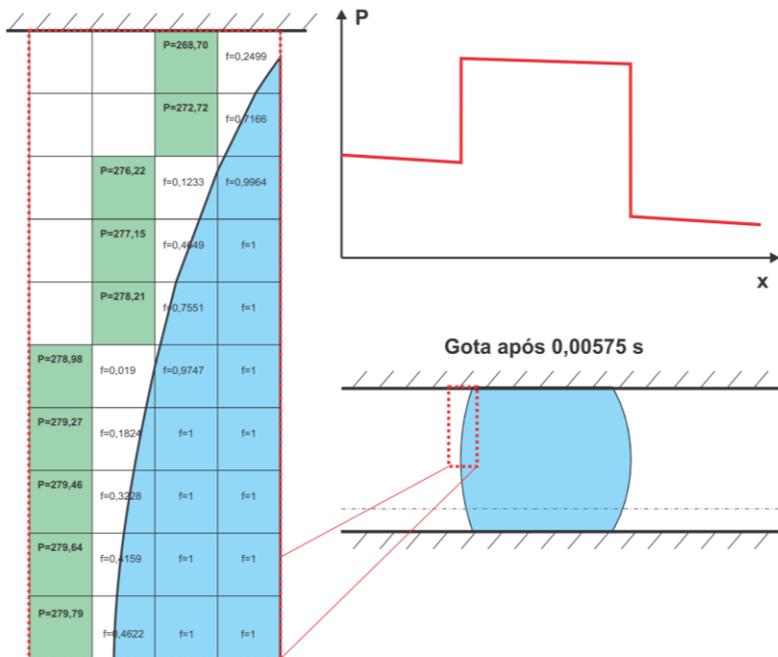


**Figura 109.** Volume de controle envolvendo a gota.

A primeira implicação dessa forma de avaliação da pressão é um erro na estimativa do seu gradiente. Uma vez que, para a situação ilustrada na Figura 108, a pressão do óleo ao longo do canal decresce, a diferença de pressão resultante é superestimada ao se avaliar a pressão em volumes um pouco afastados da interface.

Uma segunda consequência desse cálculo da pressão são as oscilações mostradas na Figura 108 (a). Com o deslocamento da gota após alguns passos de tempo, alguns volumes que continham a interface passam a conter apenas óleo (fração volumétrica nula) alterando a forma dos “degraus” verdes da Figura 110, e a pressão agora será avaliada nesses volumes. Então as pressões à montante e à jusante da gota, que deveriam decrescer monotonicamente com o tempo devido ao deslocamento da gota, apresentam saltos. A frequência desses saltos depende do avanço das interfaces e se intensifica com o aumento da velocidade da gota. Ressalta-se que os saltos da pressão à montante da gota não coincidem necessariamente com aqueles da pressão à jusante.

Entretanto, esse cálculo da diferença de pressão só tem efeito para ilustrar a evolução da força devido a ela ao longo do tempo, não havendo nenhum tipo de influência dele na simulação.



**Figura 110.** Volumes em que a pressão à montante da gota é avaliada para o cálculo da força devido à diferença de pressão. Nesta figura, “P” indica a fração volumétrica de água no volume e “P” indica a pressão em Pa. O perfil de pressão ilustrado corresponde ao perfil ao longo da linha traço-ponto no esquema da gota.

### 7.2.3. Velocidade terminal

Com o decorrer do tempo após a liberação da gota de água, a força motriz do escoamento se iguala à soma das forças devido ao atrito viscoso dos fluidos e de adesão da gota. Esse equilíbrio de forças impõe uma velocidade constante à gota, denominada de **velocidade terminal**.

Supondo que o escoamento de ambos os fluidos ao longo do canal seja igual ao escoamento de Poiseuille em um canal formado por placas paralelas infinitas e considerando apenas as forças devido à diferença de pressão, devido ao atrito viscoso em ambos os fluidos e de adesão das interfaces da gota, a velocidade terminal da gota ( $U_{gota}$ ) pode ser calculada por

$$\Delta P \cdot H \cdot w = F_{ades\tilde{a}o} + f_1 \frac{1}{2} \rho_1 U_{gota}^2 \cdot 2 \cdot L_{gota} \cdot w$$

$$+ f_2 \frac{1}{2} \rho_2 U_{gota}^2 \cdot 2 \cdot (L - L_{gota}) \cdot w \quad (7.10)$$

onde  $L_{gota}$  é o comprimento da gota em contato com a parede; os subscritos 1 e 2 indicam água e óleo respectivamente;  $f$  é o fator de fricção e vale  $24/Re_{D_h}$  (BEJAN, 2004).  $Re_{D_h}$  corresponde ao número de Reynolds avaliado com o diâmetro hidráulico do canal ( $D_h = 2 \cdot H$ ) e com a velocidade terminal da gota. Na equação (7.10), foram desprezados os termos relativos à quantidade de movimento na entrada e na saída do canal, pois a velocidade nessas duas regiões são iguais. Portanto, esses termos se anulam.

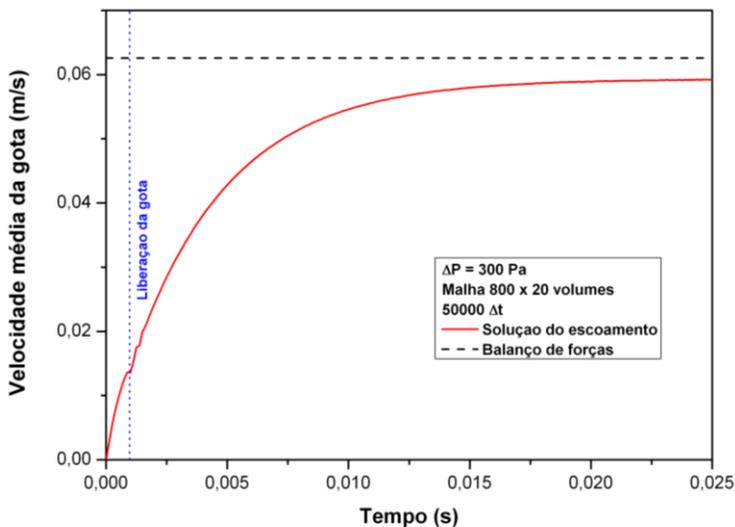
Uma vez que a força de adesão pode ser obtida pela equação (7.4) e os ângulos de contato dinâmicos são funções da velocidade média da gota, a equação (7.10) pode ser reescrita como uma equação transcendental, cuja raiz  $U_{gota}$  pode ser facilmente determinada numericamente por meio do método de Newton-Raphson.

Na Figura 111, o valor da velocidade média da gota obtida da simulação do problema para uma diferença de pressão de 300 Pa é comparado à velocidade terminal da gota calculada da equação (7.10). A diferença entre esses valores é de 5,28%.

A Tabela 7-4 apresenta os valores da velocidade terminal da gota obtida numericamente e analiticamente para outros valores da diferença de pressão no canal. Esses resultados foram obtidos empregando uma malha com 800 x 20 volumes.

Como pode ser verificado nesta tabela, a diferença entre a velocidade obtida numericamente e a obtida analiticamente é praticamente a mesma para todos os valores de  $\Delta P$  empregados e se trata de um erro aceitável para essa aproximação.

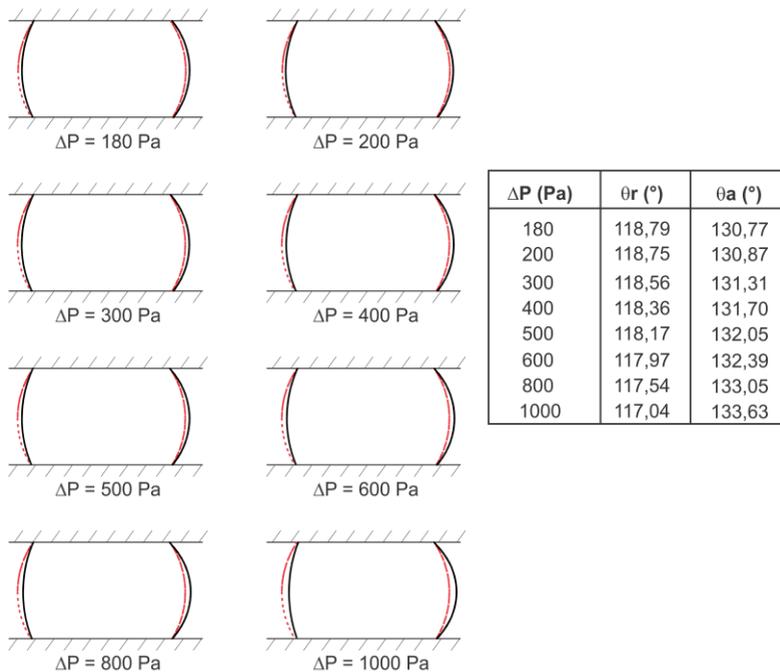
Para esses mesmos valores da diferença de pressão no canal, a Figura 112 mostra uma comparação entre a forma inicial da gota de água e sua forma final, quando a velocidade terminal foi atingida. Como era esperado, quanto maior a diferença de pressão, maior a velocidade média da gota e, portanto, maior o ângulo de avanço e menor o ângulo de recuo, os quais são descritos pelos modelos de Jiang e Tanner respectivamente.



**Figura 111.** Comparação entre a velocidade média da gota obtida do programa desenvolvido neste trabalho (linha vermelha) e a velocidade terminal da gota calculada pela equação (7.10) (linha preta).

**Tabela 7-4.** Comparação dos valores da velocidade terminal da gota para diferentes  $\Delta P$ .

$\Delta P$ (Pa)	Velocidade obtida numericamente (m/s)	Velocidade obtida analiticamente (m/s)	Diferença (%)
180	0,0279	0,0295	5,42
200	0,0331	0,0350	5,43
300	0,0592	0,0625	5,28
400	0,0855	0,0902	5,21
500	0,1117	0,1179	5,26
600	0,1378	0,1456	5,36
800	0,1904	0,2012	5,37
1000	0,2418	0,2569	5,88



**Figura 112.** Comparação entre a forma inicial (linha vermelha) e a forma final da gota quando a velocidade terminal é atingida (linha preta) para diferentes valores da diferença de pressão aplicada ao canal.

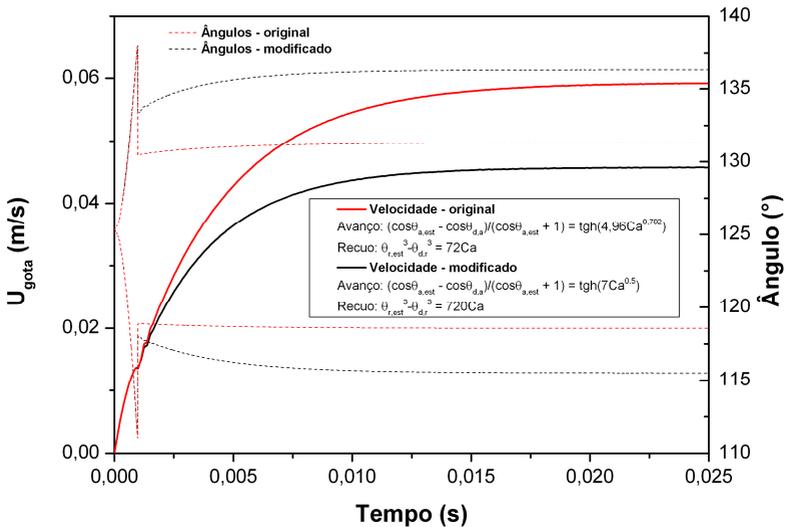
A velocidade terminal da gota pode ser alterada pelos coeficientes dos modelos dos ângulos de contato dinâmicos, conforme pode ser deduzido da equação (7.10), já que a força de adesão é uma função dos ângulos de contato, os quais, por sua vez, dependem da velocidade da gota. Para exemplificar a influência desses coeficientes, simulou-se o mesmo escoamento da Figura 111, mas agora foram adotados os seguintes modelos modificados para os ângulos de contato dinâmicos:

$$\frac{\cos \theta_{a,lib} - \cos \theta_{a,d}}{\cos \theta_{a,lib} + 1} = \operatorname{tgh}(7 Ca^{0,5}), \quad (7.11)$$

para o ângulo de avanço e

$$\theta_{r,lib}^3 - \theta_{r,d}^3 = 720 Ca, \quad (7.12)$$

para o ângulo de recuo. Com os novos coeficientes, há uma maior deformação das interfaces e, conseqüentemente, a força de adesão aumenta, impondo uma maior resistência ao escoamento. Portanto, a velocidade terminal da gota é menor do que a obtida anteriormente: 0,0457 m/s contra 0,0592 m/s, para uma diferença de pressão de 300 Pa. O comportamento dos ângulos de contato e da velocidade média da gota para os dois modelos adotados (original e modificado) é mostrado na Figura 113.



**Figura 113.** Comportamento dos ângulos de contato (linhas tracejadas) e da velocidade média da gota (linhas contínuas) para o modelo de ângulo de contato dinâmico original (em vermelho) e para o modelo modificado (em preto). Esses resultados foram obtidos de simulações com uma malha com 800 x 20 volumes e uma diferença de 300 Pa aplicada ao canal.

#### 7.2.4. Diferença de pressão crítica

Um dos principais focos da simulação do efeito Jamin é a determinação da diferença de pressão aplicada **ao canal**, acima da qual a gota de água é transportada pelo óleo. Essa diferença de pressão é denominada crítica.

A gota só será desprendida se seus ângulos críticos forem atingidos. Logo, é necessário que a  $\Delta P$  aplicada gere uma força que se

sobreponha à força de adesão e aos efeitos dinâmicos, promovendo a deformação da gota até seu estado crítico.

Para identificar a magnitude dessa diferença de pressão, simulações foram realizadas para valores da pressão na fronteira oeste do canal variando entre 50 e 1000 Pa, lembrando que a diferença de pressão crítica **na gota** (Figura 109) poderia ser calculada para a situação estática pela equação (2.53). A pressão prescrita na fronteira oeste foi limitada a 1000 Pa porque, acima desse valor, um canal mais longo seria necessário para que a velocidade terminal fosse atingida.

Para este caso em particular<sup>44</sup>, a  $\Delta P$  crítica no canal obtida das simulações com uma malha com 800 x 20 volumes é igual a **103 Pa**. Trata-se da maior diferença de pressão imposta ao canal para que a gota seja mantida presa. Um valor da  $\Delta P$  levemente superior a esse valor corresponde à situação em que os ângulos críticos são atingidos no momento em que a velocidade do fluido da gota, após sofrer uma desaceleração, é nula (ponto 5 na Figura 99). É necessário salientar que essa condição crítica é válida unicamente para o problema simulado, pois a diferença de pressão crítica depende da distância entre as paredes do canal e das propriedades dos fluidos e sólidos envolvidos.

Ao longo das simulações, verificou-se que, para diferenças de pressão abaixo do valor crítico (103 Pa) ou igual a ele, as pressões à montante e à jusante da gota eram uniformes após a gota parar de oscilar.

Já para diferenças de pressão maiores do que a crítica, a gota pode ser liberada quando o fluido em seu interior está sendo desacelerado ou acelerado. No primeiro caso, a desaceleração do fluido coopera com o aumento da diferença de pressão na gota, invertendo o gradiente de pressão. E, como visto anteriormente, no segundo caso, a pressão à montante da gota aumenta e a pressão à jusante dela diminui, provocando um aumento na diferença de pressão na gota, a qual, por sua vez, promove a deformação da gota até que os ângulos de contato críticos sejam alcançados e a gota seja liberada ainda nesse período de aceleração.

Ressalta-se que esse valor de 103 Pa corresponde à diferença de pressão que deve ser aplicada aos extremos do canal. Como na dedução da equação (2.53) supôs-se que as pressões ao longo do canal eram uniformes no instante da liberação da gota, por essa equação, a diferença

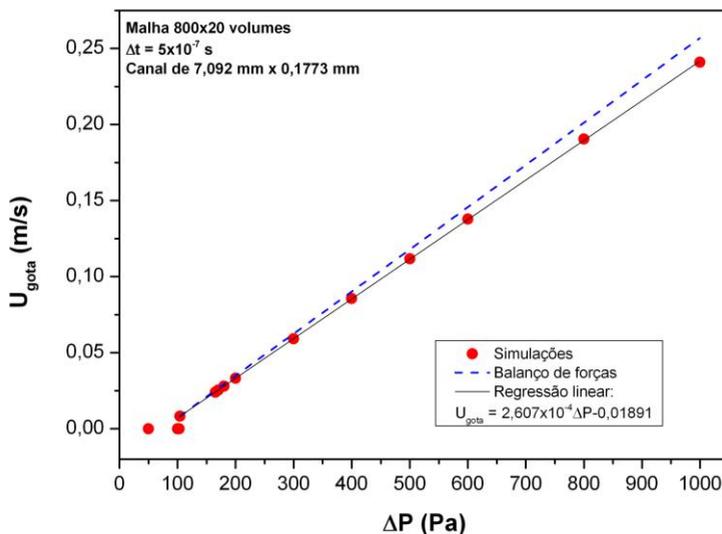
---

<sup>44</sup> Envolvendo o escoamento de óleo e água em um canal de PDMS com altura igual a  $177,3 \times 10^{-6}$  m.

de pressão crítica no canal é igual a 173,61 Pa. Comparando-se esse valor ao obtido nas simulações, verifica-se que a previsão fornecida pela equação (2.53) resulta num erro de 68,6%. Esse erro é atribuído à não-consideração dos efeitos dinâmicos por essa equação.

Como foi mostrado anteriormente, para o caso simulado os efeitos dinâmicos são relevantes na evolução do efeito Jamin, provocando, em situações em que o fluido da gota é desacelerado, a inversão do gradiente de pressão no canal e na gota. Com essa inversão, a diferença de pressão na gota aumenta, chegando ao valor necessário para deformar a gota até seu estado crítico. Esse comportamento não é previsto pela equação (2.53) e representa uma deficiência dela.

Conhecendo-se o valor da diferença de pressão mínima que deve ser aplicada ao canal para a gota ser despreendida, pode-se construir um gráfico da velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão (Figura 114).



**Figura 114.** Velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão no canal. A  $\Delta P$  crítica vale 103 Pa.

Analisando-se a variação da velocidade terminal da gota com a diferença de pressão, constatou-se que há uma dependência linear entre essas duas variáveis, para valores de  $\Delta P$  entre 104 Pa e 1000 Pa. A

equação da reta que descreve essa dependência é mostrada na legenda da Figura 114. Essa dependência linear também é ratificada pela velocidade obtida do balanço de forças expresso pela equação (7.10), que também é mostrada nessa figura (linha tracejada azul). Deve-se lembrar que os ângulos de contato dinâmicos também variam com a velocidade e, portanto, o termo referente à força de adesão introduz perturbações ao comportamento linear da velocidade terminal da gota. Contudo, essas perturbações exerceram pouca influência nos resultados apresentados, pois a variação dos ângulos de contato dinâmicos foi pequena.

Infelizmente, as escalas adotadas nesse mesmo gráfico da velocidade terminal em função da  $\Delta P$  obtido por Boukellal et al. (2009)<sup>45</sup> não permitem identificar se há uma dependência linear entre a velocidade da gota e a diferença de pressão para valores de  $\Delta P$  próximos ao seu valor crítico.

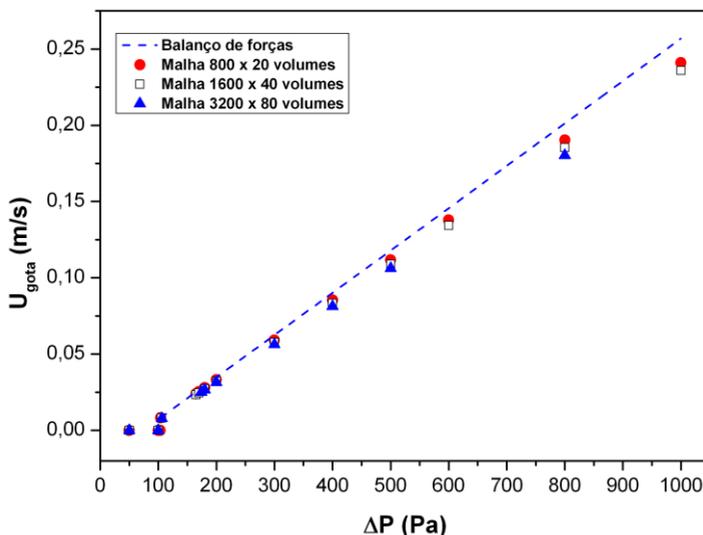
Verificou-se ainda que o refino da malha não exerce influência no valor da  $\Delta P$  crítica no canal. Entretanto, quanto maior o refino da malha, menor a velocidade terminal da gota, como pode ser observado no gráfico ilustrado na Figura 115. Nessa figura são comparados os resultados da velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão para três malhas diferentes: 800 x 20, 1600 x 40 e 3200 x 80 volumes. Para essa última malha, o passo de tempo foi reduzido para  $10^{-7}$  s, de forma a respeitar o limite imposto pelo método CSF e expresso pela inequação (2.10).

Por outro lado, o passo de tempo parece influenciar no valor da diferença de pressão crítica, uma vez que para a malha com 3200 x 80 volumes e passo de tempo igual a  $10^{-7}$  s, a gota foi liberada apenas quando  $\Delta P$  maiores do que 106 Pa foram aplicados às extremidades do canal.

Na Figura 115, a linha tracejada azul representa a velocidade terminal da gota obtida pela equação (7.10). Como pode ser verificado, quanto maior o refino da malha, mais a velocidade terminal se afasta da solução obtida com o balanço de forças considerando um escoamento de Poiseuille.

---

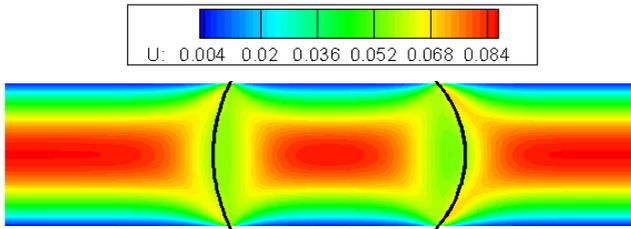
<sup>45</sup> Este gráfico foi reproduzido na Figura 16 (b) do Capítulo 2.



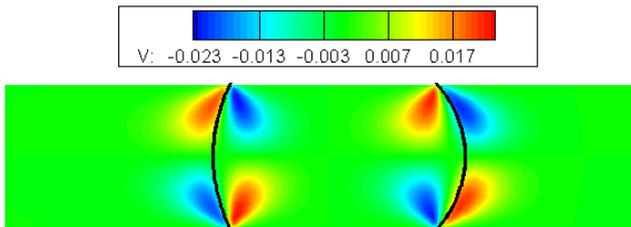
**Figura 115.** Velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão no canal para três tamanhos de malha.

Em um escoamento de Poiseuille, a componente vertical da velocidade ( $v$ ) é nula. Porém, ao se analisar o campo de  $v$  obtido nas simulações e ilustrado na Figura 116 (b), constatou-se que a variação dessa componente da velocidade não era da ordem de velocidades espúrias. Essa observação reforça que as diferenças na velocidade terminal apresentadas na Figura 115 não são devidas a erros das aproximações numéricas.

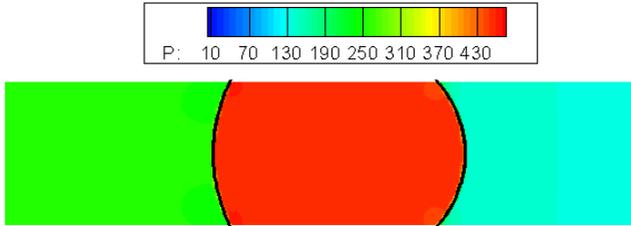
Como relatado por Baroud e colaboradores (2010), a presença da interface da gota introduz não-linearidades ao escoamento, provocando seu afastamento daquele previsto por Poiseuille. Nesse novo escoamento, a componente vertical da velocidade não é mais nula e, como pode ser verificado da Figura 116(a), a interface se desloca à mesma velocidade média da gota (0,0577 m/s). Trata-se de uma situação análoga à de um projétil se deslocando em um tubo.



(a) Componente horizontal da velocidade em m/s.



(b) Componente vertical da velocidade em m/s.

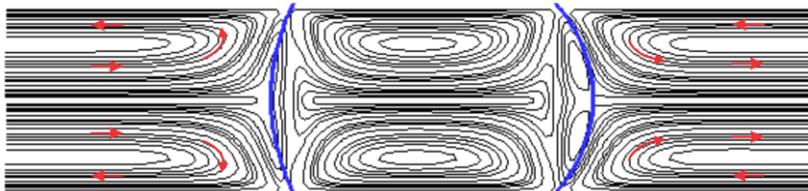


(c) Pressão em Pa.

**Figura 116.** Campos das componentes (a) horizontal e (b) vertical da velocidade e (c) de pressão. Esses resultados foram obtidos na simulação empregando uma malha com 1600 x 40 volumes e uma diferença de 300 Pa aplicada ao canal. A linha preta indica a interface da gota.

Essas alterações nos campos de velocidade ocorrem devido à diferença entre as velocidades do óleo e da gota: enquanto que a velocidade do óleo no centro do canal é maior do que a velocidade média da gota, as camadas desse óleo junto às paredes se deslocam a uma velocidade menor do que a da gota. Assim, o fluido que escoava pelo centro do canal à montante da gota ao atingi-la tem sua direção alterada,

sendo desviado em direção às paredes do canal. Já à jusante, a propagação da gota faz com que o óleo mais lento junto às paredes seja desviado para o centro do canal. Esse padrão de escoamento pode ser observado na Figura 117, onde são mostradas as linhas de corrente considerando um referencial que se desloca à velocidade média da gota.



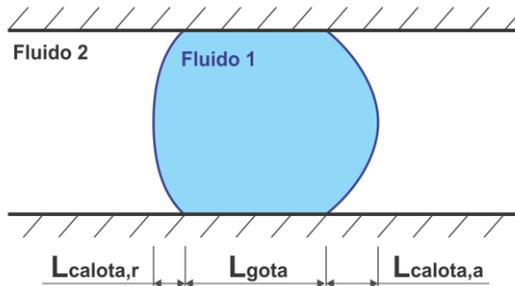
**Figura 117.** Linhas de corrente considerando um referencial se deslocando à velocidade média da gota. Esse resultado foi obtido na mesma simulação da Figura 116. A linha azul indica a interface.

Essa mesma configuração do escoamento é apresentada no trabalho de Baroud, Gallaire e Dangla (2010) e Kurup e Basu (2012), porém, naquelas publicações foi abordado o caso em que o fluido injetado molha completamente as paredes do canal, formando um filme sobre o qual a gota escoou num padrão de escoamento do tipo *slug*.

Uma implicação desses desvios de trajetória do escoamento é uma maior perda de carga na região das calotas da gota, indicadas na Figura 118. Contudo, essa perda de pressão não é considerada na aproximação expressa pela equação (7.10), que contempla apenas as forças viscosas atuantes no interior da gota e no óleo onde o escoamento é considerado igual ao de Poiseuille.

No escoamento do tipo *slug*, onde a gota desliza sobre um filme de um fluido que molha totalmente a superfície, Bico e Quéré (2001), Hodges, Jensen e Rallison (2004), Fuerstman et al. (2007) e Baroud, Gallaire e Dangla (2010) afirmam que a queda de pressão induzida pelo escoamento nas calotas da gota é proporcional a  $(\sigma Ca^{2/3})/H$ . A constante de proporcionalidade para o escoamento de uma bolha de ar em um canal de seção transversal retangular preenchido por água foi determinada por Fuerstman e colaboradores como sendo igual a 12. Ainda segundo eles, o valor dessa constante independe da razão entre a altura do canal e a sua largura<sup>46</sup> e da viscosidade do fluido injetado.

<sup>46</sup> Embora, ao apresentarem a constante de proporcionalidade no início do artigo, os pesquisadores afirmaram que essa constante depende da razão  $H/w$ .



**Figura 118.** Calotas da gota.

Visando à determinação da velocidade terminal da gota, adaptou-se a equação (7.10), de forma a contemplar a perda de carga imposta pelo escoamento em torno das calotas da gota:

$$\begin{aligned} \Delta P \cdot H \cdot w &= F_{adesão} + f_1 \frac{1}{2} \rho_1 U_{gota}^2 \cdot 2 \cdot L_{gota} \cdot w \\ &+ f_2 \frac{1}{2} \rho_2 U_{gota}^2 \cdot 2 \cdot (L - L_{gota}) \cdot w + \Delta P_{calota} \cdot H \cdot w \end{aligned} \quad (7.13)$$

onde a diferença de pressão no último termo da equação é descrita pela expressão mencionada anteriormente:

$$\Delta P_{calota} = \frac{C_{calota} \cdot \sigma}{H} Ca^{2/3}. \quad (7.14)$$

Nesta equação, o número capilar é calculado com a maior viscosidade dos fluidos envolvidos e a velocidade média da gota. A perda de carga nas calotas é introduzida na equação (7.13) para compensar os erros inerentes às aproximações adotadas para a dissipação viscosa na gota e no óleo. Nessas aproximações, foi considerado que o escoamento se comportava como o previsto por Poiseuille. Cabe ressaltar que a hipótese de que o escoamento no interior da gota é de Poiseuille só é válida para gotas muito longas, onde as perturbações introduzidas pela interface só afetam o escoamento nas suas adjacências.

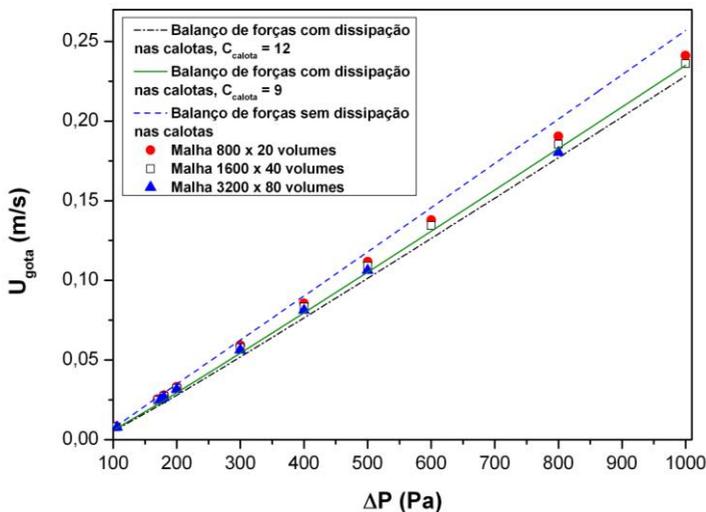
Vale destacar que, nos modelos propostos pelos autores mencionados anteriormente, não é contemplado o primeiro termo do lado direito da equação (7.13), pois, como não há contato entre a gota/bolha e a superfície nos escoamentos abordados por eles, não há

efeitos adesivos. Já no modelo proposto por Lee e Lee (2010) para descrever o escoamento pistonado seco (*dry-plug flow*) de uma bolha de ar em água este mesmo termo aparece. Contudo, esses pesquisadores não modelam a perda de carga nas calotas, apesar de reconhecer a sua existência e relevância.

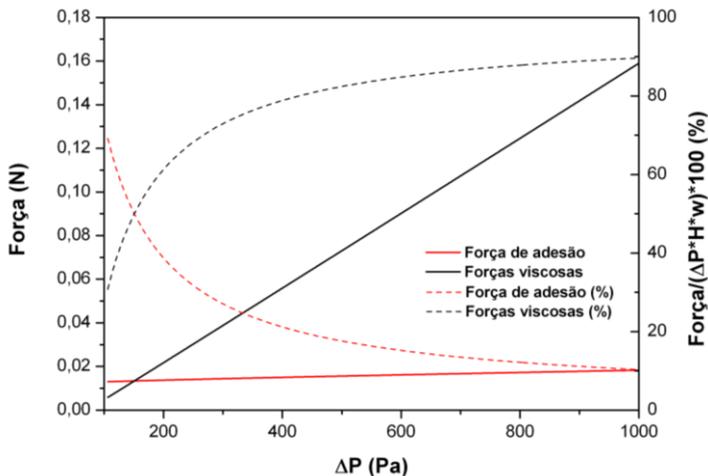
Como pode ser observado na Figura 119, quanto maior o refino da malha, menor a velocidade terminal da gota. Isto é uma consequência da melhor discretização do escoamento junto às paredes, onde as forças viscosas são maiores. Também pode-se constatar o subdimensionamento dos termos viscosos pela aproximação expressa pela equação (7.10), que, ao não incluir a perda de carga na região das calotas da gota, se afasta do comportamento previsto pelo modelo da equação (7.13).

Admitindo-se que a solução real do problema seja próxima à obtida com a malha mais fina (3200 x 80 volumes), avalia-se que a constante  $C_{calota}$  deva ser igual a **nove** para estimar adequadamente os efeitos viscosos impostos pelo escoamento em torno das calotas da gota (linha verde no gráfico da Figura 119). Essa diferença na constante de proporcionalidade em relação ao valor reportado por Fuerstman et al. (2007) deve-se ao fato de o problema aqui simulado, além de ser bidimensional, não exibir a formação de um filme sob a gota como nos experimentos daqueles pesquisadores, que consideraram que a constante de proporcionalidade deveria ser igual a doze.

Adotando-se o modelo da equação (7.13) como referência, pode-se estimar qual a contribuição dos termos de adesão e viscosos em função da  $\Delta P$  quando a gota se desloca à velocidade terminal. Constatou-se que, para pequenos valores da diferença de pressão no canal – os quais proporcionam uma menor velocidade à gota –, a ordem da força de adesão é uma vez maior do que a das forças viscosas, conforme ilustrado na Figura 120. Contudo, com o aumento de  $\Delta P$  e, conseqüentemente, das velocidades da gota e do óleo, os efeitos viscosos passam a predominar, chegando a corresponder a aproximadamente 90% da força motriz do escoamento para uma diferença de 1000 Pa aplicada aos extremos do canal.

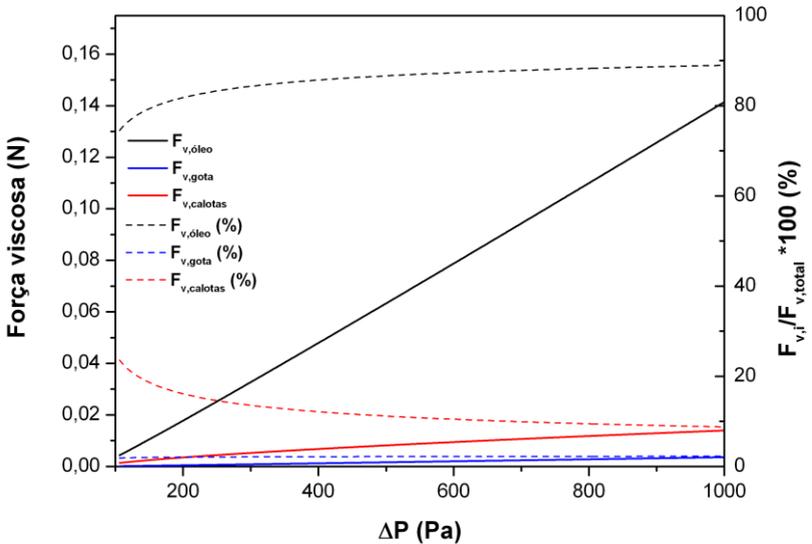


**Figura 119.** Velocidade terminal da gota em função da diferença de pressão aplicada no canal. Os resultados para as diferentes aproximações para o balanço de forças no canal são ilustrados: desprezando a dissipação viscosa nas calotas da gota (linha tracejada azul) e considerando-a (linhas preta e verde).



**Figura 120.** Contribuições das forças de adesão e viscosas na dissipação de energia do escoamento em regime permanente em função de diferentes valores de  $\Delta P$  aplicados ao canal.

Analisando-se somente as forças viscosas, foi concluído que o atrito viscoso no óleo exerce um papel mais relevante na dissipação da energia do escoamento do que as demais parcelas (efeitos viscosos na gota e nas suas calotas). Isso se deve principalmente ao fato de o canal possuir um comprimento muito maior do que o ocupado pela gota. Além disso, como pode ser observado na Figura 121, a taxa de crescimento da dissipação viscosa no óleo é maior do que a taxa de crescimento das outras duas parcelas com o aumento da velocidade da gota.



**Figura 121.** Contribuições na dissipação viscosa dos efeitos viscosos no óleo (linha preta), na gota (linha azul) e em suas calotas (linha vermelha). No eixo das ordenadas à direita, o subscrito  $i$  indica uma das três parcelas mencionadas.

Objetivando a análise da variação da velocidade da gota com o tempo, pode-se incluir o termo de aceleração dos fluidos na equação (7.13). A inclusão deste novo termo resulta na seguinte equação diferencial ordinária:

$$\begin{aligned}
 (m_1 + m_2) \frac{dU_{gota}}{dt} = & \Delta P \cdot H \cdot w - F_{adesão} - f_1 \frac{1}{2} \rho_1 U_{gota}^2 \cdot 2 \cdot L_{gota} \cdot w \\
 & - f_2 \frac{1}{2} \rho_2 U_{gota}^2 \cdot 2 \cdot (L - L_{gota}) \cdot w - \frac{C_{calota} \sigma}{H} Ca^{2/3} \cdot H \cdot w
 \end{aligned} \quad (7.15)$$

Ressalta-se que a velocidade média do óleo é igual à velocidade média da gota.

A constante de proporcionalidade  $C_{calota}$ , conforme mencionado anteriormente, foi calibrada pelo resultado numérico para uma malha com 3200 x 80 volumes.

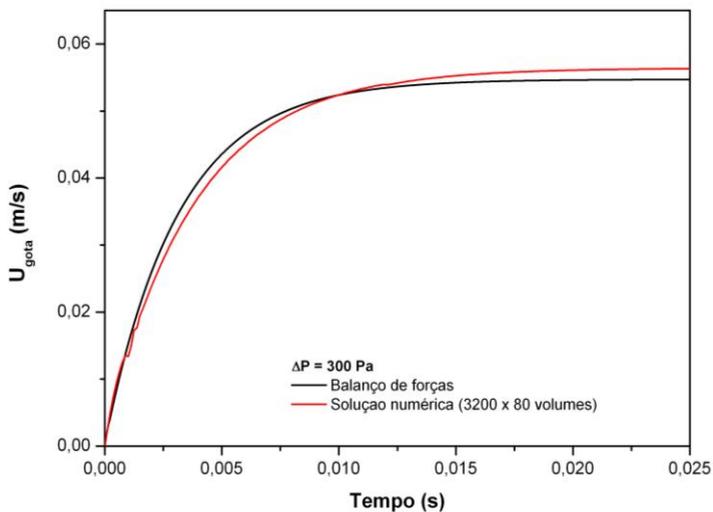
A equação (7.15) não possui solução analítica, pois tanto a força de adesão quanto a perda de carga nas calotas dependem da velocidade da gota. Os ângulos de contato dinâmicos novamente foram obtidos dos modelos expressos pelas equações (7.11) e (7.12). Portanto, aplicou-se o método de Runge-Kutta de quarta ordem para determinar a solução numérica dessa equação.

Para a solução dessa equação, considerou-se que, durante o período em que a gota se encontra presa às paredes do canal, os ângulos de contato estáticos de avanço e de recuo evoluem linearmente com a velocidade média da gota:

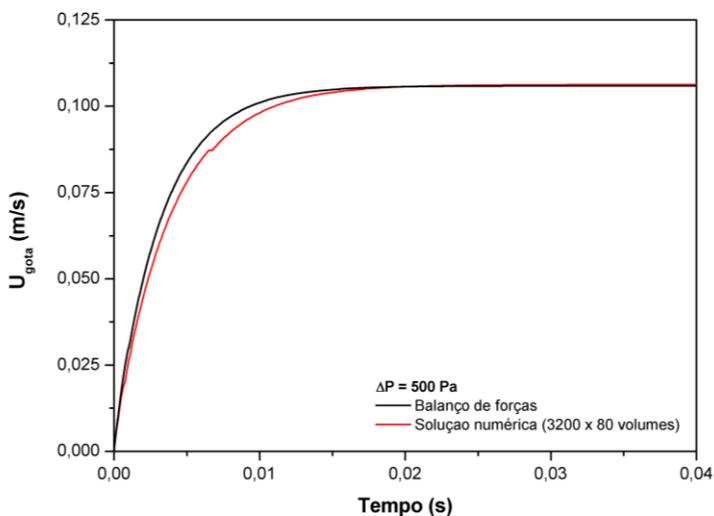
$$\begin{aligned}\theta_o(t) &= \theta_o^0 + \frac{U_{gota} \cdot \Delta t}{H/2} \\ \theta_r(t) &= \theta_r^0 - \frac{U_{gota} \cdot \Delta t}{H/2}\end{aligned}\tag{7.16}$$

Na expressão (7.16), o sobrescrito 0 indica que o ângulo de contato é avaliado no instante de tempo anterior,  $\Delta t$  é o passo de tempo utilizado na solução do equação pelo método Runge-Kutta e os ângulos são expressos em radianos.

A solução da equação (7.15) é comparada aos resultados da simulação na Figura 122(a) para uma diferença de 300 Pa e Figura 122(b) para uma diferença de 500 Pa aplicada ao canal e um  $\Delta t$  igual a  $10^{-7}$  s. Constata-se dessa figura que essas soluções resultam num comportamento semelhante para a velocidade média da gota. Entretanto, a aceleração da gota é maior na simulação numérica, resultando em velocidades terminais 3% (300 Pa) e 0,35% (500 Pa) maior do que as obtidas pela solução da equação (7.15).



(a) 300 Pa



(b) 500 Pa

**Figura 122.** Comportamento da velocidade média da gota em função do tempo para uma diferença de (a) 300 Pa e (b) 500 Pa aplicada ao canal: solução da equação (7.15) (preto) *versus* resultados da simulação (vermelho).

Como os resultados da simulação numérica foram utilizados na calibração de  $C_{calota}$ , pode-se afirmar que a solução numérica e a proveniente do balanço de forças no canal se autovalidam, reproduzindo satisfatoriamente o comportamento dinâmico do escoamento da gota após a sua liberação.

Portanto, a equação (7.15) consiste em uma forma simples e rápida de se determinar o comportamento transiente da velocidade média da gota, além de ser capaz de fornecer o valor de sua velocidade terminal. Esta é uma alternativa à simulação numérica do efeito Jamin, que é capaz de fornecer essas mesmas informações após algumas horas de computação.

### 7.2.5. Gota desacelerando

Para concluir este capítulo, simulou-se a situação em que, após ter atingido sua velocidade terminal, a gota é desacelerada por meio da prescrição de uma pressão nula também à fronteira oeste do domínio.

Esta nova simulação foi inicializada com os resultados da simulação em que era prescrita uma diferença de pressão de 300 Pa ao canal e que foi executada por 50 mil passos de tempo. Nesse momento, a gota já havia atingido sua velocidade terminal e a prescrição de uma  $\Delta P$  nula faz com que a gota seja retardada de sua velocidade terminal até entrar em repouso.

Todos os parâmetros listados na Tabela 7-3 com exceção da condição de contorno na fronteira oeste foram empregados na simulação da gota desacelerando.

Com a desaceleração da gota, foi necessário estabelecer um critério do momento em que as linhas de contato da interface seriam novamente fixadas às paredes. Esse critério foi definido como sendo o momento em que a velocidade média da gota fosse menor do que  $10^{-4}$  m/s. Nesse instante, pelos modelos de Jiang e Tanner, os ângulos de contato da gota reassumem seus valores  $\theta_{r,jib}$  e  $\theta_{a,jib}$ , que correspondem aos ângulos na liberação da gota após seu estado crítico ser atingido.

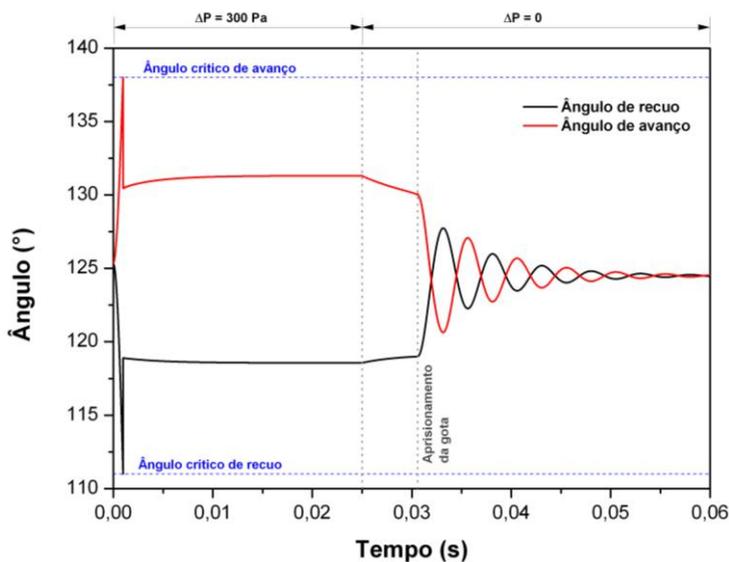
A evolução dos ângulos de contato ao longo do tempo é mostrada na Figura 123. Como pode ser observado dessa figura, a gota leva  $5,57 \times 10^{-3}$  s para ter suas linhas de contato presas a partir do momento em que uma pressão nula é prescrita na fronteira oeste. No instante em que a gota é aprisionada, os ângulos de contato passam novamente a ser calculados a partir de uma coordenada fixa para as linhas de contato e

do campo de fração volumétrica, sendo abandonados os modelos para ângulo de contato dinâmico.

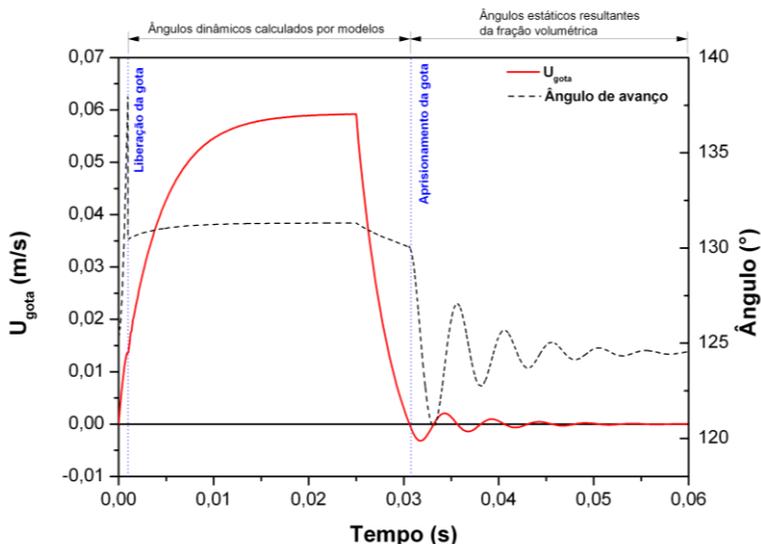
Como pode ser constatado da Figura 123, assim como ocorreu no caso em que a gota permanecia presa às paredes do canal mesmo sujeita a uma  $\Delta P$ , os ângulos de contato oscilam com o tempo e, por fim, estabilizam, quando finalmente a velocidade média da gota atinge o valor zero (Figura 124).

Cabe salientar que o valor final dos ângulos de contato de recuo e de avanço não corresponde ao valor do ângulo de contato inicial ( $125,3^\circ$ ). Este valor inicial foi obtido considerando que o volume da gota era o mesmo para a situação crítica (com ângulos iguais a  $111^\circ$  e  $138^\circ$ ) e para a situação inicial.

Entretanto, quando da definição dos ângulos na liberação ( $\theta_{r,lib}$  e  $\theta_{a,lib}$ ), foi cometido um pequeno erro no cálculo do volume da gota. Os valores adotados para esses ângulos não mantêm o volume inicial da gota, obtido considerando interfaces circulares com ângulos iguais a  $125,3^\circ$ . Desta forma, quando a gota finalmente entra em repouso após a sua desaceleração, seus ângulos são iguais a  $124,6^\circ$ .



**Figura 123.** Evolução dos ângulos de contato ao longo do tempo para o caso em que a gota é desacelerada.



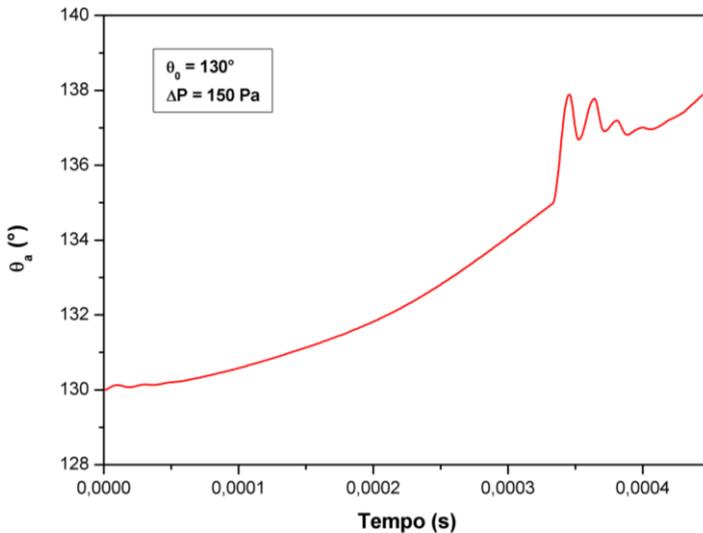
**Figura 124.** Comportamento da velocidade média da gota (linha vermelha) e do ângulo de avanço (linha tracejada preta) para o caso da gota sendo desacelerada.

### 7.2.6. Dificuldades presentes na simulação do efeito Jamin

A simulação numérica do efeito Jamin se defrontou com três dificuldades: a presença de oscilações no ângulo de contato de avanço quando este ultrapassava o valor de  $135^\circ$ , saltos não-físicos na força devido à diferença de pressão e na força de adesão em um determinado momento quando a gota já se encontrava livre e, por fim, os longos tempos consumidos nas simulações.

A primeira dificuldade foi superada ao se constatar que as oscilações se iniciavam exatamente quando o ângulo de contato de avanço alcançava  $135^\circ$ . Para este valor do ângulo, a direção do estêncil utilizado para a avaliação da função altura  $H_{cl}$  é trocada. Ou seja, para ângulos entre  $45^\circ$  e  $135^\circ$ , utiliza-se um estêncil paralelo à parede, enquanto que para valores do ângulo fora dessa faixa é empregado um estêncil perpendicular à parede.

Neste caso, a aplicação de um estêncil perpendicular à parede, além de resultar em maiores erros das aproximações conforme discutido no capítulo 2, acarreta uma função altura que não respeita os limites da malha. Isto implica a oscilação do ângulo de contato de avanço (Figura 125).



**Figura 125.** Oscilação do ângulo de contato de avanço a partir de  $135^\circ$ . Nesta simulação foi considerado um ângulo de contato inicial de  $130^\circ$  e uma diferença de pressão no canal de 150 Pa. Considerou-se um canal com comprimento de 1,4184 mm (oito vezes maior que sua altura).

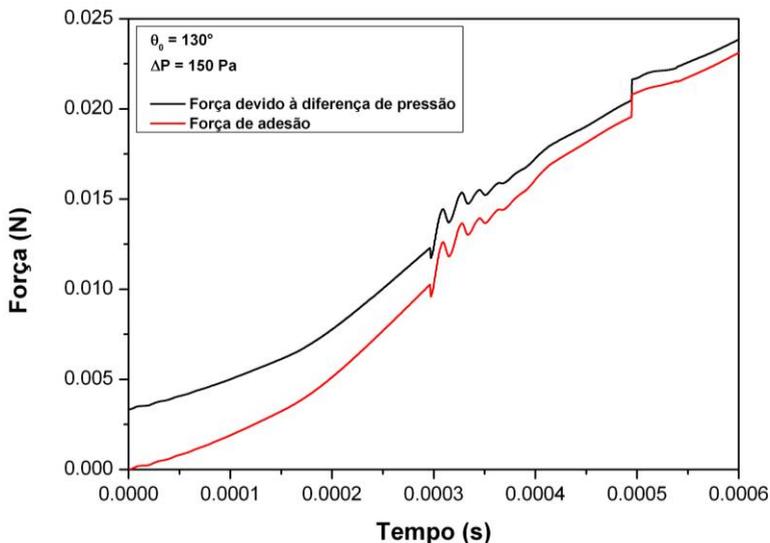
Para sanar estes problemas, empregou-se o novo algoritmo proposto no capítulo 5, segundo o qual, quando os limites da malha não são satisfeitos pela função altura, o estêncil perpendicular à parede é trocado por um estêncil paralelo a ela. Porém, por esse novo algoritmo, caso os limites da malha continuem a ser desrespeitados após a inversão do estêncil, retorna-se então ao estêncil original, que é perpendicular à parede.

Aplicou-se então esse algoritmo modificado às simulações e constatou-se que as oscilações no ângulo de contato de avanço haviam desaparecido.

Entretanto, esse novo algoritmo produziu um salto não-físico na força devido à diferença de pressão e na força de adesão, ilustrado na Figura 126.

No passo de tempo anterior à ocorrência desse salto, o algoritmo modificado inverte o estêncil e a nova função altura obtida com o estêncil paralelo à parede obedece aos limites da malha. Mas, no passo

de tempo seguinte, a interface dianteira da gota avança para um novo volume de controle e a função altura obtida com o estêncil paralelo deixa de satisfazer esses limites, sendo retomado o estêncil perpendicular à parede. Assim, há um aumento abrupto no valor da curvatura da interface no volume contendo a linha de contato, que se reflete sob a forma de um salto nas forças. Esse aumento no valor da curvatura é resultado de uma pior aproximação dessa variável para esse caso em particular (em que a interface avança para um novo volume) quando um estêncil perpendicular à parede é usado.



**Figura 126.** Salto não-físico na força de adesão e na força devido à diferença de pressão em  $4,95 \times 10^{-4}$  s, quando a gota já foi liberada. Este resultado corresponde à mesma simulação da Figura 125. Considerou-se que os ângulos de contato são mantidos constantes após a liberação das linhas de contato. Essa figura foi obtida empregando-se o algoritmo original, sem qualquer inversão do estêncil para corrigir as oscilações no ângulo de avanço.

Devido a essa situação, optou-se por forçar o emprego de um estêncil paralelo à parede quando do cálculo da curvatura da interface no volume contendo a linha de contato ( $\text{volume}_{cl}$ ). Com essa solução, os dois problemas mencionados desaparecem.

Em relação ao alto tempo computacional despendido nas simulações, a alternativa mais natural para reduzi-lo seria o emprego de

passos de tempo maiores. Porém, como explicado anteriormente, essa opção esbarra na limitação imposta pelo tratamento explícito da força devida à tensão interfacial.

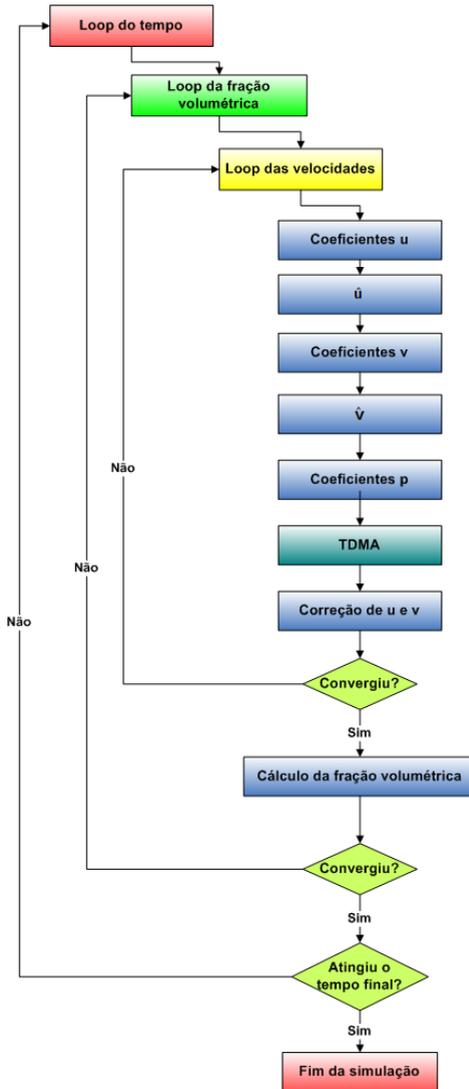
Outra opção é simular o problema em paralelo, distribuindo o cálculo do escoamento por diversos processadores, que atuarão simultaneamente conforme o algoritmo apresentado no capítulo 6. Esta iniciativa foi realizada utilizando o cluster do Cenpes, com 2892 processadores.

Entretanto, mesmo havendo um ganho de tempo computacional na paralelização da simulação, percebeu-se que havia margem para incrementar esse ganho ao se impor um número máximo de iterações na solução do sistema linear da pressão. Salienta-se que essa alteração não afetou a solução final do problema.

Tome-se o fluxograma da Figura 127 como referência para a discussão que segue. Nesse fluxograma, a solução do sistema linear da pressão é representada pelo bloco TDMA. A cada novo loop da velocidade, o sistema linear da pressão é resolvido consumindo um determinado número de iterações. Após a solução desse sistema, as componentes da velocidade ( $u$  e  $v$ ) são recalculadas com os novos valores da pressão (bloco “Correção de  $u$  e  $v$ ” no fluxograma). Devido à não-linearidade dos termos advectivos das equações de Navier-Stokes, após o cálculo dos novos valores de  $u$  e  $v$ , deve-se atualizar os coeficientes dessas componentes da velocidade. Esses coeficientes, por sua vez, ingressam no cálculo de  $\hat{u}$  e  $\hat{v}$ , os quais fazem parte do termo fonte da pressão. E, portanto, um novo sistema linear da pressão deve ser resolvido nessa nova iteração da velocidade. Este procedimento deixa claro que não compensa investir um grande esforço computacional na solução do sistema linear da pressão quando os coeficientes de  $u$  e  $v$  ainda não são os corretos, lembrando que a solução deste sistema consiste em uma das etapas mais onerosas computacionalmente de toda a solução do problema.

Uma das implicações ao se optar por fixar um número máximo de iterações na solução do sistema linear é o aumento do número de iterações para a solução do campo de velocidade (representada por “Loop das velocidades” na Figura 127), uma vez que o campo de pressão não estará convergido e essa variável é empregada na correção das componentes da velocidade. Ao longo da simulação, porém, o número de iterações da velocidade diminui e a combinação desse número de iterações com as poucas iterações do sistema linear resulta num ganho expressivo de tempo computacional. Esse ganho é ilustrado

na Tabela 7-5, para a simulação do efeito Jamin considerando-se uma diferença de pressão no canal de 300 Pa e 1500 passos de tempo, num canal com 1,4184 mm de comprimento, empregando uma malha de 160 x 20 volumes. Limitou-se o número de iterações do sistema linear a **dez**.



**Figura 127.** Fluxograma da solução do problema serial.

**Tabela 7-5.** Tempo consumido pelas simulações adotando-se um número máximo de iterações do sistema linear.

Caso	Tempo consumido (s)
Padrão (sem limitação ao número de iterações do sistema linear)	1891,37
Limitando-se a 10 o número de iterações do sistema linear	690,90

Nas simulações em paralelo também foi observado um ganho em termos de tempo computacional sem prejuízo à solução quando o número de iterações do sistema linear era limitado a dez.

Efetuiu-se ainda um estudo de sensibilidade do fator de speed-up em relação ao número máximo de ciclos de paralelização (Figura 70), determinando-se que este número de ciclos ótimo é igual a dez.

Além disso, em um estudo do desempenho das simulações em paralelo do efeito Jamin, observou-se que, quando o domínio era dividido em trinta e duas partições uniformes na configuração de duas linhas e 16 colunas, o fator de speed-up era máximo.

Apenas para citar um exemplo do tempo de computação, a simulação com uma malha com 800 x 20 volumes e uma diferença de 120 Pa aplicada ao canal consumiu aproximadamente 14800 s na solução de 50 mil passos de tempo do escoamento, empregando-se 32 processadores.

### 7.3. CONCLUSÕES

Neste capítulo foram aplicados alguns dos métodos de descrição de parâmetros da interface na modelagem de um problema importante para a engenharia de reservatórios de petróleo: o efeito Jamin. A este efeito é atribuída a existência de parte do óleo residual nos reservatórios de petróleo molháveis a água após a injeção deste fluido.

Uma peculiaridade deste trabalho é a modelagem de tal efeito empregando-se o método dos volumes finitos, em vez de um método desenvolvido para descrever escoamentos em meso-escala. A utilização do método de volumes finitos na solução desse escoamento traz uma dificuldade adicional ao problema: a descrição dos ângulos de contato. Uma vez que neste método as interações moleculares não são consideradas, o ângulo entre os fluidos e uma superfície sólida não surge naturalmente da solução do problema e, portanto, devem ser considerados modelos para descrever essa variável.

A dinâmica do efeito Jamin pode ser dividida em dois problemas de modelagem praticamente independentes: a modelagem da deformação da gota antes de sua liberação e a modelagem do seu transporte pelo fluido injetado. Enquanto que a modelagem da deformação da gota depende dos ângulos de contato críticos, a modelagem de seu transporte depende dos ângulos de contato dinâmicos, descritos por modelos em que os ângulos variam com a velocidade da gota. A transição entre esses dois regimes de escoamento compreendeu os principais desafios da modelagem desse efeito. Um desses desafios foi o estabelecimento de um modelo que permitisse a variação do ângulo de contato até seu valor crítico com a gota ainda presa.

Essas particularidades da modelagem deste tipo de escoamento não são contempladas, por exemplo, pelo *software* comercial ANSYS CFX<sup>®</sup>. A simulação do efeito Jamin nesse *software* resulta no transporte da gota já nos primeiros passos de tempo, sem a deformação dos seus ângulos de contato e, portanto, impede a determinação da diferença de pressão crítica necessária para desprendê-la.

Após o estabelecimento dos modelos necessários para efetuar a transição dos regimes, dos modelos de ângulos de contato dinâmicos e de uma configuração padrão de simulação, as diversas simulações realizadas permitiram que algumas conclusões quanto à dinâmica do efeito Jamin em um canal bidimensional fossem extraídas da análise dos resultados transientes. Tal análise desempenhou papel fundamental na melhor compreensão da dinâmica do escoamento durante a ocorrência do efeito Jamin, permitindo verificar como a diferença de pressão na gota se comportava nos momentos que precediam a sua liberação.

Concluiu-se que há uma relação linear entre a velocidade terminal da gota e a diferença de pressão aplicada aos extremos do canal, conclusão esta ratificada pela velocidade obtida do balanço de forças em um volume de controle envolvendo todo o canal. Entretanto, essa conclusão deve ser considerada com cautela, pois pode não ser válida quando outros modelos de ângulos de contato dinâmicos são empregados.

Em particular para a situação simulada, envolvendo o escoamento de óleo e água em um canal de PDMS com as dimensões mencionadas ao longo do texto, constatou-se que a diferença de pressão crítica aplicada aos extremos do canal está situada entre 103 e 106 Pa. Já a equação (2.53), que considera que as pressões no canal são uniformes no instante da liberação da gota, prevê que a gota será liberada quando uma

diferença de 173,61 Pa for aplicada ao canal. Este valor é 63,8% maior do que o obtido no conjunto de simulações com a malha mais fina (3200 x 80 volumes). Tal diferença é atribuída ao fato de a equação (2.53) não contemplar os efeitos dinâmicos, nem ser capaz de prever a inversão do gradiente de pressão no canal e na gota. A inversão do gradiente de pressão possibilita o desprendimento da gota quando uma diferença de pressão menor do que a capilar crítica é aplicada ao canal.

Verificou-se ainda que a diferença de pressão crítica no canal é quase insensível ao tamanho da malha, porém, parece depender do passo de tempo. Por outro lado, quanto mais fina a malha, menor a velocidade terminal da gota, se distanciando mais da velocidade prevista pelo balanço de forças da equação (7.10). Este desvio da solução simplificada com o refino da malha reforçou a conclusão de que este tipo de escoamento não pode ser aproximado por um escoamento de Poiseuille.

Como foi mostrado pelos resultados do campo de velocidade e pelas linhas de corrente do escoamento, a interface introduz não-linearidades ao escoamento. Ou seja, o escoamento da gota altera a dinâmica do escoamento de óleo nas adjacências dela. A principal implicação deste acoplamento é uma maior perda de carga na região das calotas da gota, que não havia sido contemplada pela equação (7.10). Constatou-se ainda que, para pequenos valores da diferença de pressão aplicada ao canal, os efeitos capilares são mais significativos e não devem ser desprezados.

Na simulação da gota desacelerando foram observadas oscilações nos ângulos de contato e na velocidade média da gota. Essas mesmas oscilações já haviam sido observadas na situação em que a  $\Delta P$  aplicada ao canal não era suficiente para desprender a gota. Esse comportamento pode ser explicado com base nos resultados transientes, os quais mostram a variação do gradiente de pressão ao longo do canal com o tempo.

Por fim, foi proposto um modelo de balanço de forças no canal baseado na literatura sobre escoamento do tipo *slug* para a determinação da velocidade terminal da gota. Este novo modelo contempla a perda de carga na região das calotas da gota. Concluiu-se que esse modelo pode ser aplicado ao escoamento mais complexo aqui estudado, em que não há a formação de um filme sob a gota. Sugere-se que nessa expressão seja adotada uma constante de proporcionalidade ( $C_{calota}$ ) igual a **9**. Adaptando-se esse balanço de forças de forma a contemplar o regime transiente, concluiu-se que o modelo reproduz satisfatoriamente o

comportamento transiente da velocidade média da gota. Portanto, esse modelo consiste em uma forma simples e rápida para estimar a evolução da velocidade média da gota com o tempo, além de ser capaz de fornecer sua velocidade terminal.

Portanto, com base em todos os resultados apresentados neste capítulo, concluiu-se que a equação (2.53) é capaz de prever, com um erro pequeno, o valor da diferença de pressão crítica na **gota**, embora não considere os efeitos dinâmicos. Entretanto, existem nuances do fenômeno que essa equação não consegue prever, sendo a principal delas a inversão do gradiente de pressão. Devido a essa inversão, conseguiu-se desprender a gota nas simulações em que uma diferença de pressão um pouco superior a 106 Pa foi aplicada aos extremos do canal. Pela equação (2.53), previu-se que seria necessária uma diferença de pressão no canal superior a 173,61 Pa para liberar a gota. Esse resultado ratifica a importância de se considerar os efeitos dinâmicos na previsão da diferença de pressão crítica no canal.



## 8. CONCLUSÕES E CONTRIBUIÇÕES

Nesta tese foi estudada a modelagem de parâmetros da interface em escoamentos bidimensionais bifásicos em que os efeitos interfaciais eram pronunciados. Tais escoamentos ocorrem geralmente quando o coeficiente de tensão interfacial é alto ou quando as dimensões do domínio são pequenas.

Em um escoamento bifásico, os efeitos da tensão interfacial só podem ser corretamente modelados se a posição da interface for conhecida. Isso significa que se algum método que resulte numa interface difusa for empregado, a ação da tensão interfacial será espalhada por toda essa região difusa, provocando o surgimento de correntes espúrias. Por este motivo, um dos tópicos estudados neste trabalho foram métodos capazes de reproduzir uma interface bem definida. Dentre os métodos revisados, optou-se pelo método *Volume of fluid* (VOF) por este método restringir a interface a um único volume de controle, conservar a massa dos fluidos e por ser um método compatível com o método dos Volumes Finitos, empregado na discretização das equações de conservação.

O método VOF foi implementado em um código próprio em Fortran 77 e seus resultados foram validados pela simulação de uma série de escoamentos bifásicos. Nesta tese foram apresentados três desses escoamentos e seus resultados: o rompimento de uma barragem com e sem obstáculo ao escoamento da água e a instabilidade de Rayleigh-Taylor. Todos os resultados mostraram boa concordância com aqueles publicados na literatura e obtidos em código comercial.

Conhecida a posição e a forma da interface, os efeitos interfaciais podem ser contemplados numericamente pelas equações de conservação da quantidade de movimento linear por meio de uma força de corpo. Essa força é o produto entre o coeficiente de tensão interfacial ( $\sigma$ ), a curvatura da interface ( $\kappa$ ), o vetor unitário normal a ela ( $\hat{n}$ ) e o delta de Dirac ( $\delta$ ). Logo, para uma correta modelagem dos efeitos interfaciais, é necessário que os três últimos parâmetros sejam modelados adequadamente.

Esta tese se reteve a estudar três modelos que descrevem a curvatura da interface: o método das Funções Altura (*Height Function* – HF), a técnica da Convolução e o método HF com filtro por convolução (HF-fc). Este último modelo foi apresentado por Francois et al. (2006) como um esquema de interpolação da curvatura calculada pelo método HF para as faces dos volumes de controle.

O desempenho desses três métodos foi avaliado por meio da simulação do clássico caso da gota estática e da bolha ascendente. No primeiro teste, após um único passo de tempo constatou-se que os erros da velocidade e da curvatura apresentavam tendência de primeira ordem quando a técnica da convolução era empregada e de segunda ordem para os outros dois modelos. Contudo, verificou-se que, a partir do quarto nível de refino (malhas com 160 x 160 volumes), os erros obtidos pelo método HF aumentavam com a resolução da malha. Constatou-se que esse crescimento do erro e a geração de correntes espúrias estão associados a uma anisotropia local do campo de curvatura, resultante da aproximação adotada para essa variável quando os limites da malha não são satisfeitos por ela. Não foi encontrada referência a esse problema na literatura consultada ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

Essa constatação motivou a proposição do método HF2, que consiste na adoção de duas modificações do método HF original: um cálculo mais adequado da curvatura da interface em volumes que não satisfazem os limites da malha e a aplicação de um filtro no campo de curvatura, que inclui na estimativa dessa variável a influência dos volumes vizinhos.

Entretanto, apesar de o novo método apresentar um desempenho satisfatório após um passo de tempo, quando a simulação foi executada por um tempo mais longo, observou-se que as correntes espúrias geradas pelo método HF2 são amplificadas e depois estabilizam. Já no método HF original, as correntes foram amortecidas ao longo de todo o tempo, compreendendo o comportamento desejável em uma simulação que considera efeitos interfaciais.

A amplificação dessas correntes também foi observada quando do emprego da técnica da convolução e do método HF-fc, indicando que há uma relação entre a amplificação de velocidades espúrias e a aplicação de filtros ao campo de curvatura.

Esta segunda constatação levou à proposição de um novo método em que a atuação do filtro é restringida no tempo: o método HF-fc modificado. Como pode ser visto dos resultados tanto para a gota estática quanto para a bolha ascendente, a limitação da ação do filtro no campo de curvatura conduziu a um maior amortecimento das correntes espúrias e não implicou a deformação não-física da interface, ao contrário da técnica da convolução e do método HF-fc. Entretanto, frente ao método HF, o método HF-fc modificado apresenta uma desvantagem: o maior tempo computacional despendido nas simulações, que é um fator crucial quando são simulados problemas com pequenas

escalas. Por este motivo, apesar dos bons resultados do método HF-fc modificado nesses dois testes e na simulação da propagação de uma onda capilar, prosseguiu-se o trabalho empregando-se o método HF na determinação da curvatura da interface.

Tendo em vista que as técnicas de modelagem de parâmetros da interface aqui estudadas seriam aplicadas à simulação do efeito Jamin, foi empreendido um estudo da modelagem da curvatura da interface em volumes vizinhos a superfícies sólidas. Identificou-se então que o método HF poderia ser adaptado para tal avaliação em função do ângulo de contato formado entre a interface dos fluidos e a parede.

Esta adaptação foi implementada no código computacional e sua performance foi avaliada novamente no caso da gota estática (adaptado para esta nova situação) e na simulação de uma gota em desequilíbrio, onde há o espalhamento ou contração de uma gota devido à imposição de um novo valor do ângulo de contato.

No teste da gota estática, após um passo de tempo foi verificado que o erro da curvatura para alguns valores do ângulo de contato aumentavam com o refino da malha. Novamente constatou-se que esse aumento do erro estava relacionado ao desrespeito aos limites da malha pela função altura quando um estêncil perpendicular à parede é empregado. Propôs-se então uma modificação no algoritmo, permitindo que, caso haja esse desrespeito, um estêncil paralelo à parede seja adotado, desde que a função altura obtida nesse novo estêncil satisfaça os limites.

Este novo algoritmo resultou em erros decrescentes com o refino da malha para ângulos de contato iguais a  $30^\circ$  e  $45^\circ$ . Observou-se também que este algoritmo obteve um melhor desempenho que o algoritmo anterior quando o amortecimento das correntes espúrias foi analisado.

Para se obter uma boa resolução da interface é necessário o emprego de malhas finas. Tendo isto em vista e considerando as limitações ao passo de tempo máximo impostas pelos métodos VOF e CSF, foi imprescindível paralelizar o código computacional implementado ao longo desta tese. Para cumprir este objetivo, utilizou-se a biblioteca MPI (*Message Passing Interface*), que permite a execução de um único programa em múltiplos processadores seguindo a filosofia *Single Program Multiple Data* (SPMD).

Elaborou-se então um algoritmo de solução em paralelo do escoamento utilizando o método PRIME para tratar o acoplamento pressão-velocidade. De forma a contemplar tal algoritmo, o código

computacional foi reescrito e os comandos para comunicação entre os processadores pela MPI foram inseridos. Essa tarefa e a validação dos resultados desse novo código consumiram alguns meses de trabalho. Ao final desse processo, com o aperfeiçoamento de algumas etapas do algoritmo de paralelização, obteve-se um desempenho satisfatório do novo código, como pode ser concluído dos resultados apresentados no capítulo 6. Como durante o desenvolvimento desta tese não foi encontrado um trabalho que apresente em detalhes um algoritmo para a solução em paralelo de um escoamento bifásico, com efeitos interfaciais pronunciados e em que a posição da interface é mapeada pelo método VOF, credita-se a esta tese também esta contribuição (a apresentação de um algoritmo de paralelização).

Tendo estudado e implementado o mapeamento da interface, modelos de determinação da curvatura (em situações com e sem contato da interface com paredes) e a paralelização do algoritmo de solução do escoamento, finalizou-se o trabalho desenvolvido ao longo desse doutorado com a aplicação de toda essa metodologia à simulação de um fenômeno presente em escoamentos em micro-canais e poros: o efeito Jamin.

Para simular este efeito, propôs-se um modelo capaz de descrever as duas etapas a que este fenômeno está sujeito: o escoamento dos fluidos antes do desprendimento da gota e o transporte da gota pelo fluido carreador. A principal implicação dessas etapas é a determinação dos ângulos de contato: enquanto que antes do desprendimento da gota esses ângulos são estáticos, após a sua liberação os ângulos passam a ser dinâmicos e seu comportamento depende da velocidade de deslocamento da gota.

Simulações para diferentes valores da diferença de pressão no canal foram então realizadas empregando o modelo numérico proposto, visando à determinação do valor crítico da  $\Delta P$  aplicada aos extremos do canal, acima do qual a gota é desprendida. Dos resultados transientes dessas simulações, pode-se observar a dinâmica do fenômeno. Para valores de  $\Delta P$  abaixo de um valor crítico, a gota apresentou oscilações. Essas oscilações são amortecidas ao longo do tempo. Já para valores acima dessa diferença de pressão crítica, quando os ângulos de contato atingem seus valores críticos, as linhas de contato são liberadas e a gota é transportada pelo fluido injetado. O desprendimento da gota pode ocorrer tanto no período em que o fluido em seu interior está sendo acelerado, como quando ele está sendo desacelerado. E, após percorrer uma determinada distância ao longo do canal, a gota atinge sua

velocidade terminal. Foi constatado para o caso simulado que essa velocidade varia linearmente com a diferença de pressão aplicada aos extremos do canal. Entretanto, essa constatação deve ser considerada com cautela, pois pode não ser válida para outros modelos que descrevem os ângulos de contato dinâmicos.

Os resultados transientes permitiram concluir que a desaceleração da gota contribui para o seu desprendimento, fazendo com que seja necessário um valor da diferença de pressão na gota menor do que o previsto pela equação (2.53), que despreza efeitos dinâmicos. Já quando a gota é desprendida no período de aceleração do fluido em seu interior, essa equação subdimensiona o valor da diferença de pressão na gota, uma vez que nem os efeitos da aceleração do fluido, nem os efeitos viscosos são contemplados por ela.

Concluiu-se também que, por não contemplar os efeitos dinâmicos nem ser capaz de prever a inversão do gradiente de pressão na gota e no canal, a equação (2.53) superestima o valor da diferença de pressão crítica que deve ser aplicada ao canal: enquanto que nas simulações obteve-se um valor deste parâmetro igual a 106 Pa, essa equação previu que seria necessária uma diferença de pressão no canal superior a 173,61 Pa para desprender a gota.

A visualização das linhas de corrente para um referencial na gota mostrou o grande afastamento que o escoamento apresenta em relação ao previsto por Poiseuille nas proximidades das interfaces. Esses resultados já eram visíveis no campo das componentes da velocidade. Na literatura, que reporta esse mesmo comportamento para escoamentos do tipo *slug*, esse afastamento do escoamento em relação ao de Poiseuille é tratado por meio da introdução de uma perda de carga localizada no balanço de forças no canal.

Tendo em vista esse desvio da solução de Poiseuille, propôs-se um novo modelo de balanço de forças baseado na literatura sobre escoamentos do tipo *slug*. Ressalta-se que há uma diferença fundamental entre esse escoamento e o escoamento aqui estudado: para o efeito Jamin ocorrer não deve existir um filme do fluido injetado envolvendo a gota; já no escoamento do tipo *slug*, a gota é envolta por um filme. A partir desse modelo, é possível estimar o valor da velocidade terminal da gota e a evolução de sua velocidade média com o tempo. Trata-se de uma alternativa rápida e simples às simulações numéricas desse tipo de escoamento, que podem consumir horas.

No modelo proposto, a força devido à diferença de pressão é contrabalanceada pela força de adesão e pelos efeitos viscosos em

ambos os fluidos e nas calotas da gota. Estes últimos são mais pronunciados quanto mais curto o canal. Na expressão para a força viscosa nas calotas, há uma constante de proporcionalidade ( $C_{calota}$ ), cujo valor nesta tese foi determinado empregando-se como referência a solução para a malha com 3200 x 80 volumes.

Constatou-se que, quanto menor o valor da diferença de pressão aplicada ao canal, mais pronunciados proporcionalmente são os efeitos adesivos das interfaces. Contudo, com o aumento da velocidade da gota, os efeitos viscosos passam a dominar. Dentre esses efeitos, o mais significativo é o imposto pela perda de carga no fluido injetado, sendo seguido pela dissipação nas calotas da gota.

Por fim, simulou-se um caso mais completo em que, após a gota ter atingido a sua velocidade terminal, é imposta também à entrada do canal uma pressão nula. Assim, a gota desacelera até parar e ser presa às paredes do canal.

A partir do momento em que as linhas de contato são fixadas novamente à superfície, a gota começa a oscilar, reproduzindo a mesma situação observada quando a gota não era desprendida do canal. E assim como naquele caso, as oscilações também são amortecidas com o tempo.

De todos esses resultados para o efeito Jamin, pode-se concluir que a metodologia e o modelo empregados na simulação desse fenômeno conseguiram descrevê-lo satisfatoriamente, prevendo todas as suas nuances, principalmente durante o transiente do escoamento. A análise dos resultados transientes permitiu uma melhor compreensão da dinâmica do escoamento em três situações: quando a gota, apesar de sujeita a uma diferença de pressão, permanece presa às paredes do canal; quando a gota é liberada no período em que o fluido em seu interior é desacelerado e quando de seu desprendimento durante a aceleração do fluido que a compõe.

## 8.1. CONTRIBUIÇÕES

Em resumo, pode-se atribuir a essa tese as seguintes contribuições:

1. Desenvolvimento e implementação de um código próprio capaz de simular escoamentos bidimensionais bifásicos com uma interface bem definida. Esse código apresenta ainda a versatilidade de poder ser executado em um cluster de processadores, propiciando a sua adoção no desenvolvimento de trabalhos futuros;

2. A identificação da relação entre a anisotropia local do campo de curvatura e a geração de correntes espúrias com o refino de malha no método HF;
3. A proposição de um modelo que corrige os efeitos dessa anisotropia a partir de um melhor cálculo da curvatura da interface em volumes em que a função altura não respeita os limites da malha;
4. A proposição de um modelo que atenua a geração de correntes espúrias e as amortece ao longo do tempo quando modelos envolvendo a operação de convolução são empregados;
5. A proposição de modificação no método HF para o cálculo da curvatura a partir de ângulos de contato. Essa modificação do algoritmo resultou em menores erros com o refino da malha para alguns valores do ângulo de contato e num maior amortecimento das correntes espúrias;
6. A proposição de um algoritmo de paralelização para a solução de escoamentos que empregam o método PRIME no tratamento do problema do acoplamento pressão-velocidade em escoamentos com a presença de uma interface;
7. A proposição de uma metodologia e de um modelo numérico para a simulação do efeito Jamin. Esse modelo contempla uma aproximação para a evolução dos ângulos estáticos e para o momento em que as linhas de contato são liberadas;
8. A proposição de um modelo baseado no balanço de forças no canal, que permite a estimativa da velocidade terminal da gota e da evolução da velocidade média da gota com o tempo;
9. A validação da equação (2.53) a partir dos resultados das simulações numéricas quando a diferença de pressão na **gota** está sendo avaliada;
10. A comprovação de que os efeitos dinâmicos devem ser considerados e que a equação (2.53) superestima o valor da diferença de pressão crítica no **canal**.

## 8.2. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

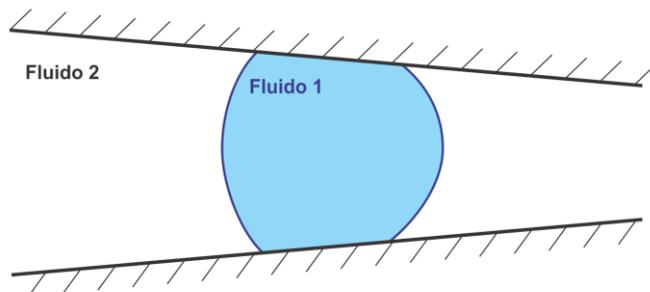
Esta tese abordou apenas escoamentos **bidimensionais** bifásicos em que as forças capilares eram significativas. De forma a estender as modificações dos modelos e o algoritmo de paralelização aqui

propostos, sugere-se o desenvolvimento de trabalhos que estudem a modelagem de parâmetros da interface em escoamentos tridimensionais. Neste caso, um algoritmo mais complexo para o mapeamento da interface deverá ser implementado (AFKHAMI; BUSSMANN, 2008).

Outra questão pertinente de ser estudada é o tratamento semi-implícito da força devido à tensão interfacial. Este tipo de tratamento evita a limitação do tamanho do passo de tempo imposta pelo método CSF, permitindo que sejam adotados passos de tempo maiores (RAESSI; BUSSMANN; MOSTAGHIMI, 2009).

Uma vez que a simulação do efeito Jamin pelo método dos Volumes Finitos consumiu muito tempo, sugere-se que esse fenômeno seja simulado por outro método mais eficiente computacionalmente como, por exemplo, o método de Lattice-Boltzmann.

Por fim, sugere-se que em trabalho futuro seja simulado o efeito Jamin em um canal convergente, como o ilustrado na Figura 128. Nesta situação, o efeito Jamin se manifesta de duas formas: pela alteração dos ângulos de contato e pela variação da seção transversal do canal.



**Figura 128.** Efeito Jamin em um canal convergente.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AFKHAMI, S.; ZALESKI, S.; BUSSMANN, M. A mesh-dependent model for applying dynamic contact angles to VOF simulations. **Journal of Computational Physics**, v. 228, p. 5370-5389, 2009.
- AFKHAMI, S.; BUSSMANN, M. Height functions for applying contact angles to 2D VOF simulations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 57, n. 4, p. 453-472, 2007.
- AFKHAMI, S.; BUSSMANN, M. Height functions for applying contact angles to 3D VOF simulations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 61, n. 8, p. 827-847, 2008.
- ANAGNOSTOPOULOS, J.; BERGELES, G. Three-Dimensional Modeling of the Flow and the Interface Surface in a Continuous Casting Mold Model. **Metallurgical and Materials Transactions B**, v. 30, n. 6, p. 1095-1105, 1999.
- ANL – Argonne National Laboratory. **MPICH2**. Disponível em: <<http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpich2>>. Acesso em: 27 de abril de 2010.
- BARNEY, B. **Message Passing Interface (MPI)**. Disponível em: <<http://computing.llnl.gov/tutorials/mpi/>>. Acesso em: 13 de abril de 2010.
- BAROUD, C.; GALLAIRE, F.; DANGLA, R. Dynamics of microfluidic droplets. **Lab on a Chip**, v. 10, p. 2032-2045, 2010.
- BEJAN, A. **Convection Heat Transfer**. 3ª Edição. New Jersey: John Wiley & Sons, 2004, 728 p.
- BICO, J.; QUÉRÉ, D. Falling Slugs. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 243, p. 262-264, 2001.
- BJORNDALLEN, N.; ALVAREZ, J.; JOSSY, W.; KURU, E. An Experimental Study of the Pore Blocking Mechanisms of Aphron Drilling Fluids using Micromodels. **2009 SPE International**

**Symposium on Oilfield Chemistry**, The Woodlands, Estados Unidos: 2009.

BOUKELLAL, H.; SELIMOVIC, S.; JIA, Y.; CRISTOBAL, G.; FRADEN, S. Simple, robust storage of drops and fluids in a microfluidic device. **Lab on a Chip**, v. 9, p. 331-338, 2009.

BRACKBILL, J.; KOTHE, D.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, v. 100, n. 2, p. 335-354, 1992.

CHANDRASEKHAR, S. **Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability**. Nova Iorque: Dover Publications, Inc., 1981, 652 p.

COLLINS, R. A simple model of the plane gas bubble in a finite liquid. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 22, n. 4, p. 763-771, 1965.

CRUCHAGA, M. A.; CELENTANO, D. J.; TEZDUYAR, T. E. Collapse of a liquid column: numerical simulation and experimental validation. **Computational Mechanics**, v. 39, n.4, p. 453-476, 2007.

CUMMINS, S.; FRANCOIS, M.; KOTHE, D. Estimating curvature from volume fractions. **Computers and Structures**, v. 83, n. 6-7, p. 425-434, 2005.

DANDEKAR, A.; PATIL, S.; KHATANIAR, S. **Characterization and Alteration of Wettability States of Alaskan Reservoirs to Improve Oil Recovery Efficiency**. United States Department of Energy, National Energy Technology Laboratory: Final Report. Novembro, 2008.

DE GENNES, P. Wetting: statics and dynamics. **Reviews of Modern Physics**, v. 57, n. 3, p. 827-863, 1985.

EBATCO – Exponential Business and Technologies Company. Disponível em <<http://www.ebatco.com>>. Acesso em: 24 de fevereiro de 2012.

EGGERS, J. Nonlinear dynamics and breakup of free-surface flows. **Reviews of Modern Physics**, v. 69, n. 3, p. 865-929, 1997.

ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A. Eulerian two-phase flow theory applied to fluidization. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 22, Suppl. 1, p. 21-66, 1996.

FERDOWSI, P.; BUSSMANN, M. Second-order accurate normals from height functions. **Journal of Computational Physics**, v. 227, n. 22, p. 9293-9302, 2008.

FERZIGER, J.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. Nova Iorque: Springer-Verlag, 2002. 3ª Edição, 423 p.

FRANCOIS, M.; CUMMINS, S.; DENDY, E.; KOTHE, D.; SICILIAN, J.; WILLIAMS, M. A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. **Journal of Computational Physics**, v. 213, n. 1, p. 141-173, 2006.

FUERSTMAN, M.; LAI, A.; THURLOW, M.; SHEVKOPLYAS, S.; STONE, H.; WHITESIDES, G. The pressure drop along a rectangular microchannels containing bubbles. **Lab on a Chip**, v. 7, p. 1479-1489, 2007.

GARDESCU, I. Behavior of Gas Bubbles in Capillary Spaces. **Transactions of the AIME**, v. 86, n. 1, p. 351-370, 1930.

GINZBURG, I.; WITTUM, G. Two-phase flows on interface refined grids modeled with VOF, staggered finite volumes, and spline interpolants. **Journal of Computational Physics**, v. 166, n. 2, p. 302-335, 2001.

GLITZ, K.; SILVA, A.; MALISKA, C.; BORGES, R.; SOPRANO, A.; VALE, B. Modeling the Interface Dynamics in Continuous Casting Molds employing ANSYS CFX®. **Proceedings of 3<sup>rd</sup> International Conference – Simulation and Modelling of Metallurgical Processes in Steelmaking – STEELSIM 2009**, Leoben, Áustria: 2009.

GLITZ, K.; SILVA, A.; MALISKA, C. Avaliação de Modelos de Estimativa da Curvatura em Simulações Numéricas de Escoamentos Multifásicos. **XXXI Iberian-Latin-American Congress on**

**Computational Methods in Engineering – CILAMCE**, Buenos Aires, Argentina: 15-18 Novembro, 2010.

GLITZ, K.; SILVA, A.; DONATTI, C.; MALISKA, C. Parallel Computing Simulation of Multiphase Flows employing the VOF Method. **Proceedings of ENCIT 2010 – 13<sup>th</sup> Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**, Uberlândia: 2010.

GLITZ, K.; SILVA, A.; MALISKA, C. Modelagem numérica da curvatura da interface em escoamentos multifásicos. **CIBEM10 – X Congresso Ibero-americano em Engenharia Mecânica**, Porto, Portugal: 2011.

GLITZ, K.; SILVA, A.; MALISKA, C. Simulação numérica do efeito Jamin e do escoamento do tipo *dry-plug* a partir da modelagem de parâmetros da interface entre fluidos. Artigo submetido ao **Boletim Técnico da Produção de Petróleo**, 2012.

GUEYFFIER, D.; LI, J.; NADIM, A.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Volume-of-Fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. **Journal of Computational Physics**, v. 152, n. 2, p. 423-456, 1999.

HARLOW, F.; WELCH, J. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. **The Physics of Fluids**, v. 8, n. 12, p. 2182-2189, 1965.

HARVIE, D.; DAVIDSON, M.; RUDMAN, M. An analysis of parasitic current generation in Volume of Fluid simulations. **Applied Mathematical Modelling**, v. 30, n. 10, p. 1056-1066, 2006.

HERNÁNDEZ, J.; LÓPEZ, J.; GÓMEZ, P.; ZANZI, C.; FAURA, F. A new volume of fluid method in three dimensions – Part I: Multidimensional advection method with face-matched flux polyhedra. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 58, n. 8, p. 897-921, 2008.

HIRT, C.; NICHOLS, B. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 39, n. 1, p. 201-225, 1981.

HIRT, C. Direct Computation of Dynamic Contact Angles and Contact Lines. **ECC99 Coating Conference**. Erlangen: FSI-99-00-2, 1999.

HIRT, C.; BRETHOUR, J. Moving Contact Lines on Rough Surfaces. **4<sup>th</sup> European Coating Symposium**. Bruxelles: Outubro, 2001.

HODGES, S.; JENSEN, O.; RALLISON, J. The motion of a viscous drop through a cylindrical tube. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 501, p. 279-301, 2004.

HOFFMAN, R. A Study of the Advancing Interface: I. Interface Shape in Liquid-Gas Systems. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 50, n. 2, p. 228-241, 1975.

ISENBERG, C. **The science of soap films and soap bubbles**. Nova Torque: Dover Publications, 1992. 220 p.

JIANG, T.; OH, S.; SLATTERY, J. Correlation for Dynamic Contact Angle. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 69, n. 1, p. 74-77, 1979.

KIM, H.; LEE, H.; KANG, B. Sliding of Liquid Drops Down an Inclined Solid Surface. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 247, p. 372-380, 2002.

KORENCHENKO, A.; BESKACHKO, V. Numerical simulation of oscillations of a drop, bounded by two rigid planes. **Measurement Science and Technology**, v. 18, p. 3359-3364, 2007.

KOTHE, D.; MJOLSNESS, R. RIPPLE: A New Model for Incompressible Flows with Free Surfaces. **AIAA Journal**, v. 30, n. 11, p. 2694-2700, 1992.

KOTHE, D.; RIDER, W. Comments on Modeling Interfacial Flows with Volume-of-Fluid Methods. **Technical Report LA-UR-94-3384**, Los Alamos National Laboratory, 1994.

KOTHE, D.; RIDER, W.; MOSSO, S.; BROCK, J.; HOCHSTEIN, J. Volume Tracking of Interfaces Having Surface Tension in Two and

Three Dimensions. **Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 34<sup>th</sup>**.  
Reno: AIAA 96-0859, 1996.

KURUP, G.; BASU, A. Field-free particle focusing in microfluidic plugs. **Biomicrofluidics**, v. 6, n. 022008, p.1-10, 2012.

LAFaurie, B.; NARDONE, C.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. Modelling Merging and Fragmentation in Multiphase Flows with SURFER. **Journal of Computational Physics**, v. 113, n. 1, p. 134-147, 1994.

LEE, C.; LEE, S. Pressure drop of two-phase dry-plug flow in round mini-channels: Effect of moving contact line. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 34, p. 1-9, 2010.

LI, Y. Oil Recovery by Low Salinity Water Injection into a Reservoir: A New Study of Tertiary Oil Recovery Mechanism. **Transport in Porous Media**, v. 90, n. 2, p. 333-362, 2011.

LIJUAN, Z.; XIANG'AN, Y.; FENQIAO, G. Micro-mechanisms of residual oil mobilization by viscoelastic fluids. **Petroleum Science**, v. 5, n. 1, p. 56-61, 2008.

LÓPEZ, J.; ZANZI, C.; GÓMEZ, P.; ZAMORA, R.; FAURA, F.; HERNÁNDEZ, J. An improved height function technique for computing interface curvature from volume fractions. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 198, n. 33-36, p. 2555-2564, 2009.

MALIK, M.; BUSSMANN, M. Volume Tracking on Adaptively Refined Grids with Curvature Based Refinement. **Proceedings of CSME Forum**. Londres: p. 1-10, 2004.

MALIK, M.; FAN, E.; BUSSMANN, M. Adaptive VOF with curvature-based refinement. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 55, n. 7, p. 693-712, 2007.

MALISKA, C. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2ª Edição. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2004, 453 p.

MARONNIER, V.; PICASSO, M.; RAPPAZ, J. Numerical Simulation of Three Dimensional Free Surface Flows. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 42, n. 7, p. 697-716, 2003.

MARTI, J.; IDELSOHN, S.; LIMACHE, A.; CALVO, N.; D'ELÍA, J. A fully coupled particle method for quasi-incompressible fluid-hypoeelastic structure interactions. **ENIEF 2006 – XV Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones**. Santa Fe, Argentina: p. 809-827, 2006.

MARTINEZ, J.; CHESNEAU, X.; ZEGHMATI, B. A new curvature technique calculation for surface tension contribution in PLIC-VOF method. **Computational Mechanics**, v. 37, n. 2, p. 182-193, 2006.

MUZAFERIJA, S.; PERIC, M. Computation of free-surface flows using interface-tracking and interface-capturing methods. Em: **Nonlinear Water Wave Interaction**. Southampton: Computational Mechanics Publications, 1998.

NICHITA, B.; ZUN, I.; THOME, J. A VOF method coupled with a dynamic contact angle model for simulation of two-phase flows with partial wetting. **7<sup>th</sup> International Conference on Multiphase Flow – ICMF 2010**, Tampa, Estados Unidos: 2010.

NICHOLS, B. D.; HIRT, C. W. Improved Free Surface Boundary Conditions for Numerical Incompressible-Flow Calculations. **Journal of Computational Physics**, v. 8, p. 434-448, 1971.

PALADINO, Emilio. **Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do tipo Pressão Diferencial**. 2005. 263 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005.

PATANKAR, S. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Series on Computational Methods in Mechanics and Thermal Science**. Estados Unidos: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. 197 p.

PATANKAR, S.; LIU, C.; SPARROW, E. Fully Developed Flow and Heat Transfer in Ducts Having Streamwise-Periodic Variations of Cross-Sectional Area. **Transactions of the ASME**, v. 99, p. 180-186, 1977.

PILLIOD, J.; PUCKETT, E. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. **Journal of Computational Physics**, v. 199, n. 2, p. 465-502, 2004.

PROSPERETTI, A. Motion of two superposed viscous fluids. **Physics of Fluids**, v. 24, n. 7, p. 1217-1223, 1981.

PUCKETT, E.; ALMGREN, A.; BELL, J.; MARCUS, D.; RIDER, W. A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows. **Journal of Computational Physics**, v. 130, n. 2, p. 269-282, 1997.

RAESSI, M.; BUSSMANN, M.; MOSTAGHIMI, J. A semi-implicit finite volume implementation of the CSF method for treating surface tension in interfacial flows. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 59, p. 1093-1110, 2009.

RENARDY, M.; RENARDY, Y.; LI, J. Numerical Simulation of Moving Contact Line Problems Using a Volume-of-Fluid Method. **Journal of Computational Physics**, v. 171, p. 243-263, 2001.

RIDER, W.; KOTHE, D. Reconstructing Volume Tracking. **Journal of Computational Physics**, v. 141, n. 2, p. 112-152, 1998.

ROSA, A.; CARVALHO, R.; XAVIER, J. **Engenharia de Reservatórios de Petróleo**. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2006, 832 p.

ROY, C.; NELSON, C.; SMITH, T.; OBER, C. Verification of Euler/Navier-Stokes codes using the method of manufactured solutions. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 44, p. 599-620, 2004.

ROY, C. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. **Journal of Computational Physics**, v. 205, p. 131-156, 2005.

SALARI, K; KNUPP, P. Code Verification by the Method of Manufactured Solutions. **SANDIA Report**, SAND2000-1444, 2000.

SCHÄFFER, E.; WONG, P. Contact line dynamics near the pinning threshold: A capillary rise and fall experiment. **Physical Review E**, v. 61, n. 5, p. 5257-5277, 2000.

SEEBERGH, J.; BERG, J. Dynamic Wetting in the Low Capillary Number Regime. **Chemical Engineering Science**, v. 47, n. 17/18, p. 4455-4464, 1992.

SHAO, S.; LO, E. Y. M. Incompressible SPH method for simulating Newtonian and non-Newtonian flows with a free surface. **Advances in Water Resources**, v. 26, p. 787-800, 2003.

SUSSMAN, M.; OHTA, M. In: International Series of Numerical Mathematics. **High-order Techniques for Calculating Surface Tension Forces**. Basiléia, Suíça, 2006, v. 154, p. 425-434.

TANNER, L. The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 12, p. 1473-1484, 1979.

TSAY, F.; MENZIE, D. Laboratory study on the use of alkaline flood recovery mechanisms in waterflooded oil reservoirs. **SPE**, 14533-MS, 1985.

UBBINK, O. **Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces**. 1997. 136 f. Tese (Doctor of Philosophy) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Londres, Londres, 1997.

UNVERDI, S.; TRYGGVASON, G. A Front-tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-fluid Flows. **Journal of Computational Physics**, v. 100, n. 1, p. 25-37, 1992.

VAN MOURIK, S. **Numerical modeling of the dynamic contact angle**. Dissertação de mestrado, Departamento de Matemática, Universidade de Groningen. Groningen: 2002.

VAN MOURIK, S.; VELDMAN, A.; DREYER, M. Simulation of Capillary Flow with a Dynamic Contact Angle. **Microgravity Science and Technology**, v. 17, n. 3, p. 87-93, 2005.

VELDMAN, A.; GERRITS, J.; LUPPES, R.; HELDER, J.; VREEBURG, J. The numerical simulation of liquid sloshing on board spacecraft. **Journal of Computational Physics**, v. 224, p. 82-99, 2007.

WANG, Y.; DIMITRAKOPOULOS, P. Low-Reynolds-number droplet motion in a square microfluidic channel. **Theoretical and Computational Fluid Dynamics**, v. 26, p. 361-379, 2012.

WANG, Y.; ZHAO, F.; BAI, B.; ZHANG, J.; XIANG, W.; LI, X.; ZHOU, W. Optimized Surfactant IFT and Polymer Viscosity for Surfactant-Polymer Flooding in Heterogeneous Formations. **2010 SPE Improved Oil Recovery Symposium**, Tulsa, Estados Unidos: 2010.

WEINSTEIN, O.; PISMEN, L. Scale Dependence of Contact Line Computations. **Mathematical Modelling of Natural Phenomena**, v. 3, n. 1, p. 98-107, 2008.

WILLIAMS, M.; KOTHE, D.; PUCKETT, E. Accuracy and convergence of kernel-based continuum surface tension models. **Technical Report LA-UR-98-2268**, Los Alamos National Laboratory, 1998.

WINKELS, K.; WEIJS, J.; EDDI, A.; SNOEIJER, J. Universal Spreading Dynamics of Liquid Drops on Partially Wetting Surfaces. Disponível em:

<<http://stilton.tnw.utwente.nl/people.snoeijer/papers/submitted/winkelsPRL12.pdf>>. Acesso em: 27 de fevereiro de 2012.

WOLF, F. G. **Modelagem da Interação Fluido-sólido para Simulação de Molhabilidade e Capilaridade Usando o Modelo *Lattice-Boltzmann***. 2006. 130 f. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica) –

Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2006.

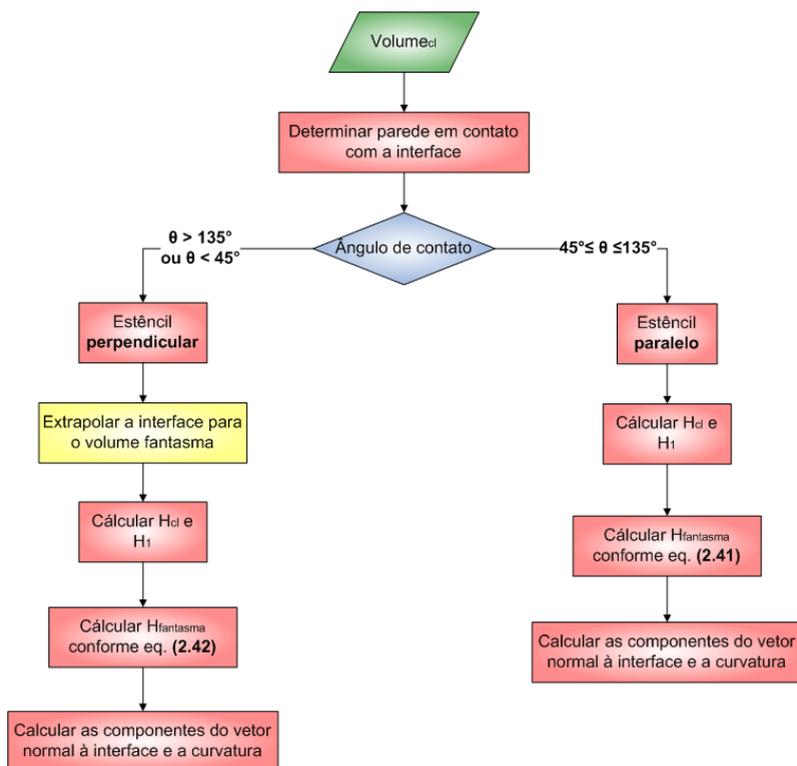
YADAV, P.; BAHADUR, P.; TADMOR, R.; CHAURASIA, K.; LEH, A. Drop Retention Force as a Function of Drop Size. **Langmuir**, v. 24, p. 3181-3184, 2008.

YOKOI, K.; VADILLO, D.; HINCH, J.; HUTCHINGS, I. Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a droplet impacting on a dry surface. **Physics of Fluids**, v. 21, n. 072102, 2009.

## APÊNDICE A

Neste apêndice são ilustrados alguns dos procedimentos empregados na estimativa de parâmetros da interface a partir do ângulo de contato pelo método HF.

Na Figura 129 é mostrado o algoritmo para a determinação das componentes do vetor normal à interface e de sua curvatura para um volume contendo a linha de contato ( $\text{volume}_{cl}$ ), conforme explicado no segundo capítulo.



**Figura 129.** Fluxograma para a determinação da curvatura e das componentes do vetor normal à interface no  $\text{volume}_{cl}$ .

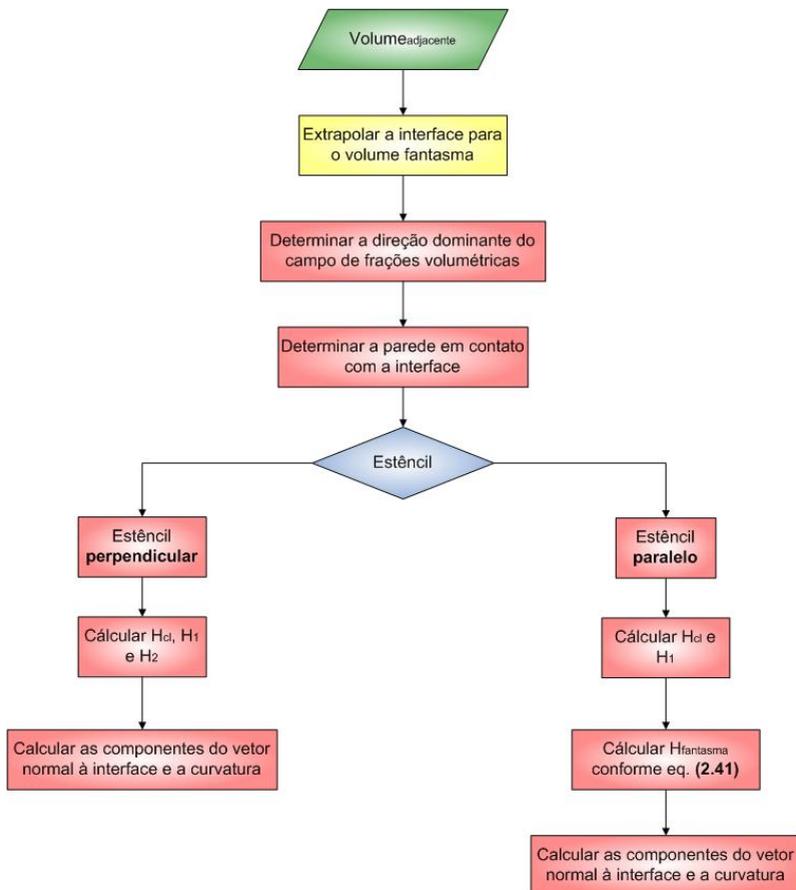
O procedimento de determinação da curvatura e do vetor normal à interface nos volumes denominados  $\text{volume}_{adjacente}$ , que são vizinhos imediatos à parede e ao  $\text{volume}_{cl}$  e que contêm a interface, é semelhante

ao procedimento adotado para o volume<sub>cl</sub>: eles diferem apenas na determinação da direção dominante da fração volumétrica e no cálculo dos parâmetros quando um estêncil perpendicular à parede é utilizado.

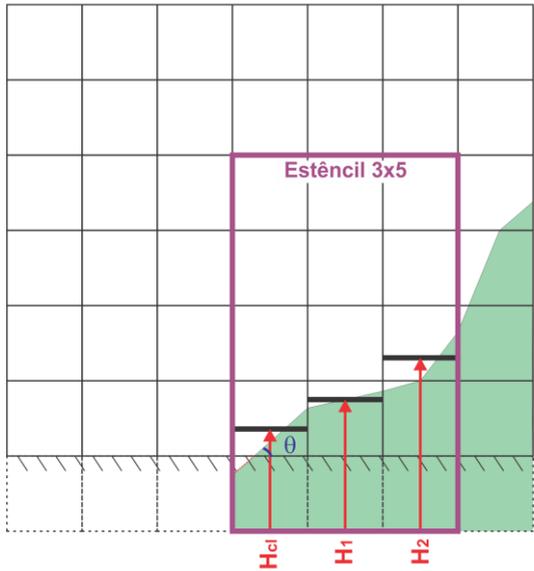
Na determinação da direção dominante, deve-se proceder da mesma forma que para volumes que não são vizinhos a uma parede: toma-se um estêncil com 3 x 3 volumes em torno do volume avaliado e verifica-se qual a direção de maior variação da fração volumétrica.

Quando essa direção indicar que um estêncil perpendicular à parede deve ser utilizado no cálculo da função altura, extrapola-se a interface do volume<sub>cl</sub> para o volume fantasma vizinho a ele e calculam-se as funções altura conforme detalhado no fluxograma da Figura 130. Neste fluxograma,  $H_2$  é a função altura da linha/coluna vizinha ao volume<sub>adjacente</sub> e que não contém o volume<sub>cl</sub>, conforme mostrado na Figura 131. Aqui também é mostrado o procedimento que deve ser adotado para o cálculo dos parâmetros da interface quando um estêncil paralelo à parede é tomado.

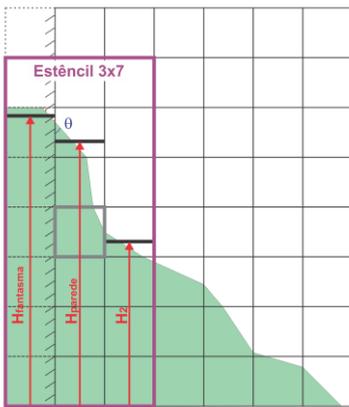
Para o terceiro tipo de volume, o volume<sub>parede</sub>, que é caracterizado por ser vizinho à parede, conter a interface, mas não ser vizinho imediato do volume<sub>cl</sub>, um tipo de extrapolação é necessário apenas quando um estêncil paralelo à parede (Figura 132) é empregado. Neste caso, deve-se extrapolar a interface para o cálculo de  $H_{\text{fantasma}}$ . O algoritmo para o cálculo dos parâmetros da interface para esse volume é mostrado na Figura 133.



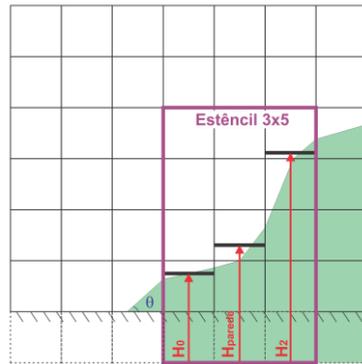
**Figura 130.** Fluxograma para a determinação da curvatura e das componentes do vetor normal à interface para o volume<sub>adjacente</sub>.



**Figura 131.** Estêncil perpendicular à parede para o cálculo da função altura do volume<sub>adjacente</sub> ( $H_1$ ).

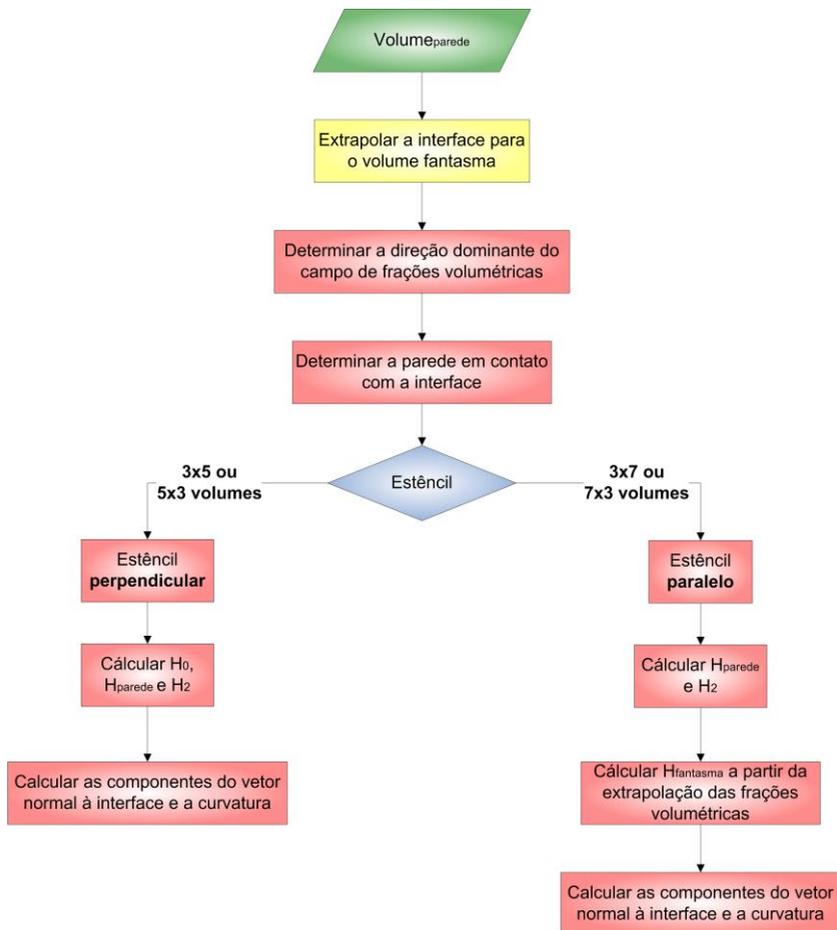


**(a)** Estêncil paralelo à parede, centrado em volume<sub>parede</sub>.



**(b)** Estêncil perpendicular à parede.

**Figura 132.** Estêncis para o cálculo das funções altura envolvendo o volume<sub>parede</sub>.



**Figura 133.** Fluxograma para a determinação da curvatura e das componentes do vetor normal à interface para o volume<sub>parede</sub>.

## APÊNDICE B

Neste apêndice é mostrado como a equação (2.7) se reduziu à equação (3.3), partindo-se da hipótese de fluidos incompressíveis. A equação de conservação da massa da mistura é expressa por:

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U}) = 0. \quad (\text{B.1})$$

Como a massa específica da mistura é uma média das massas específicas de cada fluido ponderada pela fração volumétrica, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} [f \rho_1 + (1-f) \rho_2] + \nabla \cdot \{ [f \rho_1 + (1-f) \rho_2] \mathbf{U} \} = 0. \quad (\text{B.2})$$

Uma vez que ambos os fluidos são incompressíveis,

$$\rho_1 \left[ \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{U}) \right] + \rho_2 \left\{ \frac{\partial (1-f)}{\partial t} + \nabla \cdot [(1-f) \mathbf{U}] \right\} = 0. \quad (\text{B.3})$$

$$\rho_1 \underbrace{\left[ \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{U}) \right]}_{=0} + \rho_2 \left\{ \underbrace{\frac{\partial 1}{\partial t}}_{=0} + \nabla \cdot \mathbf{U} - \underbrace{\left[ \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (f \mathbf{U}) \right]}_{=0} \right\} = 0. \quad (\text{B.4})$$

Da equação de conservação da massa de cada fase:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \quad (\text{B.5})$$



## APÊNDICE C

Neste apêndice é apresentado o método das Soluções Manufaturadas (MMS) e os resultados da verificação do código que resolve o escoamento monofásico em regime permanente.

O método das Soluções Manufaturadas é utilizado na verificação de códigos computacionais, indicando a sua ordem de precisão. Ele consiste na adoção de soluções prontas para cada uma das variáveis do problema. Tratam-se de soluções analíticas, que não têm a obrigação de respeitar a física do problema.

Para que essas soluções correspondam à solução das equações que governam o problema, é necessário inserir termos fonte nessas equações. E a determinação desses termos fonte é realizada pela substituição das soluções manufaturadas nas equações governantes.

Uma boa revisão desse método pode ser encontrada em Salari e Knupp (2000), Roy et al. (2004) e Roy (2005).

A solução do escoamento monofásico em regime permanente é regida pelas seguintes equações:

1. Conservação da Massa:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = \dot{S}_m; \quad (\text{C.1})$$

2. Conservação da quantidade de movimento na direção x:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial x} \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \dot{S}_u; \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

3. Conservação da quantidade de movimento na direção y:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho vv)}{\partial y} = -\frac{\partial P}{\partial y} \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \mu \left( \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right] + \dot{S}_v. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Nessas equações, os termos fonte  $\dot{S}_m$ ,  $\dot{S}_u$  e  $\dot{S}_v$  correspondem aos termos que devem ser incluídos nas equações para que as soluções manufaturadas correspondam às soluções dessas equações.

Na verificação desse código foi empregado um conjunto de soluções manufaturadas baseado no artigo de Roy (2005). Nesse problema, foi considerado um domínio quadrado com lado igual a 1 m preenchido por um fluido com massa específica igual a  $1 \text{ kg/m}^3$  e viscosidade igual a  $10 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ .

Foram realizadas simulações empregando quatro tamanhos diferentes de malha ( $20 \times 20$ ,  $40 \times 40$ ,  $80 \times 80$  e  $160 \times 160$  volumes) e os seguintes critérios de convergência:  $10^{-12} \text{ m/s}$  para as componentes da velocidade e  $10^{-6} \text{ Pa}$  para a pressão.

Os resultados da verificação do código são apresentados em termos da norma  $L_2$  e  $L_\infty$  das componentes da velocidade:

$$L_{2,k}(\varphi) = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^N |\varphi_{k,j} - \varphi_{analitica,j}|^2}{N}}, \quad (\text{C.4})$$

$$L_{\infty,k}(\varphi) = \max(|\varphi_{k,j} - \varphi_{analitica,j}|), \quad (\text{C.5})$$

onde  $\varphi$  corresponde a  $u$  ou  $v$ ;  $k$  indica a malha empregada na discretização do domínio e  $N$  é o número total de volumes da malha.

A ordem de precisão da solução numérica também é apresentada. Essa ordem é expressa por

$$\rho = \frac{\ln\left(\frac{L_{k+1}}{L_k}\right)}{\ln(r)}, \quad (\text{C.6})$$

onde  $L$  corresponde a uma das normas calculadas e  $r$ , à razão de refino da malha.

## SOLUÇÕES BASEADAS EM ROY (2005)

Nessa verificação foram confeccionadas as seguintes soluções para  $u$ ,  $v$  e  $P$ :

$$u(x, y) = 70 + 4 \cdot \sin\left(\frac{5/3\pi x}{L}\right) - 12 \cdot \cos\left(\frac{3/2\pi y}{L}\right) + 7 \cdot \cos\left(\frac{3/5\pi x \cdot y}{L^2}\right), \quad (\text{C.7})$$

$$v(x, y) = 90 - 20 \cdot \cos\left(\frac{3/2\pi x}{L}\right) + 4 \cdot \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) - 11 \cdot \cos\left(\frac{9/10\pi x \cdot y}{L^2}\right), \quad (\text{C.8})$$

$$P(x, y) = 10^5 - 0,3 \cdot 10^5 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) + 0,2 \cdot 10^5 \sin\left(\frac{1,25\pi y}{L}\right) + 0,25 \cdot 10^5 \sin\left(\frac{0,75\pi x \cdot y}{L^2}\right). \quad (\text{C.9})$$

Com a substituição das soluções analíticas nas equações (C.1), (C.2) e (C.3), são determinados os termos fonte:

$$\dot{S}_m = \frac{4\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi y}{L}\right) + \frac{20\pi}{3L} \cos\left(\frac{5\pi x}{3L}\right) + \frac{99\pi x}{10L^2} \sin\left(\frac{9\pi xy}{10L^2}\right) - \frac{21\pi y}{5L^2} \sin\left(\frac{3\pi xy}{5L^2}\right), \quad (\text{C.10})$$

$$\begin{aligned}
\dot{S}_v = & \rho \left[ 4 \operatorname{sen} \left( \frac{\pi y}{L} \right) - 20 \cos \left( \frac{3\pi x}{2L} \right) - 11 \cos \left( \frac{9\pi xy}{10L^2} \right) + 90 \right] \cdot \\
& \left[ \frac{18\pi}{L} \operatorname{sen} \left( \frac{3\pi y}{2L} \right) - \frac{21\pi x}{5L^2} \operatorname{sen} \left( \frac{3\pi xy}{5L^2} \right) \right] + \\
& + \rho \left[ 4 \operatorname{sen} \left( \frac{5\pi x}{3L} \right) - 12 \cos \left( \frac{3\pi y}{2L} \right) + 7 \cos \left( \frac{3\pi xy}{5L^2} \right) + 70 \right] \cdot \\
& \left[ \frac{4\pi}{L} \cos \left( \frac{\pi y}{L} \right) + \frac{99\pi x}{10L^2} \operatorname{sen} \left( \frac{9\pi xy}{10L^2} \right) \right] + \\
& + 2\rho \left[ -12 \cos \left( \frac{3\pi y}{2L} \right) + 4 \operatorname{sen} \left( \frac{5\pi x}{3L} \right) + 7 \cos \left( \frac{3\pi xy}{5L^2} \right) + 70 \right] \cdot \quad \text{(C.11)} \\
& \left[ \frac{20\pi}{3L} \cos \left( \frac{5\pi x}{3L} \right) - \frac{21\pi y}{5L^2} \operatorname{sen} \left( \frac{3\pi xy}{5L^2} \right) \right] + \\
& - \mu \left[ \frac{27\pi^2}{L^2} \cos \left( \frac{3\pi y}{2L} \right) - \frac{63\pi^2 x^2}{25L^4} \cos \left( \frac{3\pi xy}{5L^2} \right) \right] + \\
& - \mu \left[ -\frac{100\pi^2}{9L^2} \operatorname{sen} \left( \frac{5\pi x}{3L} \right) - \frac{63\pi^2 y^2}{25L^4} \cos \left( \frac{3\pi xy}{5L^2} \right) \right] \\
& + \frac{18750\pi y}{L^2} \cos \left( \frac{0,75\pi xy}{L^2} \right) \cdot
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{S}_v = & 2\rho \left[ 4 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi y}{L}\right) - 20 \cos\left(\frac{3\pi x}{2L}\right) - 11 \cos\left(\frac{9\pi xy}{10L^2}\right) + 90 \right] \cdot \\
& \left[ \frac{4\pi}{L} \cos\left(\frac{\pi y}{L}\right) + \frac{99\pi x}{10L^2} \operatorname{sen}\left(\frac{9\pi xy}{10L^2}\right) \right] + \\
& + \rho \left[ 4 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi y}{L}\right) - 20 \cos\left(\frac{3\pi x}{2L}\right) - 11 \cos\left(\frac{9\pi xy}{10L^2}\right) + 90 \right] \cdot \\
& \left[ \frac{20\pi}{3L} \cos\left(\frac{5\pi x}{3L}\right) - \frac{21\pi y}{5L^2} \operatorname{sen}\left(\frac{3\pi xy}{5L^2}\right) \right] + \\
& + \rho \left[ -12 \cos\left(\frac{3\pi y}{2L}\right) + 4 \operatorname{sen}\left(\frac{5\pi x}{3L}\right) + 7 \cos\left(\frac{3\pi xy}{5L^2}\right) + 70 \right] \cdot \quad (\text{C.12}) \\
& \left[ \frac{30\pi}{L} \operatorname{sen}\left(\frac{3\pi x}{2L}\right) + \frac{99\pi y}{10L^2} \operatorname{sen}\left(\frac{9\pi xy}{10L^2}\right) \right] + \frac{25000\pi}{L} \cos\left(\frac{1,25\pi y}{L}\right) + \\
& - \mu \left[ \frac{891\pi^2 x^2}{100L^4} \cos\left(\frac{9\pi xy}{10L^2}\right) - \frac{4\pi^2}{L^2} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi y}{L}\right) \right] + \\
& - \mu \left[ \frac{45\pi^2}{L^2} \cos\left(\frac{3\pi x}{2L}\right) + \frac{891\pi^2 y^2}{100L^4} \cos\left(\frac{9\pi xy}{10L^2}\right) \right] \\
& + \frac{18750\pi x}{L^2} \cos\left(\frac{0,75\pi xy}{L^2}\right)
\end{aligned}$$

Após a determinação desses termos e sua inserção nas equações, o escoamento é resolvido numericamente. Na solução das equações de conservação da quantidade de movimento, as condições de contorno nas fronteiras são velocidades prescritas pelas soluções manufaturadas.

As Tabela 8-1 e Tabela 8-2 apresentam os resultados obtidos para as normas da componente horizontal e vertical da velocidade, respectivamente, além da ordem de precisão da solução numérica de acordo com o refino da malha.

**Tabela 8-1.** Normas  $L_2$  e  $L_\infty$  para a componente horizontal da velocidade.

Malha	$L_2(u)$	Ordem de precisão	$L_\infty(u)$	Ordem de precisão
20 x 20	4,40E-2	-	9,72E-2	-
40 x 40	1,03E-2	2,09	2,27E-2	2,10
80 x 80	2,37E-3	2,11	5,36E-3	2,08
160 x 160	6,02E-4	1,98	1,146E-3	2,22

**Tabela 8-2.** Normas  $L_2$  e  $L_\infty$  para a componente vertical da velocidade.

<b>Malha</b>	$L_2(v)$	<b>Ordem de precisão</b>	$L_\infty(v)$	<b>Ordem de precisão</b>
20 x 20	5,49E-2	-	0,147	-
40 x 40	1,39E-2	1,98	3,72E-2	1,98
80 x 80	3,62E-3	1,94	9,41E-3	1,98
160 x 160	1,02E-3	1,83	2,39E-3	1,98

Como pode ser constatado, para ambas as componentes da velocidade, quando uma malha duas vezes mais fina que a anterior é empregada, a ordem de precisão da solução numérica aumenta praticamente duas vezes. Esse era o comportamento esperado, indicando que o código foi corretamente implementado.