



SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE SISTEMAS LÍQUIDO-LÍQUIDO

Amanda Henriques Leite de Mattos Charin

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage
Luiz Fernando Lopes Rodrigues
Silva
Hrvoje Jasak

Rio de Janeiro
Novembro de 2017

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE SISTEMAS LÍQUIDO-LÍQUIDO

Amanda Henriques Leite de Mattos Charin

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc.

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc.

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Prof. Gustavo Rabello Dos Anjos, D.Sc.

Prof. Mônica Feijó Naccache, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
NOVEMBRO DE 2017

Charin, Amanda Henriques Leite de Mattos

Simulação Fluidodinâmica de Sistemas Líquido-Líquido/Amanda Henriques Leite de Mattos Charin. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XXII, 130 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Hrvoje Jasak

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 118 – 130.

1. CFD. 2. Líquido-líquido. 3. Interface. I. Lage, Paulo Laranjeira da Cunha *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*Dedico esta tese a meu esposo,
Rafael, com todo amor e carinho*

*Theory without experiment is
useless. Experiment without
theory is meaningless. Both are
worthless without a new original
idea.*

by Ivanov, I. B.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer em primeiro lugar a meu esposo e companheiro de vida, Rafael, pela inspiração e incentivo ao desenvolvimento deste trabalho. Também agradeço aos meus pais e irmãos por toda influência positiva sobre a minha trajetória acadêmica.

Agradeço aos meus orientadores, os professores Paulo Lage, Luiz Fernando Silva e Hrvoje Jasak pela orientação e confiança depositados durante a realização desta tese. Dedico um agradecimento especial ao professor Željko Tuković, pela receptividade e valorosa atenção dispendida.

Agradeço a todos integrantes do Laboratório de Termofluidodinâmica (*LTFD*) pelo companheirismo e discussões filosóficas ao longo destes anos. Em especial, sou grata por tornarem o laboratório um ótimo ambiente de trabalho.

Agradeço aos integrantes do laboratório na Universidade de Zagreb não só pela hospitalidade durante o estágio realizado, como também por sua importância sobre meu crescimento pessoal e intelectual.

Também agradeço ao programa *PEQ* por ter me proporcionado esta oportunidade e aos agentes fomentadores *CAPES* e *CNPq* que tornaram possível a realização deste trabalho.

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

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA DE SISTEMAS LÍQUIDO-LÍQUIDO

Amanda Henriques Leite de Mattos Charin

Novembro/2017

Orientadores: Paulo Laranjeira da Cunha Lage
Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva
Hrvoje Jasak

Programa: Engenharia Química

A presente tese visa a representação numérica de escoamentos líquido-líquido com interface bem definida e sem ação de tensoativos. Apresenta-se um procedimento numérico com tratamento diferenciado para o acoplamento de fases. Tal desenvolvimento propicia previsões acuradas do comportamento interfacial para sistemas bifásicos, nos quais ambas as fases possuem propriedades físicas de magnitude similar. Nesta abordagem, equações governantes são aplicadas a cada fase individualmente enquanto a interface é representada por uma superfície de espessura nula na qual se incorporam os saltos interfaciais. As equações governantes são descritas pela abordagem *ALE* e discretizadas pelo método de volumes finitos. Os campos de pressão e velocidade são calculados de acordo com o procedimento *PISO*. O novo tratamento para o acoplamento entre fases integra as atualizações de salto interfacial nos cálculos de pressão e velocidade. A capacidade de previsão da metodologia é avaliada sob diferentes efeitos governando o movimento interfacial. Estudos de caso para validação incluem perturbação da interface por ondas capilares e gravitacionais, assim como o comportamento de gotas frente a deformações iniciais do formato esférico ou escoamento cisalhante. Os resultados numéricos mostram excelente concordância com perfis analíticos transientes da posição da interface. Por fim, o código é aplicado para simular o cenário de partículas fluidas sob ascensão em meio quiescente. Em particular, investiga-se a dinâmica de gotas de tolueno imersas em água, para uma faixa de diâmetros na qual são observadas oscilações. Os perfis transientes de velocidade são comparados com dados experimentais, demonstrando a capacidade da metodologia para representação de eventos fenomenológicos reais.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

FLUID DYNAMIC SIMULATION OF LIQUID-LIQUID SYSTEMS

Amanda Henriques Leite de Mattos Charin

November/2017

Advisors: Paulo Laranjeira da Cunha Lage

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Hrvoje Jasak

Department: Chemical Engineering

The present thesis addresses the numerical representation of liquid/liquid flows with a well-defined interface and without surfactants. A numerical procedure with new treatment for phase coupling is presented. It allows accurate predictions of the interfacial behaviour in two-phase systems consisting of fluids with similar physical properties. In this approach, governing equations are applied to each phase individually while the interface is represented by a zero thickness surface in which interfacial jumps are contemplated. Governing equations are described by the *ALE* approach and discretized by the finite volume method. The pressure/velocity fields are calculated according to the *PISO* procedure. The novel treatment for inter-phase coupling incorporates interfacial jump updates into the pressure/velocity calculations. The methodology's predictive capability is evaluated under different dominant effects governing interface motion. Validation test cases include capillary and gravitational waves, as well as the dynamics of droplets facing initial deformation from spherical shape or shear flow. The numerical results show excellent agreement with transient analytical solutions for the interface position. Finally, the methodology is applied to simulate fluid particles rising in quiescent medium. In particular, the behaviour of water-immersed toluene droplets is investigated for a specific range of diameters in which oscillations are observed. The transient velocity profiles are compared with experimental data, exposing the methodology's ability to represent real phenomenological events.

Sumário

Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xvii
Nomenclatura	xviii
1 Introdução	1
1.1 Estrutura do Trabalho	2
2 Sistemas Multifásicos Dispersos	3
2.1 Escoamento de Partículas Individuais	6
2.1.1 Partículas Rígidas	7
2.1.2 Partículas Fluidas	10
3 Modelagem Matemática	21
3.1 Representação da Interface	23
3.1.1 Captura de Interface	23
3.1.2 Rastreamento de Interface	27
3.2 Formulação	28
3.2.1 Acoplamento entre fases	31
3.2.2 Referencial Não-Inercial	33
4 Metodologia Numérica	36
4.1 Tratamento de Malha	37
4.1.1 Adaptação de Malha	39
4.2 Discretização das Equações	41
4.2.1 Acoplamento Pressão-Velocidade	42
4.2.2 Movimentação da Interface	45
4.2.3 Termos Interfaciais	47
4.3 Acoplamento entre Fases	50
4.3.1 Tratamento Implícito	52
4.4 Procedimento de Cálculo	55

5	Resultados e Discussão	58
5.1	Acoplamento entre Fases	58
5.1.1	Tanque Bidimensional	58
5.1.2	Oscilação de Gotas em Repouso	66
5.1.3	Gotas sob Escoamento Cisalhante	73
5.2	Ascensão de Gotas Individuais	76
5.2.1	Formato e Trajetória	83
5.2.2	Forças Interfaciais	91
5.2.3	Comportamento Fluidodinâmico	94
6	Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	110
A	Balanco de Forças Interfacial	112
B	Condição de Salto para Velocidade	114
C	Condição de Salto para Pressão	116
	Referências Bibliográficas	118

Lista de Figuras

2.1	Representação ilustrativa de diferentes escalas de comprimento presentes em sistemas multifásicos dispersos, relacionadas a: (a) interface; (b) partícula individual; (c) duas partículas; e (d) múltiplas partículas.	4
2.2	Representação macroscópica da região interfacial, com base no tratamento termodinâmico de Gibbs [50].	5
2.3	Ilustração esquemática das linhas de corrente para o escoamento potencial em torno de uma partícula rígida esférica.	7
2.4	Ilustração esquemática das linhas de corrente e perfil de velocidade nas camadas adjacentes a uma superfície sólida curva.	8
2.5	Escoamento em torno de partículas esféricas rígidas para diferentes números de Reynolds. Resultados de TANEDA [116] <i>apud</i> CLIFT <i>et al.</i> [24].	10
2.6	Linhas de corrente do escoamento viscoso lento sobre partículas esféricas fluidas, variando-se a razão λ entre viscosidades da fase dispersa e do meio contínuo: (a) $\lambda = 0,1$; (b) $\lambda = 1$; e (c) $\lambda = 10$. Ilustração retirada de LEAL [72].	11
2.7	Ilustração do mapa de formatos para partículas fluidas proposto por GRACE <i>et al.</i> [51] <i>apud</i> [25]. As regiões demarcadas como I, II e III representam a forma esférica, elipsoidal e formato tipo chapéu ou <i>spherical-cap</i>	13
2.8	Escoamento em torno de uma gota de nitrobenzeno sedimentando em água ($Mo = 8,8 \times 10^{-11}$) para diferentes números de Reynolds. Resultados de WINNIKOW e CHAO [144].	15
2.9	Escoamento em torno de uma gota de m-nitrotolueno sedimentando em água ($Mo = 4,7 \times 10^{-11}$) para diferentes números de Reynolds. Resultados de WINNIKOW e CHAO [144].	16
2.10	Ilustração do mapa de formatos [24], destacados os resultados experimentais para: (a) tolueno/água [139]; (b) n-butil acetato/água [11]; e (c) n-butanol/água [16].	17

2.11	Dados experimentais referentes às velocidades de ascensão máxima e média para gotas de tolueno em água sob condições purificadas. Resultados de WEGENER <i>et al.</i> [139].	18
2.12	Ilustração de velocidades máxima e média de acordo com perfil transiente de ascensão para $D = 3,0 \text{ mm}$. Resultados de WEGENER <i>et al.</i> [139].	19
2.13	Trajectoria de gotas de tolueno imersas em água em diferentes diâmetros: (a) $D = 4,0 \text{ mm}$; (b) $D = 4,5 \text{ mm}$; (c) $D = 5,0 \text{ mm}$; (d) $D = 6,0 \text{ mm}$. Resultados de BÄUMLER <i>et al.</i> [11].	20
3.1	Posicionamento da superfície divisora (a), ilustrando sua representação através de: (b) malha computacional fixa; (c) malha computacional deformável com discretização da interface.	24
3.2	Ilustração esquemática de princípios para identificação da posição da interface através de diferentes estratégias: (a) <i>Volume-of-fluid</i> ; (b) <i>Level-set</i> e (c) <i>Front-tracking</i>	25
3.3	Ilustração esquemática do volume de controle utilizado para obtenção das propriedades macroscópicas: (a) volume muito pequeno, propriedades flutuam e não são contínuas; (b) volume representativo da escala de interesse; (c) volume muito grande, não é suficiente para descrever a dinâmica da escala de interesse.	28
3.4	Abordagens clássicas para formulação matemática do problema, com relação a movimentação dos volumes de controle: (a) Euleriana, com volume de controle fixo; (b) Lagrangeana, com volume de controle se movendo com a mesma velocidade do fluido.	29
3.5	Representação do referencial não-inercial adotado, cuja posição é definida no centro de massa da partícula. As variáveis equivalentes ao referencial inercial \mathbf{x}_{CM} e \mathbf{v}_{CM} representam a posição e velocidade da partículas.	34
4.1	Ilustração esquemática de uma malha computacional regular, destacando os pontos azuis como centróides dos VC e os pontos pretos como pontos de conexão entre células.	38
4.2	Representação da interface discretizada, definida pela justaposição dos <i>patches</i> representando as faces de contorno f_A e f_B pertencentes às malhas volumétricas, que representam as fases contínua A e dispersa B	39
4.3	Estratégias mais comuns para adaptação de uma malha inicial (a) através de: (b) divisão das células; (c) modificação da conectividade dos pontos; (c) movimentação dos pontos.	40

4.4	Volume de controle utilizado para discretização, representando a face compartilhada f entre o VC de análise e seu vizinho, que possuem centroides P e N , respectivamente.	41
4.5	Representação de um volume de controle interno P e seu vizinho N para uma malha sem erro de <i>skewness</i> , onde o vetor distância \mathbf{d}_{PN} passa exatamente pelo centro da face f	43
4.6	Modificação espacial de uma face δV_f entre os tempos t^0 e t^n . Imagem adaptada de TUKOVIĆ [124].	46
4.7	Representação de faces com centróides f_P e f_N . Destaca-se o sistema de coordenadas local formado pelos vetores unitários normal \mathbf{n}_e , tangencial \mathbf{t}_e e binormal \mathbf{m}_e à aresta e compartilhada entre as faces.	47
4.8	Representação da interface discretizada, definida pela justaposição das faces de contorno Af e Bf pertencentes às malhas volumétricas, que representam as fases contínua A e dispersa B	51
4.9	Representação ilustrativa dos volumes de controle fictícios, AN e BN , criados como vizinhos virtuais dos volumes de controle, AP e BP	52
5.1	Representação da geometria utilizada para o cálculo da evolução de ondas com pequena amplitude na interface.	60
5.2	Malha hexaédrica empregada para o caso do tanque bidimensional com nós coincidentes na interface.	60
5.3	Análise dos resíduos de velocidade interfacial \mathbf{v}_S para sistemas com diferentes razões de densidade. As linhas pontilhadas representam simulações com 5 <i>loops</i> externos e as linhas contínuas com 20 <i>loops</i> externos.	64
5.4	Malha hexaédrica empregada para o caso do tanque 2D com nós não-conformacionais na interface.	65
5.5	Comparação entre resultados para um tanque 2D com $\rho_B/\rho_A = 0,5$ e $\nu_B/\nu_A = 0,01$ usando malhas conformacional e não-conformacional.	65
5.6	Comparação entre perfis analítico e numérico em um sistema com $\rho_B/\rho_A = 0,5$ e $\nu = 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ variando a tensão interfacial de $\sigma = 0,001$ a $0,1 \text{ N/m}$	67
5.7	Representação do caso teste com oscilações devido à força de tensão interfacial.	68
5.8	Parte da malha hexaédrica inicial associada com a computação em um processador, para o caso de oscilações na gota em repouso.	69

5.9	Resultados para o comportamento transiente de uma gota de tolueno inicialmente elipsoidal imersa em um meio contínuo de água, incluindo uma comparação com os perfis de decaimento analíticos de MILLER e SCRIVEN [86] (M) e PROSPERETTI [96] (P) para o eixo maior da elipse L	71
5.10	Comparação entre perfis de decaimento analíticos de Miller e Scriven [86] (M) e Prosperetti [96] (P) com a solução numérica para oscilações nos eixos maior L (a) e menor B (b) da elipse do sistema n-butil acetato/água.	72
5.11	Comparação entre perfis de decaimento analíticos de Miller e Scriven [86] (M) e Prosperetti [96] (P) com a solução numérica para oscilações nos eixos maior L (a) e menor B (b) da elipse do sistema n-butanol/água.	73
5.12	Representação de escoamento cisalhante e conseqüente deformação da gota para formato elipsoidal com B e L como eixos menor e maior, respectivamente.	74
5.13	Comparação entre soluções analítica e numérica para a deformação da gota sob escoamento cisalhante, analisado pelo parâmetro D_f . . .	75
5.14	Resultados para deformação transiente da gota devido ao escoamento cisalhante, com raio inicial da gota de $R_0 = 0,001\ m$ e $Ca = 0,025$ ($\dot{\gamma} = 875\ s^{-1}$, $\sigma = 0,035\ N/m$, $\rho_B = \rho_A = 1000\ kg/m^3$ e $\mu_B/\mu_A = 1,5$). . .	76
5.15	Representação esquemática referente a ascensão de gotas individuais em meio líquido quiescente. Sobre o centro de massa da gota agem as forças globais de empuxo \mathbf{F}_b , peso \mathbf{F}_w e arrasto \mathbf{F}_d	77
5.16	Malha hexaédrica inicial utilizada para o caso de gotas ascendentes em meio quiescente.	78
5.17	Representação ilustrativa de malhas avaliadas variando o número de divisões angulares por bloco entre: (a) 20, (b) 24 e (c) 30 divisões. . .	78
5.18	Deformação das malhas avaliadas após simulação de $T = 2\ s$ para: (a) 20, (b) 24 e (c) 30 divisões angulares.	79
5.19	Resultados numéricos de velocidade máxima v_{max} (●) e terminal v_{final} (⊙) comparados com dados experimentais de WEGENER <i>et al.</i> [139] para velocidades máxima v_{max} (■) e média v_{media} (□).	80
5.19	Resultados transientes de velocidade de ascensão para diâmetros iniciais variando entre $D = 1,8 - 3,5\ mm$	82
5.20	Resultados transientes de gotas, com diâmetros iniciais variando entre $D = 2,0 - 3,5\ mm$, avaliando: (a) a razão de aspecto E entre os eixos do elipsoide formado e (b) a área interfacial normalizada pela área da esfera inicial (A/A_0).	84

5.21	Formato das gotas analisado no plano XY ($Z = 0$) para: (a) tempo inicial, (b) tempo intermediário para o qual se tem a máxima área e (c) tempo final de simulação. Gotas de diâmetro inicial $D = 2,0; 2,5; 3,0$ e $3,5$ mm sendo representadas por diferentes cores.	86
5.22	Resultados transientes de curvatura média κ avaliada em diferentes pontos da interface ($L_x, L_z, B_{y,min}$ e $B_{y,max}$).	87
5.23	Gráfico de Eötvös <i>versus</i> Reynolds para o sistema tolueno/água, comparando com os resultados numéricos com os dados experimentais de [139]. Destaca-se ainda em vermelho os diâmetros iniciais de $D = 2,0; 2,5; 3,0$ e $3,5$ mm	88
5.24	Resultados transientes de trajetória em: (a) plano XY ; (b) plano ZY ; e (c) direção vertical. Gotas com diâmetros iniciais de $D = 2,0; 2,5; 3,0$ e $3,5$ mm são representadas pelas curvas em vermelho, verde, azul e rosa, respectivamente.	89
5.25	Resultados referentes a gota de $D = 2,5$ mm no tempo total de simulação $T = 12$ s para: (a) trajetória no plano ZY ; (b) velocidade lateral na direção z ; e (c) velocidade de ascensão na direção y	90
5.26	Resultados transientes de aceleração para gotas com diâmetro inicial variando entre $D = 2,0 - 3,5$ mm	91
5.27	Resultados transientes das forças interfaciais, incluindo $F_r = F_b - F_w + ma_{CM}$ e o arrasto do lado contínuo com componentes de forma ($F_{p,C}$) e arrasto viscoso ($F_{v,C}$) para gotas com diâmetro inicial variando entre $D = 2,0 - 3,5$ mm	93
5.28	Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 2,0$ mm analisados no plano XY ($Z = 0$) de (a) – (d) e no plano YZ ($X = 0$) de (e) – (h).	94
5.29	Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 3,5$ mm	95
5.30	Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 2,5$ mm no plano XY de (a) – (f) e no plano ZY de (g) – (l).	96
5.31	Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 3,0$ mm no plano XY de (a) – (f) e no plano ZY de (g) – (l).	97
5.32	Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,0$ mm avaliados no plano XY ($Z = 0$).	99
5.33	Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,0$ mm avaliados no plano ZY ($X = 0$).	100
5.34	Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,5$ mm avaliados no plano XY ($Z = 0$).	101
5.35	Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,5$ mm avaliados no plano ZY ($X = 0$).	102

5.36	Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 3,0 \text{ mm}$ avaliados no plano XY ($Z = 0$).	103
5.37	Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 3,0 \text{ mm}$ avaliados no plano ZY ($X = 0$).	104
5.38	Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 3,5 \text{ mm}$ no plano XY ($Z = 0$).	105
5.39	Campo de velocidade na frente ou traseira da gota com $D = 2,0 \text{ mm}$ para: (a),(b) $t = 1,0 \text{ s}$; (c) $t = 2,0 \text{ s}$ e (d) $t = 4,0 \text{ s}$	107
5.40	Campo de velocidade avaliado na traseira da gota com diâmetro $D = 2,5 \text{ mm}$ para diferentes tempos.	107
5.41	Campo de velocidade avaliado na traseira da gota com diâmetro $D = 3,0 \text{ mm}$ para diferentes tempos.	108
5.42	Campo de velocidade na traseira da gota com diâmetro $D = 3,5 \text{ mm}$ para diferentes tempos.	108
5.43	Linhas de corrente referentes ao escoamento na fase contínua para tempo intermediário ($t = 4,0 \text{ s}$), momento em que oscilações ocorrem.	109
5.44	Linhas de corrente referentes ao escoamento na fase contínua ao fim das simulações, momento em que oscilações cessaram.	109

Lista de Tabelas

2.1	Propriedades físicas para sistemas líquido-líquido com três níveis diferentes de tensão interfacial, como descrito por BÄUMLER <i>et al.</i> [11].	17
5.1	Tempo de execução para simulações no tanque 2D para diferentes razões de densidade e número de loops externos.	62
5.2	Média temporal do erro absoluto para a posição da interface y em $x = 0$ para simulações no tanque 2D.	62
5.3	Resultados de taxa de decaimento e frequência para os casos de oscilação.	70
5.4	Propriedades das malhas avaliadas para diâmetro $D = 3,2 \text{ mm}$	79
5.5	Resultados das simulações para gotas de tolueno em água ($Mo = 1,93 \times 10^{-11}$) na faixa de diâmetros de $1,5 \leq D \leq 3,5 \text{ mm}$, incluindo comparação com dados experimentais de WEGENER <i>et al.</i> [139].	82

Nomenclatura

a_0	perturbação inicial na interface
a_N	coeficientes fora da diagonal principal do sistema linear
a_P	coeficientes da diagonal principal do sistema linear
AP, BP	centroides dos volumes em ambos os lados da interface
AN, BN	centroides dos volumes vizinhos de AP e BP
\mathbf{a}	vetor aceleração
B	eixo menor do elipsoide
C	curva de contorno delimitando o elemento de área
Ca	número Capilar
\mathbf{d}	vetor distância
D	diâmetro
D_f	parâmetro de deformação
\mathbf{D}	tensor taxa de deformação
E	razão de aspecto
e	aresta sob análise
Eo	número de Eötvös
\mathbf{F}	uma força genérica
\mathbf{f}	direção de deslocamento
$\mathbf{F}_{\sigma,f}$	força de tensão interfacial nas faces

\mathbf{g}	aceleração da gravidade
\mathbf{H}	contribuições ao sistema linear, $\mathbf{H} = -\sum_N a_N \mathbf{v}_N + \mathbf{r}_P$
H	altura da camada de fluido
h	deslocamento na direção \mathbf{f}
\mathcal{H}	função indicadora de fase
\mathbf{I}	tensor identidade
Kn	número de Knudsen
L	eixo maior do elipsoide
l	distância da interface
Le	comprimento total da aresta e
\mathbf{m}	vetor unitário binormal
m	massa
\dot{m}	fluxo de massa por movimento fluido
Mo	número de Morton
\mathbf{n}	vetor unitário normal
N	volume de controle vizinho
\mathcal{P}	pressão absoluta
P	volume de controle sob análise
p	pressão modificada definida por $p = \mathcal{P} - \rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{r})$
\mathbf{r}	vetor posição
R	raio
Re	número de Reynolds
\mathbf{r}_P	termo fonte do sistema linear
S	superfície
S_f	área total de um elemento de área

T	tempo total de simulação
t	tempo
\mathbf{t}	vetor unitário tangente
\mathbf{T}	tensor tensão
\mathcal{T}	tensor de transformação para o sistema de coordenadas local
\mathbf{v}	vetor velocidade
V	volume
\dot{V}	fluxo de volume por movimento da malha
W	comprimento da geometria
\mathbf{v}_S	velocidade da malha
We	número de Weber
y_a, y_n	perfis analítico e numérico da posição da interface

Letras Gregas

Δ_f	vetor paralelo a \mathbf{d}_{NP}
Δ_p, Δ_v	saltos interfaciais de pressão e velocidade
δV	variação de volume
Δt	passo de tempo
Δx	tamanho do menor elemento na interface
η	razão de densidade
γ	campo de difusividade
$\dot{\gamma}$	taxa de cisalhamento
κ	curvatura superficial média
λ	razão de viscosidade
μ	coeficiente de viscosidade
ν	viscosidade cinemática

ω	fator de ponderação para interpolação linear
$\phi_{r,f}$	fluxo de massa relativo avaliado no centro das faces
ψ	variável genérica
ρ	densidade
σ	coeficiente de tensão interfacial
ξ	estimativa de erro
ζ_f, ζ_o	fatores de relaxação

Subscritos

A, B	indica o lado da interface
Af, Bf	centroide de faces em lados opostos da interface
c	relacionado à fase contínua
CM	relacionado ao centro de massa
cr	crítico
d	relacionado à fase dispersa
e	relacionado à aresta
eff	efetivo
eq	equivalente
f	relacionado às faces
$final$	refere-se ao valor final
I	relacionado à interface
i, j	índices
max	refere-se ao valor máximo
$media$	refere-se ao valor médio
min	refere-se ao valor mínimo
N	centroide do volume de controle vizinho

P centroide do volume sob análise
 r relativo
 S relacionado à superfície
 x, z índices referentes aos eixos x e z

Sobrescritos

* correção
 mRc método de Rhie-Chow modificado
 n passo de tempo atual
 o passo de tempo anterior a n
 oo passo de tempo anterior a o
 T transposto
 t_0 tempo inicial

Siglas

ALE abordagem Lagrangeana-Euleriana arbitrária (*Arbitrary Lagrangean-Eulerian*)
 BDF esquema de discretização temporal *backward differentiation formula*
 CC condição de contorno
 CFD dinâmica dos fluidos computacional (*Computational Fluid Dynamics*)
 CM centro de massa
 GGI método de interpolação *Generalized Grid Interface*
 $PISO$ procedimento de solução *Pressure Implicit with Splitting of Operator*
 $PLIC$ método de reconstrução de interface *Piecewise Linear Interface Calculation*
 $SLIC$ método de reconstrução de interface *Simple Line Interface Calculation*
 VC volume de controle
 VOF método de captura de interface *Volume-of-fluid*

Capítulo 1

Introdução

Os fenômenos ocorrendo no contato entre fases exercem papel fundamental na dinâmica de sistemas multifásicos dispersos. Em se tratando de tecnologia, as dispersões têm aplicação abrangente em produtos e processos. Todavia, os mecanismos de interação atrelados a tais sistemas envolvem escalas de comprimento distintas, de forma que uma complexa inter-relação de fatores define um determinado comportamento.

Além disso, devido à difícil acessibilidade às “inter-fases”, experimentos são limitados em prover informações completas e acuradas. Como as escalas espaço-temporais relevantes podem variar por diversas ordens de magnitude, os procedimentos experimentais têm dificuldade para caracterizar simultaneamente os diferentes fenômenos presentes. Tem-se, ainda, que alguns fenômenos interfaciais são tão sensíveis que perturbações inerentes à técnica de medição podem provocar modificações sobre a amostra e mascarar os resultados da análise.

Frente ao exposto, a fluidodinâmica computacional (*CFD*) surge como uma ferramenta poderosa para a descrição de sistemas interfaciais. Simulações numéricas de escoamentos multifásicos podem trazer inúmeras informações e detalhes que a priori não poderiam ser acessados experimentalmente.

Não obstante, garantir uma resolução representativa dessa dinâmica é um desafio, principalmente no que tange a sistemas fluidos. Interfaces fluidas, como gás-líquido e líquido-líquido, são de difícil representação por causa de sua deformação inerente. Enquanto partículas rígidas mantêm seu formato original sob condições de cisalhamento moderadas, partículas fluidas podem deformar como resultado da interação entre tensões advindas de ambas as fases e ação de forças interfaciais.

Ainda no quesito fluidos, a natureza das fases envolvidas influi sobre a intensidade das interações que ocorrem na interface. Sob a perspectiva contínua, o efeito prático observado é que duas fases condensadas geralmente mantêm fortes interações bilaterais na interface, devido à similaridade na magnitude das propriedades físicas dos fluidos. Em contraste, sistemas gás-líquido muitas vezes apresentam um caráter

unilateral em que a fase líquida domina as forças atuantes.

Um trabalho precursor a este é TUKOVIĆ [124], o qual desenvolveu um método de malha móvel para rastrear interfaces fluidas que se movimentam e deformam por ação do escoamento. Tal metodologia foi implementada no *software* livre Open-FOAM, baseando-se na aplicação e resolução das equações de conservação em dois domínios computacionais distintos que interagem entre si através de uma malha superficial, onde condições interfaciais devem ser atendidas. Porém, o tratamento explícito proposto para resolver a interação na interface não possibilita a simulação de sistemas líquido-líquido, pois neste caso tem-se um forte acoplamento entre fases.

O presente trabalho apresenta um desenvolvimento computacional capaz de simular escoamentos bifásicos fluidos de propriedades similares, como sistemas líquido-líquido, para condições de interface limpa (*clean interface*). Objetivou-se realizar simulações numéricas diretas de escoamentos transientes, nas quais todas as escalas relevantes de espaço e tempo são resolvidas, evitando problemas de modelagem além da hipótese do contínuo. Para tal, buscou-se seguir uma linha consistente na determinação da estrutura matemática para representar os fenômenos de interesse, com base em um levantamento teórico do estado da arte associado.

1.1 Estrutura do Trabalho

Este texto está organizado da seguinte maneira:

- Capítulo 2: introdução de conceitos gerais sobre sistemas multifásicos dispersos. Ênfase em sistemas líquido-líquido, incluindo revisão da literatura em torno de fenômenos observados experimentalmente;
- Capítulo 3: revisão da literatura quanto às abordagens mais utilizadas para representação do cenário em questão; introdução da modelagem com hipótese do contínuo e dedução do equacionamento para representação dos efeitos descritos no capítulo anterior;
- Capítulo 4: exposição da metodologia numérica aplicada para resolver o conjunto de equações previamente deduzido; além da descrição de procedimentos como tratamento de malha, discretização das equações e estratégia de solução, enfoque na metodologia desenvolvida para tratar do acoplamento entre fases;
- Capítulo 5: apresentação e discussão dos resultados, que englobam a validação da metodologia utilizando casos com solução analítica exata ou aproximada e também a avaliação do escoamento no entorno de gotas ascendentes, incluindo comparação com dados experimentais;
- Capítulo 6: conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Sistemas Multifásicos Dispersos

Sistemas multifásicos estão presentes em diversas áreas de aplicação industrial como petróleo, polímeros, alimentos e cosméticos. Estes sistemas são frequentemente encontrados na forma de dispersões, onde partículas de uma fase estão suspensas em um meio contínuo.

Processos industriais de separação ou reação geralmente usufruem da área de contato expandida entre as fases para promover maiores taxas de transferência de massa ou calor, e.g. extração líquido-líquido e flotação [30, 140]. Além de constituir produtos bem conhecidos do dia a dia, sistemas dispersos também são usados para desenvolvimento de aplicações sofisticadas como mistura de polímeros imiscíveis [129] e nano-emulsões [114].

Dada a sua vasta aplicabilidade, a compreensão e previsão do comportamento de tais sistemas tornam-se essenciais para o desenvolvimento de produtos de alta qualidade ou projeto de equipamentos e operações mais eficientes. Contudo, tratam-se de sistemas complexos em que a própria determinação e acompanhamento de propriedades representativas já constituem uma difícil tarefa.

O comportamento transiente de sistemas dispersos fluidos resulta da interação mútua de vários subsistemas, como ilustrado na Figura 2.1. Características gerais como tempo de vida da dispersão ou distribuição de tamanho da fase dispersa (Figura 2.1.d) são diretamente influenciadas pela dinâmica de quebra e coalescência de gotas e bolhas.

A ocorrência da coalescência, por sua vez, depende de interações múltiplas entre o meio contínuo e pelo menos duas partículas fluidas, que também interagem entre si [22]. Este processo geralmente envolve a drenagem e ruptura de um filme fino formado entre partículas que se aproximam por ação do escoamento (Figura 2.1.c). Já o movimento individual de uma partícula é reflexo de sua interação fluidodinâmica com o meio circundante (Figura 2.1.b), que ainda pode ser influenciada pela atividade de surfactantes (Figura 2.1.a).

Devido à diferença nas escalas que integram os sistemas multifásicos polidis-

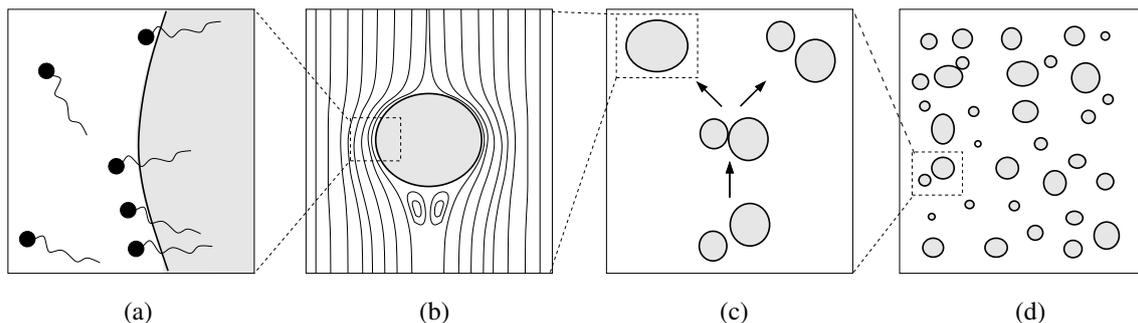


Figura 2.1: Representação ilustrativa de diferentes escalas de comprimento presentes em sistemas multifásicos dispersos, relacionadas a: (a) interface; (b) partícula individual; (c) duas partículas; e (d) múltiplas partículas.

persos, acompanhar experimentalmente todos os subsistemas é impraticável. Deste modo, esforços científicos têm sido direcionados para a compreensão dos fenômenos individuais e de que forma eles se correlacionam com a gênese de um determinado comportamento.

Nesse contexto, destaca-se que dispersões apresentam elevada razão de área de contato por volume, de forma que a região interfacial pode adquirir um papel central sobre a determinação das propriedades globais do sistema. Com objetivo de desenvolver uma descrição consistente dos fenômenos interfaciais, estes precisam ser compreendidos sob aspectos fundamentais.

O contato efetivo entre fases imiscíveis se dá em regiões espaciais muito pequenas, cuja extensão gira em torno de 5 a 10 vezes o diâmetro molecular médio [46], como ilustrado na Figura 2.2. Do ponto de vista macroscópico, esta zona de transição pode ser idealizada por uma superfície singular, considerando que as fases adjacentes mantêm as mesmas propriedades desde o seio até a interface. Para representar efeitos decorrentes da real variação de distribuição molecular nesta região, propriedades de excesso interfacial devem ser atribuídas à superfície divisora [50, 88].

Sob a perspectiva elementar, é energeticamente mais favorável para uma molécula interagir com moléculas similares pois estas se atraem através de diferentes mecanismos como forças van der Waals ou ligações de hidrogênio [20, 90]. Contudo, na região interfacial, a molécula está apenas parcialmente cercada por suas similares, ao mesmo tempo em que interage com moléculas da outra fase. Essa interação desfavorável entre moléculas na região interfacial gera uma energia livre de excesso positiva, atrelada a superfície divisora.

Seguindo o sentido natural de minimização deste estado de energia, as moléculas apresentam uma tendência de retornarem para o interior de sua fase. Isto resulta num efeito tangencial na interface, equivalente ao trabalho reversível necessário para criar um elemento superficial. A força macroscópica associada, que age no sentido de

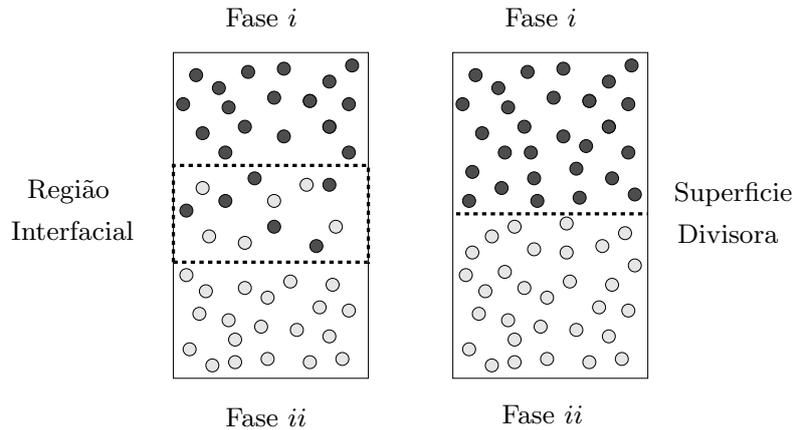


Figura 2.2: Representação macroscópica da região interfacial, com base no tratamento termodinâmico de Gibbs [50].

minimizar a área de contato entre as fases, é denominada força de tensão interfacial.

Quanto maior a diferença entre as características das moléculas de uma fase em relação a outra, maior será o estado de energia livre na interface e, conseqüentemente, maior o coeficiente de tensão interfacial. Outros fatores como variações de temperatura e presença de surfactantes também impactam sobre esta propriedade interfacial [14, 68].

Particularmente, surfactantes podem influenciar a interface em diversos aspectos. Por se tratarem de moléculas com afinidade pelos dois fluidos, elas tendem a migrar para a região interfacial. Uma vez nesta região, as moléculas tensoativas interagem com moléculas de ambas as fases e reduzem o estado de energia livre de excesso. Quando presentes em altas concentrações, estas substâncias podem até mesmo conferir propriedades mecânicas próprias à interface como viscosidades dilatacional e cisalhante [36, 47, 71].

No contexto discutido, seja pelo movimento e deformação da interface, ou pela interação entre interfaces, o comportamento interfacial permeia todos os subsistemas ilustrados na Figura 2.1. Mas, apesar de sua relevância, a compreensão em torno da inter-relação entre diferentes fenômenos interfaciais não é satisfatória, quando na presença de surfactantes [45, 47, 151] e até mesmo em sua ausência [66].

O presente trabalho foca na representação de sistemas fluidos para condições de interface limpa, isto é, sem ação de agentes tensoativos. Em particular, trata-se da descrição do movimento e deformação de interfaces líquido-líquido em resposta ao escoamento. Nas próximas seções serão discutidos conceitos importantes, assim como observações experimentais que auxiliam na descrição consistente de sistemas líquido-líquido com interface bem definida.

2.1 Escoamento de Partículas Individuais

Apesar de haver vasta literatura abordando a dinâmica de suspensões, a compreensão do comportamento de partículas individuais é primordial para fundamentar uma base sólida, na qual se pode construir conhecimento sobre sistemas com múltiplas partículas. Nesse contexto, sabe-se que as características do escoamento dependem primordialmente da natureza das fases envolvidas, pois é a interação entre elas que determina a complexidade do movimento interfacial.

Sistemas multifásicos podem ser compostos por diversas combinações de estados da matéria nas fases contínua e dispersa. Do ponto de vista da mecânica dos fluidos, a matéria pode ser caracterizada pelo estado fluido e sólido, cuja distinção básica é relacionada com a resistência sob aplicação de uma tensão tangencial [17]. Enquanto o sólido pode resistir a tensão cisalhante por deformação estática, o fluido se move e deforma continuamente quando submetido à mesma situação.

No estado sólido, as moléculas permanecem bem próximas umas das outras e as forças intermoleculares predominam. Assim, quando a fase dispersa é sólida, as partículas apresentam formato estável e volume definido, sendo também chamadas de partículas rígidas [24]. Em condições dinâmicas, o comportamento interfacial atrelado geralmente envolve apenas o deslocamento da interface, sem que hajam modificações em seu formato original.

Por outro lado, tem-se uma maior complexidade envolvida no caso de uma fase dispersa fluida, visto que também há escoamento no interior das partículas. Neste caso, ainda se deve considerar a possível transferência de massa e quantidade de movimento que ocorre na interface. Deste modo, o movimento e deformação de uma interface fluida resultam do acoplamento entre escoamentos interno, externo e ação de forças interfaciais.

Embora ambos os estados de gás e líquido sejam reconhecidos como fluidos, que obedecem às mesmas leis do movimento, seus graus inerentes de forças coesivas levam a comportamentos distintos ao combinar partículas gasosas ou líquidas com o mesmo meio contínuo. Uma vez que as fases condensadas são caracterizadas por moléculas bem compactadas com forças coesivas elevadas, duas fases líquidas tendem a interagir mais intensamente do que uma combinação gás-líquido [10].

Na perspectiva do contínuo, isso acarreta em características específicas. Por exemplo, sistemas líquido-líquido sempre exibem coeficientes de tensão interfacial menores em comparação com o sistema correspondente vapor-líquido [88], o que implica em menos trabalho envolvido na expansão da interface de uma gota.

Outro efeito distinto é o impacto da transferência de quantidade de movimento no campo de velocidade da fase contínua. Devido à sua menor densidade, uma bolha deve apresentar velocidades muito mais altas do que uma gota para afetar signifi-

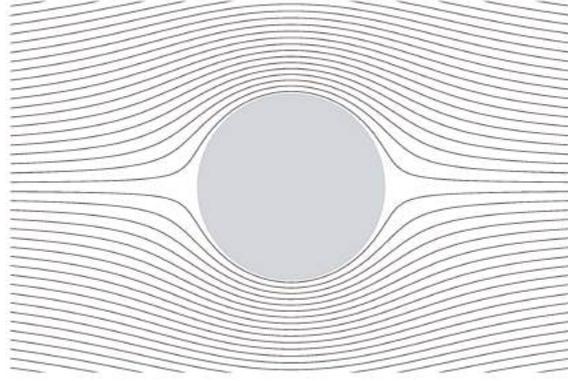


Figura 2.3: Ilustração esquemática das linhas de corrente para o escoamento potencial em torno de uma partícula rígida esférica.

cativamente o campo de velocidade da fase contínua. Além disso, as bolhas tem um efeito viscoso negligenciável em comparação com o meio em que estão imersas. Em contraste, gotas podem contribuir substancialmente para o balanço interfacial de tensões cisalhantes por causa de sua maior viscosidade.

À luz destas observações, pode concluir-se que duas fases líquidas imiscíveis apresentam interações bidirecionais mais fortes quando comparadas a um sistema gás/líquido, onde o fluxo de informação é usualmente mais expressivo em uma direção (isto é, do líquido para o gás).

Visando fundamentar uma base teórica para descrever a dinâmica de gotas em meio líquido, primeiro aborda-se o caso mais simples de escoamento em torno de partículas rígidas (Seção 2.1.1). Em seguida, na Seção 2.1.2, é realizado um levantamento do estado da arte para casos mais complexos envolvendo partículas fluidas.

2.1.1 Partículas Rígidas

O escoamento em torno de partículas rígidas tem sido alvo de estudos teórico-experimentais a centenas de anos [31]. Tentativas iniciais de descrever matematicamente tal cenário consideravam a fase contínua como um fluido ideal, no qual eram desprezadas a viscosidade e possível compressibilidade [10]. Este artifício matemático propiciava a obtenção de soluções analíticas completas dos campos de velocidade e de pressão referentes ao escoamento no entorno do corpo (Figura 2.3).

Para fluidos invíscidos, constatou-se uma simetria perfeita nas linhas de corrente a jusante e montante da partícula, de forma que a força resultante agindo sobre o corpo é nula. Contudo, observações experimentais contradiziam este resultado, pois se verificava uma nítida resistência ao escoamento na presença de corpos sólidos imersos, mesmo quando o valor numérico do coeficiente de viscosidade era muito pequeno no meio contínuo, dando origem ao chamado paradoxo de d'Alembert [117].

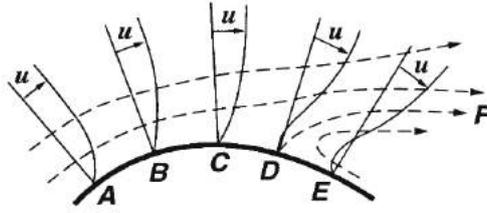


Figura 2.4: Ilustração esquemática das linhas de corrente e perfil de velocidade nas camadas adjacentes a uma superfície sólida curva.

A resolução deste paradoxo está no fato de que todos os fluidos reais são viscosos, e não importa quão pequena seja a viscosidade, sua presença distorce o padrão de escoamento. Ao entrar em movimento, as moléculas do meio fluido se deparam com uma resistência das moléculas do meio sólido, pois estas apresentam uma intensa força adesiva. Este efeito foi primeiramente caracterizado no início do século XX por PRANDTL [94] *apud* ANDERSON [4] que associou essa resistência ao escoamento com o princípio da aderência, no qual se admite que um fluido adquire velocidade macroscópica nula ao entrar em contato com uma superfície sólida em repouso.

Ao admitir esta condição de não-deslizamento, estabelece-se um perfil com variações bruscas de velocidade em uma fina camada próxima a parede do corpo. O forte gradiente de velocidade restrito a esta estreita região provocaria um efeito de fricção com considerável dissipação viscosa mesmo para pequenos coeficientes de viscosidade. Fora dessa região, denominada camada limite, o escoamento permaneceria essencialmente invíscido [93].

Outra concepção marcante resultante das observações de Prandtl diz respeito à separação do escoamento na traseira de partículas sólidas [148]. Devido ao formato do corpo sólido (Figura 2.4), o escoamento em seu entorno se assemelha ao de um duto convergente-divergente. No primeiro segmento (de A até C), há uma compressão nas linhas de corrente e o fluido acelera. Em seguida, a partir da região mais larga do corpo (de C até E), o fluido é retardado pela expansão da área disponível para escoamento, gerando uma região de pressão aumentada.

Assim, o escoamento próximo a parede, que acaba perdendo energia cinética por causa da dissipação viscosa, pode não ter energia suficiente para superar esse gradiente de pressão adverso, de forma que o fluxo acaba sendo paralisado e revertido. Com a separação do escoamento, forma-se uma região de baixa energia atrás do corpo e a distribuição de pressão na interface é modificada. A grande redução nos valores de pressão próximo à traseira da partícula acarreta em um diferencial de pressão contrário ao sentido original do escoamento. Como efeito resultante, aumenta-se a resistência ao escoamento experimentada pelo corpo.

A fundamentação dos conceitos discutidos contribuíram para o presente enten-

dimento do escoamento em torno de partículas rígidas. Em interfaces fluido-sólido, a condição de não-deslizamento é suficiente para representar as interações que ocorrem entre as fases. Atualmente, com base em evidências empíricas, sabe-se que esta condição se aplica sob quase todas as circunstâncias para fluidos Newtonianos de pequeno tamanho molecular e também se aplica em determinados casos para líquidos complexos, tais como soluções poliméricas e misturas [110].

De forma geral, há concordância na literatura em relação às características do escoamento frente a variações na intensidade da velocidade relativa entre as fases. O caráter do escoamento quando este contorna um corpo sólido depende basicamente do número de Reynolds, definido pela razão adimensional entre forças inerciais e viscosas [17]. Forças inerciais estão relacionadas com o movimento do fluido, enquanto forças viscosas resistem a deformação e são caracterizadas pela viscosidade do meio.

Para $Re \ll 1$, tem-se o chamado escoamento viscoso lento em torno da partícula rígida, caracterizando o regime de Stokes [115, 141]. Neste limite, ao negligenciar termos não-lineares, a difusão de vorticidade ocorre igualmente em todas as direções, de forma que o escoamento mantém sua simetria a montante e jusante da partícula esférica, similar a resolução para escoamento invíscido [10].

Conforme se aumenta a velocidade relativa entre a partícula e o meio no qual está imersa, tensões cisalhantes acumulam na primeira metade do corpo. O fluido, que é posto em rotação pela fricção com a parede, cria uma assimetria no perfil de vorticidade que se torna cada vez mais pronunciada com crescimento do número de Re . Próximo de $Re \approx 20$, ocorre a separação do escoamento e se geram dois grandes vórtices, que formam uma esteira atrás da esfera [24].

A Figura 2.5 ilustra o comportamento à jusante da esfera rígida para diversos números de Re . Observa-se que a zona de recirculação se torna visível apenas para $Re > 20$ (Figuras 2.5a e 2.5b). Com número de Reynolds crescente na faixa de $20 < Re < 130$ (Figuras 2.5b – 2.5f), a região em que ocorre a separação das linhas de corrente se expande, ao mesmo tempo que a esteira alonga e alarga. Regiões de separação maiores estão associadas a um aumento na resistência ao escoamento, devido a menor recuperação de pressão no ponto de estagnação da esteira [75].

A partir de $Re = 130$, a difusão e convecção da vorticidade não são suficientes para acompanhar a geração de vorticidade na camada limite e inicia-se uma instabilidade na esteira [76]. Com aumento no número de Reynolds ($130 < Re < 400$), passa a ocorrer um desprendimento periódico de pequenos vórtices, e em Re ainda maiores ($Re > 400$), inicia-se uma transição para esteira turbulenta.

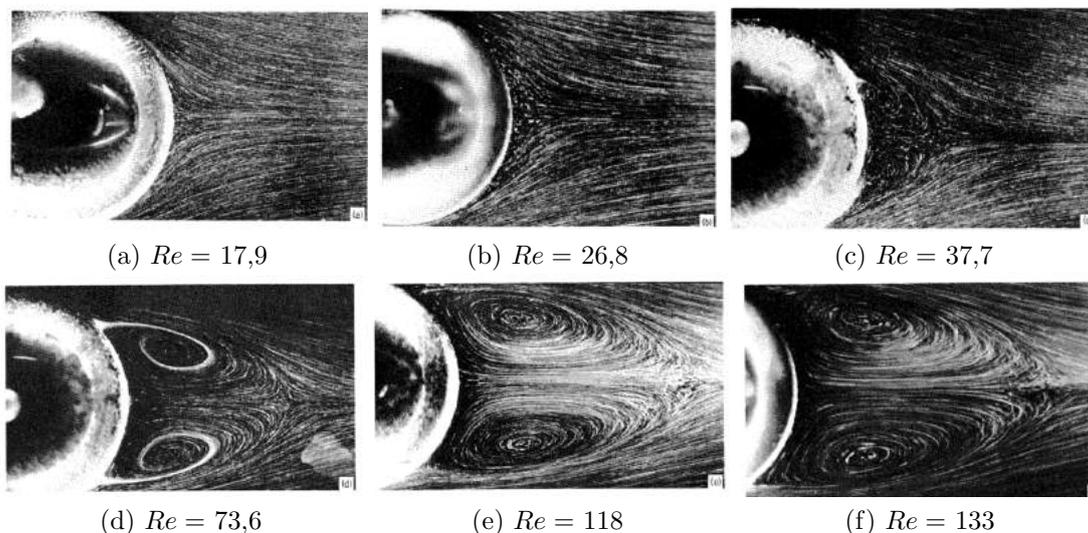


Figura 2.5: escoamento em torno de partículas esféricas rígidas para diferentes números de Reynolds. Resultados de TANEDA [116] *apud* CLIFT *et al.* [24].

2.1.2 Partículas Fluidas

Para interfaces fluidas, o princípio da aderência se manifesta como a tendência de um fluido adquirir a mesma velocidade do outro fluido adjacente à interface. Assim, a condição de não-deslizamento é expressada pela continuidade na componente tangencial de velocidade [72]. Contudo, esta condição sozinha não é suficiente para descrever os fenômenos que ocorrem na interface, visto que partículas fluidas interagem de forma mais complexa com o meio contínuo.

Devido ao escoamento no interior da partícula, é necessário considerar adicionalmente um balanço interfacial de forças para reger a transferência de quantidade de movimento entre as fases [10]. Além disso, como interfaces fluidas geralmente deformam quando submetidas ao movimento, seu formato também deve ser determinado como parte da solução do escoamento. O acoplamento entre escoamentos interno, externo e deformação introduz condições de contorno altamente não-lineares, o que aumenta a complexidade da resolução associada [72, 85].

Conseqüentemente, a dedução de soluções analíticas torna-se extremamente restrita, só sendo possível sob fortes hipóteses simplificadoras [109]. Seguindo o regime de Stokes, HADAMARD [54] e RYBCZYNSKI [107] *apud* CLIFT *et al.* [24] desenvolveram uma solução analítica capaz de descrever o comportamento de uma esfera fluida, considerando que esta não sofre deformações. Na Figura 2.6 são ilustradas as linhas de corrente resultantes da solução analítica para o escoamento viscoso lento sobre uma partícula esférica, considerando diferentes razões de viscosidade. Neste limite, mesmo variando-se a razão entre as viscosidades dos meios disperso e contínuo, i.e. $\lambda = \mu_d/\mu_c$, a simetria do escoamento é mantida.

O escoamento externo induz a formação de uma circulação interna na partícula,

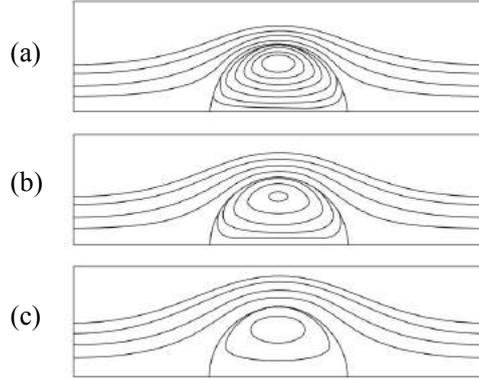


Figura 2.6: Linhas de corrente do escoamento viscoso lento sobre partículas esféricas fluidas, variando-se a razão λ entre viscosidades da fase dispersa e do meio contínuo: (a) $\lambda = 0,1$; (b) $\lambda = 1$; e (c) $\lambda = 10$. Ilustração retirada de LEAL [72].

cuja intensidade depende da razão de viscosidade. Observa-se que quanto menor a viscosidade do meio disperso em comparação com a fase contínua, ou seja, para menores razões de viscosidade, o escoamento no interior da partícula fluida se torna mais pronunciado. Para $\lambda \ll 1$, cenário típico de bolhas em meio líquido, a fase dispersa costuma apresentar um efeito viscoso negligenciável. Essa condição não só modifica o mecanismo de produção de vorticidade, como também impacta sobre a capacidade da partícula de atenuar perturbações impostas pelo meio externo [10, 78].

Conforme as propriedades dos meios externo e interno se aproximam ($\lambda \approx 1$), ambas as fases fornecem contribuições similares para o balanço de tensões cisalhantes na interface. Neste caso, tem-se um acoplamento mais forte entre as fases, como brevemente discutido na Seção 2.1. Caso a viscosidade da partícula aumente ainda mais, sua dissipação viscosa torna-se dominante e seu comportamento aos poucos se aproxima ao de uma esfera rígida. Até que no limite de $\lambda \rightarrow \infty$, o equacionamento proposto reduz à solução analítica originalmente derivada por STOKES [115].

Através da solução analítica de Hadamard e Rybczynski foi possível verificar que a formação da circulação interna reduz a resistência ao escoamento, impactando em maior velocidade relativa entre as fases em comparação com esferas sólidas [119]. No entanto, fora do limite de validade destes resultados ($Re > 1$) a previsão das características dinâmicas do sistema não é tão direta, pois a partícula pode sofrer deformações consideráveis do formato esférico, o que impacta sobre diversos aspectos do escoamento [76, 152].

Com o aumento do número de Reynolds, a partícula pode apresentar movimento secundário, com desvios de uma trajetória retilínea e oscilações em seu formato [24]. Dado o incremento na complexidade do escoamento com partículas fluidas, sua caracterização em termos de números adimensionais se torna mais difícil e menos intuitiva. Com isso, é importante entender a relação entre as diferentes forças envolvidas no cenário de estudo, como será brevemente discutido na próxima seção.

Ascensão e Sedimentação de Partículas

A compreensão sobre o comportamento fluidodinâmico de partículas em ascensão ou sedimentação por ação da gravidade é fundamental, uma vez que este cenário se aproxima da realidade de determinados processos industriais, como flotação [37] e extração líquido-líquido [39].

Partículas inicialmente em repouso tendem a ascender ou sedimentar devido à sua diferença de densidade com o meio contínuo e à ação do campo gravitacional. O diferencial de pressão hidrostática resultante é a força motriz que promove o movimento. Ao atingir o estado estacionário, a gota apresenta aceleração nula e seu movimento de ascensão ou sedimentação é caracterizado por uma velocidade terminal constante.

A mobilidade da interface induz uma circulação toroidal dentro de gotas e bolhas que é diretamente acoplada com o padrão de formação da esteira, pois pode retardar consideravelmente a separação do escoamento na interface [25]. O comportamento da esteira, por sua vez, depende do formato adquirido pela partícula e pode afetar a trajetória da mesma ao longo do tempo. Com influência de ambas as fases sobre a determinação do balanço de tensões na interface, a velocidade de ascensão ou sedimentação da partícula se torna função complexa de seu formato e trajetória.

Em contraste com partículas rígidas, a previsão das características de sistemas fluido-fluido não depende apenas de um número adimensional, pois diversos fatores podem impactar sobre seu comportamento final. Além do número de Reynolds (Re), a razão entre essas diferentes contribuições é expressa em termos de outros números adimensionais:

$$Re = \frac{\rho_c D_{eq} v_\infty}{\mu_c}, \quad Ar = \frac{\rho_c \Delta \rho D_{eq}^3 g}{\mu_c^2}, \quad Mo = \frac{\Delta \rho \mu_c^4 g}{\sigma^3 \rho_c^2}, \quad Eo = \frac{\Delta \rho D_{eq}^2 g}{\sigma}, \quad We = \frac{\rho_c D_{eq} v_\infty^2}{\sigma},$$

onde g é a gravidade e σ representa o coeficiente de tensão interfacial do sistema binário. Adicionalmente, D_{eq} é o diâmetro equivalente da esfera de mesmo volume, v_∞ é a velocidade de translação da partícula. Por fim, ρ_c , μ_c e $\Delta \rho$ referem-se a densidade e viscosidade da fase contínua, assim como o diferencial de densidade entre as fases, respectivamente.

O número de Archimedes (Ar) é frequentemente usado quando o movimento se dá pela diferença de densidade dos fluidos, representando a razão entre forças gravitacional e viscosa. Já o número de Morton (Mo) engloba apenas propriedades físicas dos fluidos, de forma que é independente de outras características da bolha ou gota e apresenta valor fixo para um determinado sistema binário.

Para descrever a intensidade de atuação da força de tensão interfacial frente às contribuições de pressões hidrostática e hidrodinâmica são utilizados os números adimensionais de Eötvös (Eo) e de Weber (We), respectivamente. A força de tensão

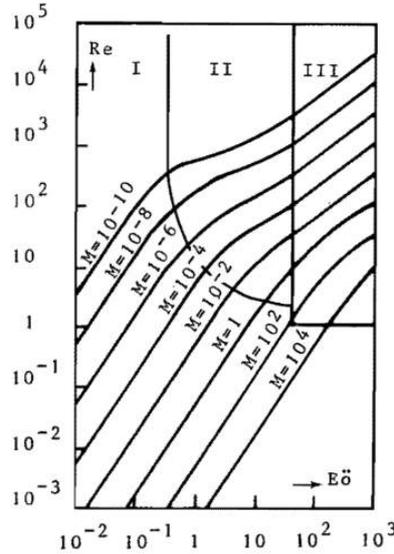


Figura 2.7: Ilustração do mapa de formatos para partículas fluidas proposto por GRACE *et al.* [51] *apud* [25]. As regiões demarcadas como I, II e III representam a forma esférica, elipsoidal e formato tipo chapéu ou *spherical-cap*.

interfacial impacta sobre a determinação do formato da partícula, uma vez que age no sentido de minimizar a área interfacial, e, assim, a energia livre.

Ambos os números de Weber e Eötvos são utilizados como medida para caracterizar o formato de partículas fluidas. A combinação de We ou Eo com o número de Re ainda é utilizada para correlacionar o formato da partícula com sua velocidade de ascensão ou sedimentação. Neste quesito, o mapa proposto por Grace [24] (Figura 2.7) é comumente aplicado como uma estimativa para descrever os regimes de formato, usando como parâmetros a combinação de Eo , Re e Mo .

De acordo com a Figura 2.7, o formato de partículas fluidas em ascensão ou sedimentação sob ação da gravidade pode ser categorizado em três regiões. Quando forças de tensão interfacial e/ou fricção subjagam as forças inerciais, i.e. $Eo \ll 1$ e/ou $Re \ll 1$, gotas e bolhas adquirem formato esférico. Fora do regime de Stokes ($Re > 1$), ao aumentar a inércia do sistema, observa-se uma tendência de maiores deformações e as partículas podem adquirir formato elipsoidal para Eo intermediários. Com sucessivos aumentos no número de Eötvos, há um progressivo e gradual achatamento da partícula e esta perde simetria nas partes fronteira e traseira gerando um formato tipo cápsula (*spherical-cap*) [109].

Apesar dos limites de transição não serem bem definidos, o mapa estabelece linhas gerais para o comportamento do formato frente a variações na magnitude das diferentes forças que atuam no sistema. A forma resultante da partícula influencia no movimento de ascensão ou sedimentação e maiores deformações acarretam em maior resistência ao escoamento, agindo no sentido de reduzir a velocidade terminal. Além disso, grandes deformações geralmente estão atreladas a movimento secundário

da partícula, caracterizado por oscilações no formato e/ou desvios na trajetória.

Gotas e bolhas esféricas seguem um caminho retilíneo, traçado na direção de ação da gravidade. Conforme adquirem um formato elipsoidal, as partículas comumente sofrem oscilações periódicas de forma e há maior tendência de percorrem um caminho irregular, com trajetória espiralar ou helicoidal [35, 76]. A instabilidade na trajetória não necessariamente tem origem nas oscilações de forma, podendo também estar relacionada com o surgimento de assimetrias no escoamento devido ao comportamento da esteira na traseira das partículas [78].

O entendimento da relação entre os mecanismos de oscilação de formato, desvios na trajetória e instabilidades na esteira ainda é limitado, mesmo com os progressos realizados nas últimas décadas [32, 42, 78]. Certamente, um fator complicador é que se tratam de sistemas muito sensíveis, nos quais uma pequena quantidade de impurezas pode ser suficiente para interferir na mobilidade interfacial, afetando o movimento da partícula e o escoamento em seu entorno.

Quando contaminantes tensoativos estão presentes em baixas concentrações, o movimento de ascensão ou sedimentação tende a arrastar o material adsorvido para a traseira da partícula, gerando uma distribuição interfacial não-uniforme. Estes gradientes de concentração implicam em forças tangenciais que se opõe ao movimento, de forma que a circulação interna é enfraquecida e escoamento interfacial pode até mesmo ser paralisado. Nesse contexto, é comum encontrar na literatura uma classificação para as interfaces com relação a mobilidade:

- (i) Interface imóvel - esta condição caracteriza sistemas com fase dispersa muito viscosa ou quando há alta concentração de surfactante no meio [59, 150]. Neste caso, a partícula apresenta comportamento similar ao de esfera rígida;
- (ii) Interface parcialmente móvel - condição intermediária, em que existe algum fator, como a presença de surfactantes, que afeta a mobilidade mas não é suficiente para cessar completamente o movimento tangencial [108];
- (iii) Interface completamente móvel - a mobilidade total caracteriza sistemas nos quais a interface é efetivamente livre de tensão de cisalhamento [22].

Pela discussão levantada, percebe-se que o cuidado dispendido com a pureza do sistema reflete diretamente sobre a velocidade terminal das partículas [79, 119]. Por outro lado, o grau de contaminação não é facilmente caracterizável, o que pode até mesmo gerar divergências entre dados experimentais de diferentes grupos para um determinado sistema de análise [139]. Estes fatos também repercutem sobre o uso de correlações empíricas, pois a representatividade das mesmas pode ser comprometida frente a variações não caracterizadas do nível de mobilidade interfacial.

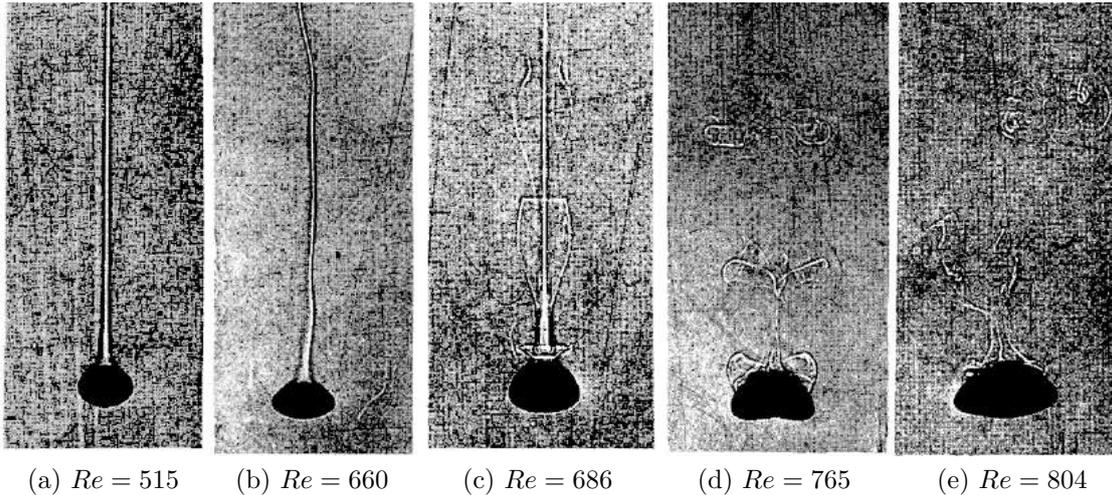


Figura 2.8: escoamento em torno de uma gota de nitrobenzeno sedimentando em água ($Mo = 8,8 \times 10^{-11}$) para diferentes números de Reynolds. Resultados de WINNIKOW e CHAO [144].

A seguir tratam-se de algumas observações experimentais realizadas em sistemas líquido-líquido, as quais irão auxiliar na escolha do cenário a ser investigado por simulações numéricas.

Observações Experimentais para Gotas

Na literatura são encontrados estudos experimentais que envolvem a dinâmica de gotas ascendendo ou sedimentando por ação da gravidade. Dificuldades no monitoramento de propriedades são usuais, principalmente no que diz respeito a características dependentes da visualização do escoamento, como o padrão de circulação interna e o comportamento da esteira.

Um trabalho referência no assunto é o de WINNIKOW e CHAO [144], no qual se avaliou o comportamento da esteira e a separação do escoamento para diferentes sistemas líquido-líquido. Nas Figuras 2.8 e 2.9 são apresentadas configurações de esteira variando-se o número de Reynolds para duas combinações de fluido. Primeiramente, observa-se que o desenvolvimento da esteira ocorre em números de Re elevados, como esperado para partículas fluidas com circulação interna. Comparando os casos com diferentes números de Morton, verifica-se que a natureza da esteira não depende só do número de Reynolds, mas também é influenciada pelas propriedades da fase contínua e dispersa.

Os autores observaram que dois regimes categorizam as configurações da esteira formada atrás das gotas. No primeiro, não ocorre oscilação e a esteira formada é estacionária. No outro regime, observa-se oscilação e descarga periódica de vortividade. Apesar de terem se preocupado com a pureza inicial dos fluidos, os autores

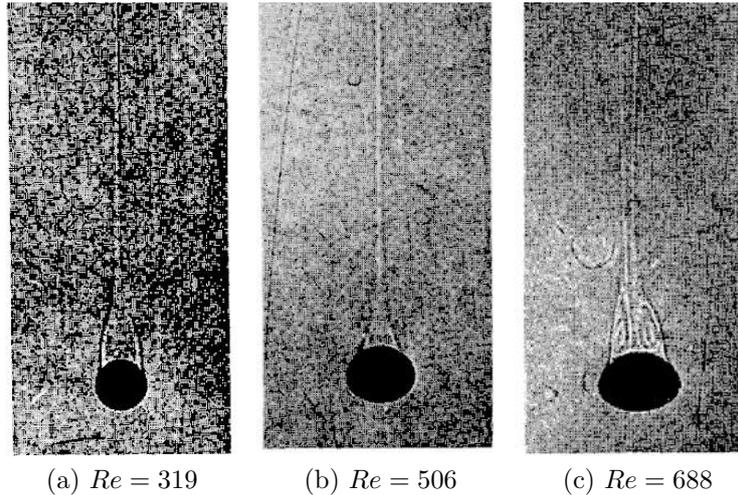


Figura 2.9: escoamento em torno de uma gota de m-nitrotolueno sedimentando em água ($Mo = 4,7 \times 10^{-11}$) para diferentes números de Reynolds. Resultados de WINNIKOW e CHAO [144].

fazem ressalvas com relação aos resultados. Ressalta-se que a configuração da esteira depende da taxa de geração e difusão de vorticidade que, por sua vez, é fortemente influenciada pelo comportamento interfacial. Porém, para visualizar o escoamento, foi utilizada uma técnica de tingimento (*dye-technique*) que deve alterar as propriedades interfaciais.

Na verdade, capturar detalhes do escoamento experimentalmente sem perturbar a própria dinâmica que é alvo de investigação ainda é um desafio. Uma abordagem mais consistente é aquela que, num primeiro momento, investiga o sistema puro, para depois avaliar efeitos de contaminação sobre o escoamento. Assim, outras medidas experimentais, como velocidade terminal, formato e trajetória, são favorecidas pois permitem um controle maior sobre os graus de liberdade do sistema.

Visando a reprodutibilidade na investigação do processo de extração líquido-líquido, a Federação Européia de Engenharia Química definiu três sistemas padrão, formados pela combinação de água com os componentes orgânicos tolueno, n-butil acetato e n-butanol. Tais configurações foram respectivamente selecionadas como representativas de sistemas com alta, média e baixa tensão interfacial e tem suas propriedades físicas apresentadas na Tabela 2.1. Seguindo estas recomendações, um número significativo de trabalhos numérico-experimentais tem sido desenvolvido em torno desses sistemas [11, 12, 15, 16, 38–41, 132–140].

Nestes trabalhos, são reportados dados experimentais de velocidade de ascensão para as três configurações, obtidos para faixas de diâmetro similares ($D = 1–6 \text{ mm}$). Para se ter informação sobre o formato das gotas neste intervalo de diâmetros, os resultados podem ser exibidos em termos de números adimensionais no mapa de GRACE *et al.* [51], como ilustrado na Figura 2.10. Enquanto gotas de tolueno

Tabela 2.1: Propriedades físicas para sistemas líquido-líquido com três níveis diferentes de tensão interfacial, como descrito por BÄUMLER *et al.* [11].

	ρ_A [kg/m ³]	μ_A [mPa s]	ρ_B [kg/m ³]	μ_B [mPa s]	σ [mN/m]	Mo
Tolueno _A /Água _B	862,30	0,55	997,02	0,89	35,00	$1,95 \times 10^{-11}$
N-Butil Acetato _A /Água _B	877,19	0,82	996,60	0,90	14,00	$2,82 \times 10^{-10}$
N-Butanol _A /Água _B	845,44	3,28	986,51	1,39	1,63	$1,22 \times 10^{-6}$

e n-butil acetato transitam entre formatos esférico e elipsoidal, há um aumento considerável no número Eötvos para o sistema de menor tensão interfacial, sugerindo maiores deformações para gotas de n-butanol na mesma faixa de tamanho.

Sobretudo para o sistema de alta tensão interfacial, i.e. água/tolueno, vem sendo realizada uma investigação sistemática [133–139] com objetivo de caracterizar a influência do processo de transferência de acetona sobre a ascensão da gota. Para fundamentar esta avaliação, primeiramente se trata do sistema puro, aplicando protocolos experimentais que dispendem de extrema cautela no controle de contaminação do sistema. Com isso, estes trabalhos fornecem uma interessante base de comparação para as avaliações numéricas do atual desenvolvimento.

A Figura 2.11 contempla os dados experimentais de velocidade de ascensão, reportados para gotas de tolueno ascendendo em água sob condições purificadas. Em particular, apresentam-se duas velocidades para cada diâmetro, contemplando valores máximo e médio que são definidos de acordo com perfis transientes de ascensão,

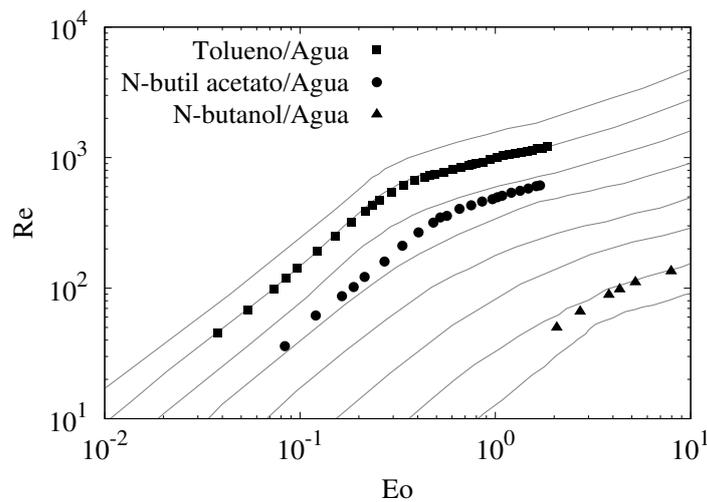


Figura 2.10: Ilustração do mapa de formatos [24], destacados os resultados experimentais para: (a) tolueno/água [139]; (b) n-butil acetato/água [11]; e (c) n-butanol/água [16].

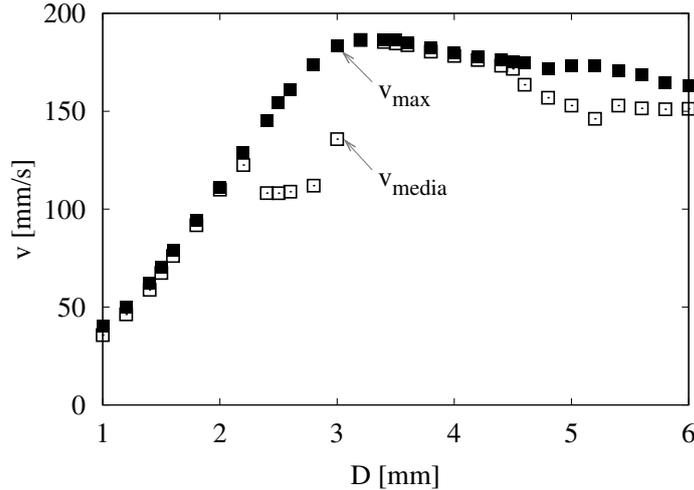


Figura 2.11: Dados experimentais referentes às velocidades de ascensão máxima e média para gotas de tolueno em água sob condições purificadas. Resultados de WEGENER *et al.* [139].

como esquematizado na Figura 2.12. Enquanto a velocidade máxima v_{max} é estabelecida no período inicial de aceleração da gota, a velocidade média v_{media} leva em consideração a distância total percorrida pela gota a partir do segundo momento de aceleração até se atingir a parte superior da coluna.

Inicialmente, avaliam-se as tendências gerais em relação à velocidade máxima de ascensão v_{max} (Figura 2.11). Partindo dos menores diâmetros, incrementos no tamanho da gota acarretam diretamente em maiores velocidades de ascensão, uma vez que a intensidade da força motriz depende do volume. Com progressivos aumentos no diâmetro, gotas inicialmente esféricas sofrem deformações cada vez maiores em seu formato. Como maiores deformações estão atreladas à resistência ao escoamento, eventualmente se atinge um pico na velocidade de ascensão ($D \approx 3,2 \text{ mm}$). Deste ponto em diante, mesmo com aumentos no diâmetro, v_{max} permanece praticamente inalterada, pois o ganho na força motriz não é mais suficiente para ultrapassar a resistência gerada pela deformação.

Considerando as velocidades máxima e média, diferentes comportamentos são observados frente a variações no tamanho da gota. Para diâmetros pequenos ($D \leq 2 \text{ mm}$), as velocidades v_{max} e v_{media} são bem próximas, indicando que as menores gotas rapidamente atingem um estado estacionário após a aceleração inicial. Essa tendência também é verificada para a faixa de diâmetros de $3,0 < D < 4,5 \text{ mm}$, onde as velocidades de ascensão máxima e média das partículas praticamente se equivalem. Contudo, gotas nos intervalos de $2,2 \leq D \leq 3,0 \text{ mm}$ e $4,5 \leq D \leq 6,0 \text{ mm}$ exibem comportamentos transientes peculiares que resultam em valores médios de velocidade diferentes de v_{max} .

Para o limite superior de diâmetros ($D \geq 4,5 \text{ mm}$), verifica-se a ocorrência de

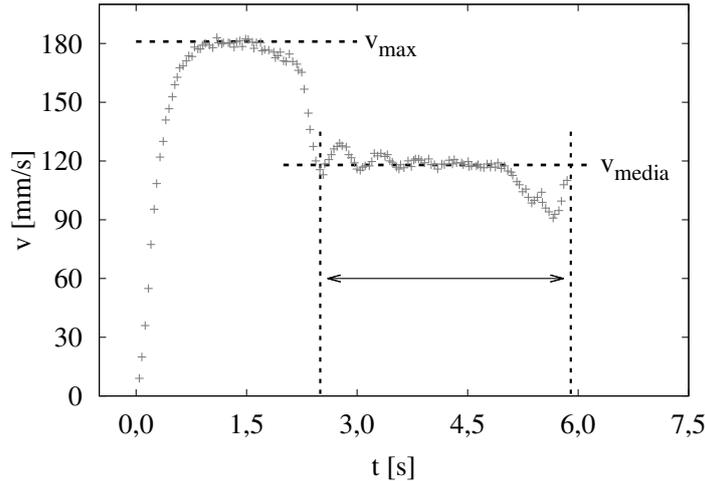


Figura 2.12: Ilustração de velocidades máxima e média de acordo com perfil transiente de ascensão para $D = 3,0 \text{ mm}$. Resultados de WEGENER *et al.* [139].

uma transição entre os regimes não-oscilante e oscilante, como sugerido por WINNIKOW e CHAO [144]. Esta transição é caracterizada por números de Weber próximos de um valor crítico, em torno de $We_{cr} \approx 4$. Com isso, a partir de um determinado tamanho, o formato da gota torna-se instável e pode ocorrer o desprendimento de vórtices [11, 67, 144]. Este comportamento está em concordância com análises visuais (Figura 2.13), onde se verifica que, para diâmetros acima de $D = 4,5 \text{ mm}$, a gota adquire movimento secundário e se instaura uma instabilidade no seu formato com subsequente desvio da trajetória retilínea.

Na faixa intermediária de $2,2 \leq D \leq 3,0 \text{ mm}$, os autores constataram que as gotas sofrem uma queda brusca na velocidade de ascensão e, então, passam a oscilar em um patamar mais baixo, de forma que a velocidade média de ascensão é significativamente menor do que a máxima. Esses resultados são tratados como inesperados pelos autores, visto que We ainda é pequeno para se observar deformação significativa no formato. Para estes diâmetros, o número de Weber calculado com a velocidade final de ascensão resulta em valores entre $0,9 < We < 1,6$. Os autores especulam que essas oscilações de velocidade podem estar associadas com efeitos de ressonância, mas não exploram a questão com mais profundidade.

Para o diâmetro limítrofe $D = 3,0 \text{ mm}$, ainda se constata uma bifurcação no perfil de velocidade, sugerindo que a gota pode seguir dois regimes hidrodinâmicos diferentes, com ou sem oscilação na velocidade de ascensão. Observações similares de bifurcamento também foram realizadas em outros cenários com bolhas, como descrito em TOMIYAMA *et al.* [120] e WU e GHARIB [147], nos quais se suspeita do efeito da deformação inicial sobre o regime hidrodinâmico a ser seguido pela partícula. Esta hipótese é averiguada com um estudo numérico em ENGBERG e KENIG [39], cujos resultados indicam que uma assimetria no formato inicial é crucial

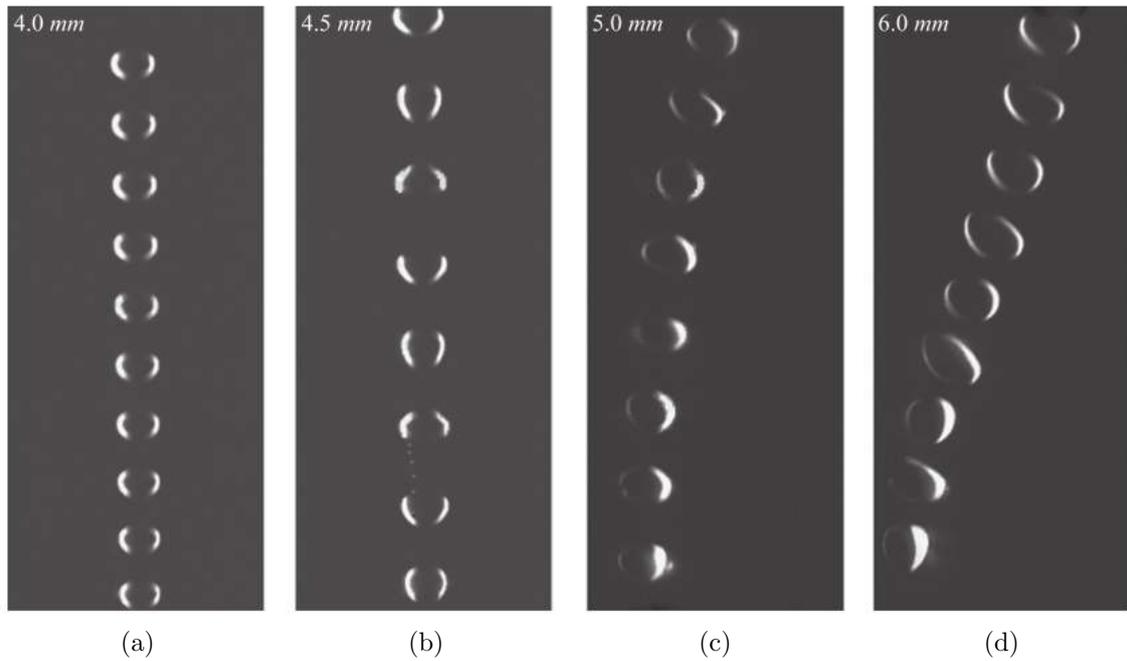


Figura 2.13: Trajetória de gotas de tolueno imersas em água em diferentes diâmetros: (a) $D = 4,0 \text{ mm}$; (b) $D = 4,5 \text{ mm}$; (c) $D = 5,0 \text{ mm}$; (d) $D = 6,0 \text{ mm}$. Resultados de BÄUMLER *et al.* [11].

para que a gota siga um regime oscilante.

A presente tese tem como um dos objetivos explorar o comportamento fluido-dinâmico de gotas ascendendo ou sedimentando em meio líquido, obtendo detalhes dos campos de pressão e velocidade através de simulações numéricas. Em particular, a estrutura numérica desenvolvida será aplicada para investigar o sistema água/tolueno purificado na mesma faixa de diâmetros em que são observados os fenômenos previamente descritos.

Capítulo 3

Modelagem Matemática

O grande desafio na modelagem e representação numérica de escoamentos dispersos é a diferença nas escalas de comprimento dos efeitos dinâmicos presentes, como ilustrado previamente na Figura 2.1. Devido a esta característica, surgiram inúmeras abordagens de representação para tais sistemas, cada uma com sua particularidade e conveniência para tratar dos diversos mecanismos de interação [112, 146].

Um dos modelos mais elementares para esta representação se baseia na descrição molecular do sistema, cujo comportamento obedece a leis da mecânica estatística. Simulações de dinâmica molecular podem trazer informações relevantes sobre propriedades da interface, ou mecanismos de interação que decorrem na região interfacial [57, 69]. Todavia, o esforço computacional requerido por esta abordagem geralmente limita sua aplicação às menores escalas de sistemas multifásicos, cenário representado pela Figura 2.1.a.

Visando uma descrição mais abrangente do sistema, uma condição simplificadora amplamente adotada é a hipótese do contínuo, na qual o fluido é modelado como uma distribuição contínua de matéria. De acordo com esta hipótese, assume-se que é possível desenvolver uma descrição macroscópica representativa de fenômenos da microescala, de forma que a dinâmica do sistema pode ser representada por princípios fundamentais de conservação [72, 113]. Apesar de se tratar de um modelo menos rigoroso que o molecular, a abordagem contínua possibilita considerar de maneira simples fenômenos macroscópicos, como o escoamento de uma fase fluida.

A hipótese do contínuo é uma aproximação razoável quando as interações moleculares podem ser descritas apenas em termos de propriedades macroscópicas sem trazer prejuízo à representação do sistema real. Para caracterizar os limites de validade desta hipótese, deve-se avaliar a importância de interações moleculares discretas frente à escala de comprimento sob análise, que pode ser estimada através do número de Knudsen (Kn) [76].

O número de Knudsen é definido pela razão entre o caminho livre médio e a escala de comprimento relevante para o escoamento. Quando esta proporção tem

valores muito pequenos, a hipótese do contínuo é uma boa aproximação, pois a escala de interesse engloba um número considerável de colisões moleculares. Conforme se aumenta Kn , podem surgir efeitos moleculares que impactam sobre a validade da condição de não-deslizamento [75]. Caso a escala analisada seja da ordem do percurso livre médio, a hipótese do contínuo perde sua validade e aspectos não-contínuos devem ser considerados, uma vez que o comportamento é dominado por colisões moleculares individuais.

Quanto à natureza do fluido, suas características moleculares também tem influência sobre o limite inferior de validade da aproximação. Enquanto que para líquidos o caminho livre médio é da ordem do diâmetro molecular, para gases este percurso pode chegar a centenas de diâmetros moleculares. Desta forma, uma resolução representativa para líquidos é menor do que para gases, visto que em fases condensadas as moléculas estão relativamente mais próximas. Isso permite avaliar sistemas líquidos sob a perspectiva do contínuo até diminutas escalas [130].

Em se tratando do caráter multifásico de um sistema, deve-se garantir adicionalmente uma representação consistente das interações entre as fases. Ainda que o conceito de contínuo não se aplique estritamente à região interfacial, para as escalas usuais de avaliação macroscópica, a interface pode ser satisfatoriamente representada por uma superfície discreta. Esta consideração permite utilizar equações de conservação para cada fluido e a interação entre fases é contabilizada através do movimento e deformação da superfície de contato. No entanto, o custo computacional atrelado à necessidade de acompanhamento da interface costuma limitar a aplicação desta abordagem a poucas partículas [146].

Portanto, ao abordar a dinâmica de um sistema multifásico como contínua e de interface bem definida, a caracterização do movimento de uma gota individual (Figura 2.1.b) assim como da aproximação de duas partículas (Figura 2.1.c) são factíveis. Em relação ao fenômeno particular de coalescência (Figura 2.1.c), tornam-se necessárias considerações adicionais para contabilizar efeitos intermoleculares que surgem na aproximação de duas regiões interfaciais [21, 23].

Para descrever o último cenário apresentado na Figura 2.1.d, que contempla o escoamento de grande quantidade de partículas, uma representação habitual consiste na promediação das equações de conservação [43]. Apesar de também partir da consideração do contínuo, ao aplicar uma abordagem média para prever o escoamento multifásico, a natureza discreta da fase dispersa não é detectada [19]. Neste caso, o acoplamento entre as fases passa a ser modelado em termos de forças interfaciais e conceitos como arrasto, sustentação e massa virtual devem ser introduzidos para auxiliar na representação consistente dos mecanismos de interação.

No presente desenvolvimento, busca-se descrever o escoamento de duas fases líquidas imiscíveis que interagem entre si através de uma interface bem definida.

Com base na discussão apresentada, temos indicativos do potencial de equacionamentos instantâneos para investigar este cenário, trazendo informações sobre forças interfaciais. O campo de escoamento detalhado produzido por esta representação permite explorar comportamentos particulares de escoamentos multifásicos e extrair informações que possibilitem a criação de abordagens quantitativas. Não obstante, a descrição da interação entre as fases requer o rastreamento ou captura da interface, o que pode ser feito através de diferentes estratégias, como será brevemente discutido na próxima seção.

3.1 Representação da Interface

A despeito de diferenças expressivas na força de interação dos sistemas líquido-líquido e gás-líquido (conforme discussão da Seção 2.1), algumas dificuldades numéricas na predição da dinâmica interfacial são compartilhadas por ambos os casos. Como exemplo temos que o formato da interface deve ser determinado como parte da solução do escoamento, uma vez que interfaces fluidas podem deformar em resposta a tensões tangenciais.

Além disso, a deformação depende não só das forças hidrodinâmicas advindas do seio das fases, mas também da tensão interfacial que atua como uma força tênsil no sentido de manter a superfície com curvatura constante. Assim, a correta predição da evolução da interface requer uma representação precisa de sua posição e curvatura, bem como da força de tensão interfacial [81, 92].

Em termos da descrição de uma interface bem definida, talvez a categoria mais difundida seja a de captura de interface ou *interface-capturing*, que considera a interface como imersa em uma malha computacional fixa. Nesta classe, a dinâmica da interface é acompanhada pela evolução de pontos ou funções marcadoras [123]. Em alternativa, há outra abordagem, também conhecida por *interface-tracking*, que se baseia no rastreamento da interface através de uma malha computacional móvel. Desta forma, a evolução da interface é representada diretamente por uma malha superficial de espessura nula que pode se mover e deformar com o escoamento [98].

Na Figura 3.1 destaca-se a diferença na representação da superfície divisora para uma malha computacional fixa e uma malha deformável com discretização da interface. Maiores detalhes sobre ambas estratégias são abordados a seguir.

3.1.1 Captura de Interface

Nesta abordagem, a posição da interface é identificada através de uma função ou pontos marcadores, que indicam quando os volumes da malha computacional pertencem a uma ou outra fase. O marcador, genericamente denominado por \mathcal{H} , deve

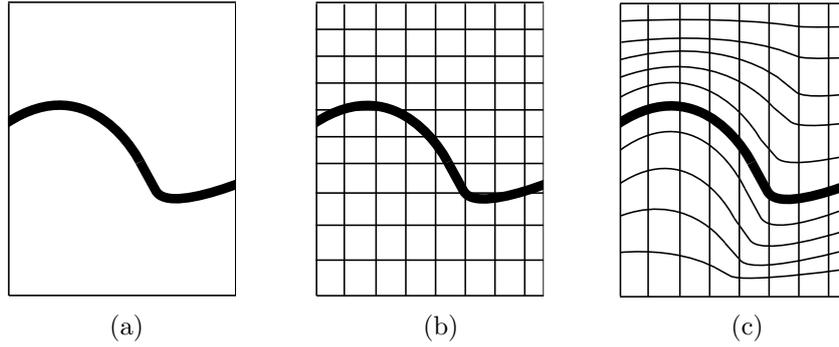


Figura 3.1: Posicionamento da superfície divisora (a), ilustrando sua representação através de: (b) malha computacional fixa; (c) malha computacional deformável com discretização da interface.

acompanhar o escoamento dos fluidos, de forma que seu próprio movimento é reflexo da solução de uma equação de advecção, representada por:

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathcal{H} = 0 . \quad (3.1)$$

Este tratamento possibilita que as equações de conservação sejam aplicadas em todo domínio computacional como se tratassem de apenas uma fase, e por isso, também é comumente chamado de modelo de um fluido. Apesar de sua aparente simplicidade, a atualização do marcador pode se traduzir como uma difícil tarefa, pois se deve garantir uma interface bem definida ao mesmo tempo que problemas inerentes à resolução da advecção pura, como difusão e oscilação numéricas, devem ser contornados.

A tensão interfacial pode ser considerada através de funções tipo delta de Dirac, de forma que a contabilização de seu efeito detém-se à interface [123]. Assim, as condições que representam a transferência de propriedades entre as fases são garantidas implicitamente nos volumes compartilhados pelos dois fluidos. No entanto, uma representação adequada da força de tensão interfacial exige acurácia no cálculo da curvatura, o que, por sua vez, demanda uma previsão satisfatória do formato geométrico da interface [2, 55]. As principais estratégias utilizadas para identificar a posição da interface são descritas em seguida (Figura 3.2).

Volume-of-fluid

A técnica *Volume-of-fluid (VOF)* [56] define a função marcadora com base na fração de volume de fase em uma célula da malha computacional. Consequentemente, esta função é responsável por distinguir a qual das fases pertence um determinado volume de controle e apresenta valores nulo ou unitário, i.e. $\mathcal{H} = 0$ ou $\mathcal{H} = 1$, em células que se encontram no seio das fases.

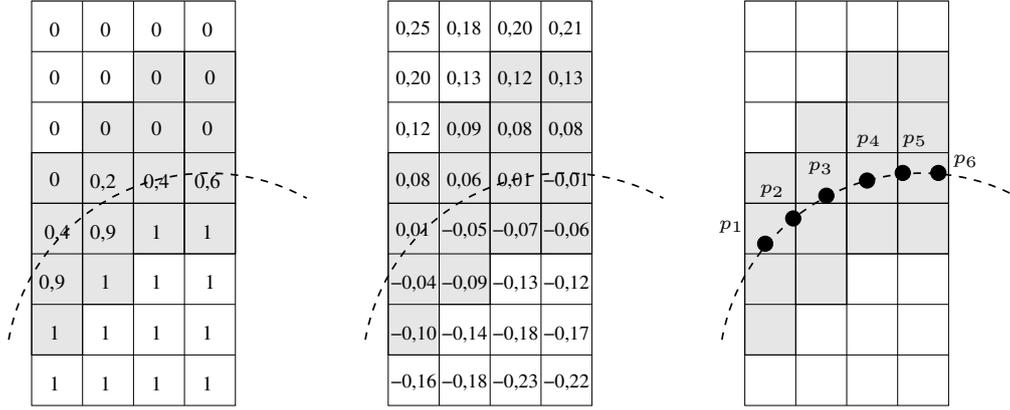


Figura 3.2: Ilustração esquemática de princípios para identificação da posição da interface através de diferentes estratégias: (a) *Volume-of-fluid*; (b) *Level-set* e (c) *Front-tracking*.

Enquanto isso, valores intermediários de fração volumétrica ($0 < \mathcal{H} < 1$) indicam a coexistência de duas fases, e, portanto, demarcam os volumes de controle que contém a interface. Para identificar o formato geométrico da superfície divisora, é necessária a reconstrução da interface utilizando algoritmos específicos como *SLIC* (*Simple Line Interface Calculation*) ou *PLIC* (*Piecewise Linear Interface Calculation*) [52, 98, 146].

Um dos principais atrativos desta abordagem para formulações incompressíveis é que a capacidade de conservar massa está diretamente relacionada com a conservação do marcador [49]. Devido a este significado físico atribuído à função indicadora, torna-se particularmente importante ter controle sobre eventuais oscilações na advecção de seu campo, uma vez que se deve garantir que o valor desta variável não extrapole o intervalo estabelecido em $0 \leq \mathcal{H} \leq 1$.

Level-set

Em contraste com o método *VOF*, em que a função marcadora é idealmente descontínua na interface, a metodologia *Level-set* [89] busca representar a interface por uma função contínua. Para tal, considera-se o marcador \mathcal{H} como a distância da superfície de contato e o sinal positivo ou negativo da função, i.e. $\mathcal{H} < 0$ ou $\mathcal{H} > 0$, indica em qual dos lados da interface a célula se encontra. Neste contexto, a interface em si é representada pelo nível zero da função, isto é, $\mathcal{H} = 0$.

Como a estratégia *Level-set* proporciona a transição suave de uma fase para outra, propicia-se um cálculo preciso das variáveis geométricas na interface, e.g. vetores normais e curvatura [2, 73]. No entanto, mesmo que não demande uma reconstrução complexa do formato interfacial, esta técnica requer que o marcador seja reinicializado de tempos em tempos. A reinicialização se torna essencial para

preservar a função distância e conservar massa, já que a conservação da função indicadora e da massa não são estritamente equivalentes para este caso [77].

Front-tracking

Nessa terceira categoria aplica-se uma estratégia distinta para captura da interface, substituindo a função indicadora por pontos marcadores. Estes pontos são utilizados para criar uma estrutura de elementos representativa da interface, ainda que seu movimento seja capturado em uma malha computacional fixa [123, 128]. Com isso, o cálculo de propriedades geométricas sobre a frente divisora é facilitado.

O princípio fundamental da formulação, i.e. modelo de um fluido, permanece inalterado e as equações de conservação que representam o escoamento bifásico continuam sendo resolvidas na malha computacional fixa. Com a finalidade de movimentar a interface, o campo de velocidade resultante da conservação de *momentum* deve ser interpolado para a posição dos pontos marcadores, permitindo que estes sejam movimentados diretamente com a velocidade dos fluidos [145].

Em contrapartida, a força de tensão interfacial deve ser transferida seguindo o caminho contrário, ou seja, a partir da frente móvel para a malha fixa. Com isso, a comunicação entre as partes torna-se um ponto chave da abordagem e deve ser estabelecida para garantir a conservação da quantidade transferida [98]. Além disso, também é necessário um tratamento específico para lidar com mudanças na estrutura da interface, como as originadas por processos de quebra ou coalescência.

Conforme apresentado, cada uma das estratégias dispõe de pontos positivos e negativos para representação de sistemas bifásicos com interface bem definida. Apesar de favorecerem uma implementação inicialmente simples, a captura de interface pode não ser adequada para problemas em que o cálculo da força de tensão interfacial é imprescindível [28, 55, 82]. De forma geral, isto ocorre porque a acurácia de previsão da interface está relacionada ao tamanho da malha computacional fixa e são necessárias malhas extremamente finas para o cálculo acurado dos termos de curvatura [59].

Inúmeras variantes destas abordagens vem sendo desenvolvidas para melhorar determinados aspectos das formulações originais [8, 53, 105], ou incorporar os pontos fortes de diferentes estratégias em um só procedimento [7, 9, 74, 80]. Além de trabalhos em torno da implementação de melhorias nos métodos, aplicações dos mesmos para problemas multifásicos também são encontradas na literatura [6, 58, 65, 91]. Apesar de notáveis avanços nesta categoria, a premissa de uma malha computacional fixa dificulta a representação de casos onde os efeitos de tensão interfacial são dominantes, que é um cenário usual para sistemas dispersos de fluidos.

3.1.2 Rastreamento de Interface

Esta segunda categoria favorece naturalmente uma representação precisa da posição de contato entre as fases, uma vez que a malha volumétrica se conforma à interface (Figura 3.1.c). A superfície divisora, por sua vez, pode ser discretizada diretamente por uma malha superficial, permitindo a aplicação de princípios de conservação a cada fase individualmente. Assim, possibilita-se a implementação direta da interação na interface sem qualquer suavização das propriedades da fase, o que contribui para um cálculo acurado do balanço interfacial [124].

Em vista disso, a abordagem é extremamente interessante para investigar o comportamento de gotas individuais, pois se trata de um cenário em que há uma forte dependência entre o formato da interface e o escoamento ao seu redor. Neste caso, a dificuldade atrelada à resolução do escoamento bifásico deixa de estar associada com a identificação da posição da interface e é transferida para a discretização e movimentação da malha superficial. Como consequência, esta estratégia requer tratamentos numéricos específicos para lidar com a malha computacional, que podem se tornar particularmente complexos em caso de grandes deformações na interface.

A quantidade de estudos explorando o rastreamento da superfície divisora é bem menos expressiva em comparação com a estratégia de captura de interface. Como a discretização do domínio computacional é um ponto chave neste caso, estes estudos podem ser classificados de acordo com a metodologia de discretização aplicada.

Tratando-se de discretização por elementos finitos, alguns exemplos são os trabalhos de [5, 48, 127, 131, 149]. O desenvolvimento de ANJOS *et al.* [5] inclui uma metodologia numérica para atualização de malha que permite deformações significativas na interface. ANJOS *et al.* [5] demonstra a capacidade da metodologia apresentando simulações tridimensionais de escoamentos bifásicos. Casos teste envolvendo bolhas também são apresentados por YANG e PROSPERETTI [149], cujo estudo propõe a utilização de coordenadas alinhadas com a interface para melhorar a precisão de cálculos axissimétricos. Adicionalmente, tópicos específicos como fluidos viscoelásticos e surfactantes são abordados em [48, 131].

Além da técnica de elementos finitos, o rastreamento de interface também pode ser implementado em conjunto com o método de volumes finitos. Estudos que se destacam neste quesito são de Tuković e co-autores [99, 100, 125, 126, 142, 143], e do grupo de Schmidt [27–29, 83, 101–104]. QUAN e SCHMIDT [103] adotam uma formulação de função fluxo em malhas tetraédricas não-estruturadas utilizando um algoritmo de adaptação local para tratar deformações na malha. TUKOVIĆ e JASAK [126] propõem a utilização do método de áreas finitas para tratar de termos interfaciais e aplicam uma técnica de movimentação de malha que não interfere com a conectividade dos nós.

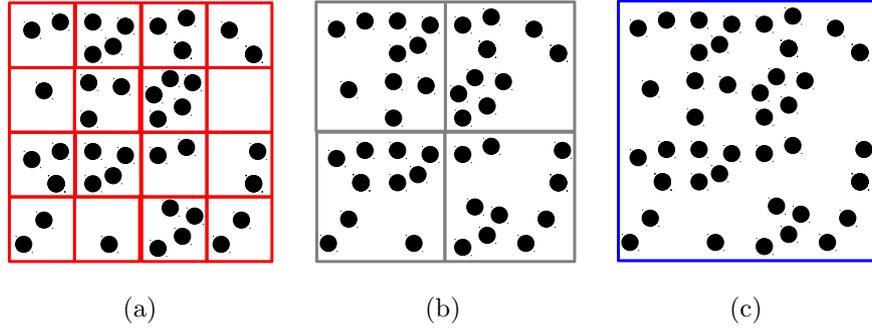


Figura 3.3: Ilustração esquemática do volume de controle utilizado para obtenção das propriedades macroscópicas: (a) volume muito pequeno, propriedades flutuam e não são contínuas; (b) volume representativo da escala de interesse; (c) volume muito grande, não é suficiente para descrever a dinâmica da escala de interesse.

Com base nos argumentos apresentados, o presente trabalho adota a técnica de rastreamento para representar o movimento e deformação de interfaces. Os detalhes da metodologia numérica para discretização e tratamento de malha serão apresentados posteriormente no Capítulo 4. Por ora, tem-se determinada a estrutura básica da modelagem, cuja formulação matemática é descrita em sequência.

3.2 Formulação

Conforme discutido anteriormente, o alicerce da modelagem no presente desenvolvimento é a aproximação do contínuo [17]. Embasado nesta hipótese, o movimento do fluido é descrito pela aplicação de princípios de conservação a volumes de controle em relação a propriedades macroscópicas, como massa e quantidade de movimento.

As propriedades macroscópicas podem ser vistas como médias volumétricas de variáveis moleculares, de forma que estas propriedades serão representativas ao utilizar um volume de análise grande o suficiente para garantir a continuidade da característica molecular mas ao mesmo tempo pequeno em comparação com a escala de comprimento macroscópica que se deseja analisar [72]. Este conceito se aplica aos volumes de controle que representam o seio das fases, sendo representado na Figura 3.3 com volumes de controle de diferentes tamanhos.

Como consequência desta hipótese, é necessário determinar um tratamento para a representação do transporte das propriedades macroscópicas através dos volumes de análise. Neste quesito, podem ser distinguidos dois mecanismos de transferência: um associado com a velocidade macroscópica, chamado de transporte convectivo, e outro relacionado com as flutuações moleculares, descrito como a contribuição difusiva. Assim, o fluxo total de qualquer quantidade vai ser dado pela soma dos fluxos moleculares e convectivos [121].

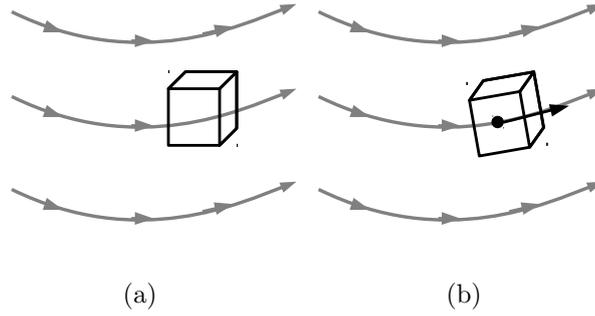


Figura 3.4: Abordagens clássicas para formulação matemática do problema, com relação a movimentação dos volumes de controle: (a) Euleriana, com volume de controle fixo; (b) Lagrangeana, com volume de controle se movendo com a mesma velocidade do fluido.

Para o equacionamento básico, parte-se de dois princípios básicos da física: *(i)* a massa do sistema sempre se conserva (Equação 3.2); *(ii)* a resultante das forças atuando sobre o sistema determina a aceleração do mesmo, através da segunda Lei de Newton (Equação 3.3).

$$\left(\frac{dm}{dt}\right)_{\text{sistema}} = 0 . \quad (3.2)$$

$$\left(\frac{d(m\mathbf{v})}{dt}\right)_{\text{sistema}} = \sum_i \mathbf{F}_i . \quad (3.3)$$

Definidas as equações básicas que vão reger o problema, o primeiro passo é converter a análise do sistema geral para a avaliação em volumes de controle genéricos (*VC*). Para tal, é preciso relacionar a derivada temporal da propriedade com a correspondente mudança na região de avaliação. Claramente, o resultado desta transformação vai depender da representação selecionada para os *VC*'s.

A escolha da formulação matemática para descrever os volumes de análise está diretamente relacionada com o tratamento adotado para representação da interface, de forma que ambos devem ser compatíveis. Como cada formulação tem suas particularidades, na Figura 3.4 são ilustradas as duas abordagens clássicas, que diferem entre si pelas características de movimentação dos volumes de controle.

Usualmente, na abordagem Euleriana, o volume de controle é fixo no espaço e o fluido se move em relação à malha computacional. Para descrever corretamente a movimentação do fluido no espaço e garantir a conservação das propriedades macroscópicas torna-se necessária a contabilização de fluxos superficiais nos *VC*'s [141]. Em contraponto, a abordagem Lagrangeana objetiva acompanhar fielmente o movimento do fluido no espaço com modificações correspondentes na malha computacional, podendo até mesmo implicar em deformações nos volumes de controle [17, 111].

Estas duas abordagens clássicas são amplamente utilizadas para relacionar o

domínio computacional com a dinâmica real dos fluidos e apresentam vantagens individuais a depender da situação de interesse. No presente trabalho, aplica-se uma combinação destes dois referenciais através de uma abordagem mista chamada de Lagrangeana-Euleriana Arbitrária (*Arbitrary Lagrangean-Eulerian - ALE*).

Nesta abordagem híbrida, o volume de controle possui uma velocidade arbitrária, de forma que pode seguir o fluido de maneira puramente lagrangeana ou apresentar movimento e deformação distintas do fluido. Esta estratégia acarreta em maior versatilidade na movimentação dos VC 's, possibilitando o rastreamento direto da interface com deformações moderadas no restante da malha computacional [34].

Com base nesse tratamento misto, aplica-se a lei de conservação de massa para um volume de controle genérico delimitado por uma superfície fechada S . Obtém-se como resultado a igualdade entre a variação temporal da densidade ρ integrada no volume de controle e o fluxo de massa relativo atravessando S , que é caracterizado pelo movimento do fluido com velocidade \mathbf{v} subtraído do deslocamento das faces com velocidade arbitrária \mathbf{v}_S :

$$\frac{d}{dt} \left[\int_{VC} \rho \, dV \right] + \oint_S \rho \, \mathbf{n} \cdot \underbrace{(\mathbf{v} - \mathbf{v}_S)}_{\mathbf{v}_r} \, dS = 0 , \quad (3.4)$$

sendo \mathbf{n} o vetor normal unitário, que aponta para fora da superfície S , e \mathbf{v}_r a velocidade relativa do fluido descontada a movimentação das faces do VC .

Visando a conservação de quantidade de movimento linear, primeiro se definem as forças de campo e contato que agem sobre o sistema. Em termos da ação de campos externos, inclui-se apenas a força da gravidade \mathbf{g} e como força de contato \mathbf{T} consideram-se a pressão e tensões presentes no meio, que agem diretamente sobre a superfície dos elementos fluidos. Desta forma, a aplicação da segunda lei de Newton para um volume de controle genérico resulta em:

$$\frac{d}{dt} \left[\int_{VC} \rho \mathbf{v} \, dV \right] + \oint_S \rho \, \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_S) \, \mathbf{v} \, dS = \int_{VC} \rho \mathbf{g} \, dV + \oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{T} \, dS . \quad (3.5)$$

Para fluidos Newtonianos incompressíveis, \mathbf{T} é representado pela soma de um termo isotrópico de pressão e um termo viscoso proporcional à taxa de deformação \mathbf{D} . O tensor \mathbf{D} , por sua vez, é definido pela parte simétrica do gradiente de velocidade:

$$\mathbf{T} = -\mathcal{P}\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} , \quad \mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T] , \quad (3.6)$$

sendo \mathcal{P} a pressão média, \mathbf{I} um tensor identidade e μ o coeficiente de viscosidade.

O termo de pressão na equação do movimento pode ser redefinido em termos de uma pressão modificada p que é definida pela diferença entre a pressão \mathcal{P} e a

contribuição hidrostática devido à força gravitacional:

$$p = \mathcal{P} - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} , \quad (3.7)$$

onde \mathbf{r} representa o vetor posição. Em seguida, a integral de superfície que engloba a pressão pode ser convertida numa integral de volume através do teorema de Gauss. Assim, substituindo o tensor tensão \mathbf{T} na Equação 3.5, obtém-se a forma final da conservação da quantidade de movimento linear, representada pela Equação 3.8.

$$\frac{d}{dt} \left[\int_{VC} \rho \mathbf{v} dV \right] + \oint_S \rho \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_S) \mathbf{v} dS = \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) dS - \int_{VC} \nabla p dV . \quad (3.8)$$

Devido à adoção da abordagem Lagrangeana-Euleriana arbitrária, ainda é necessária a inclusão de uma equação de fechamento para garantir que a velocidade dos volumes de controle não interfira na conservação das propriedades. Para tal, aplica-se a Lei de Conservação Geométrica (Eq. 3.9), a qual garante igualdade entre a variação temporal do volume e o movimento de sua superfície delimitadora S com velocidade arbitrária \mathbf{v}_S [33].

$$\frac{d}{dt} \int_{VC} dV - \oint_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_S dS = 0 . \quad (3.9)$$

Para fluidos incompressíveis, a conservação de volume descrita acima pode ser embutida na Equação 3.4, de forma a se obter a equação de continuidade apenas em função do fluxo proveniente do escoamento fluido sem a contribuição explícita da movimentação de malha (Eq. 3.10). Com isso, a conservação de massa implica em um campo de velocidade solenoidal, isto é, de divergente nulo.

$$\oint_S \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} dS = 0 . \quad (3.10)$$

O conjunto de Equações 3.8 a 3.10 deve ser aplicado para cada fase individualmente, considerando que ambas as fases mantém suas propriedades até a superfície divisora. Assim, garante-se a conservação de massa e quantidade de movimento linear no seio dos fluidos. Contudo, ainda é necessário deduzir o equacionamento para descrever o acoplamento entre as fases que ocorre na superfície divisora.

3.2.1 Acoplamento entre fases

Na abordagem de interface com espessura nula, o desenvolvimento de condições de contorno interfaciais adequadas é imprescindível para garantir a conservação das propriedades em todo domínio de estudo. Estas equações, também chamadas de condições de salto, são aplicadas à superfície divisora.

A primeira condição pode ser derivada a partir do princípio de conservação de massa, considerando que não há transferência de massa entre as fases e a região interfacial é caracterizada por uma superfície bidimensional que não acumula massa [113]. Com isso, surge a chamada condição cinemática que garante a continuidade entre as componentes normais de velocidade dos dois lados da interface A e B :

$$\mathbf{v}_A \cdot \mathbf{n}_I = \mathbf{v}_B \cdot \mathbf{n}_I , \quad (3.11)$$

sendo \mathbf{n}_I o vetor unitário normal que aponta do lado A para o lado B da interface.

Para as componentes tangenciais da velocidade, não existe um princípio macroscópico fundamental de conservação para reger a relação entre fases [72]. Neste caso, a condição de não-deslizamento é considerada representativa e se assume a continuidade entre as componentes tangenciais da velocidade:

$$\mathbf{v}_A \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n}_I \mathbf{n}_I) = \mathbf{v}_B \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n}_I \mathbf{n}_I) . \quad (3.12)$$

Além disso, deriva-se uma condição dinâmica para descrever a transferência de *momentum* entre fases, considerando o equilíbrio entre as forças que atuam sobre os fluidos na interface. O balanço de forças interfacial inclui duas contribuições: (*i*) a hidrodinâmica, representada pela diferença de tensões advindas do seio das fases, que é aplicada diretamente no elemento superficial; (*ii*) a capilar, que está associada à tensão interfacial agindo sobre os contornos do elemento de área. O equilíbrio de forças aplicado em um elemento de área S delimitado pela curva C pode ser descrito por sua forma integral:

$$\int_S \mathbf{n}_I \cdot (\mathbf{T}_A - \mathbf{T}_B) dS + \oint_C \sigma \mathbf{m} dL = 0 , \quad (3.13)$$

em que \mathbf{T}_A , \mathbf{T}_B simbolizam o tensor tensão de ambos os lados da interface, σ representa o coeficiente de tensão interfacial e \mathbf{m} é definido como o vetor binormal unitário que é tangente à superfície S e perpendicular a C [72].

Com isso, o efeito da tensão interfacial é representado por uma força tênsil aplicada diretamente nos contornos da superfície que representa a interface. Aplicando o teorema de Stokes, a integral de linha em C pode ser convertida em uma integral de superfície:

$$\mathbf{F}_S^\sigma = \oint_C \sigma \mathbf{m} dL = \int_S \nabla_S \sigma + \sigma \kappa \mathbf{n}_I dS . \quad (3.14)$$

Na equação acima, introduz-se o operador gradiente superficial ∇_S , que difere do gradiente convencional pela subtração de sua componente normal ($\nabla_S = \nabla - \mathbf{n}_I \mathbf{n}_I \cdot \nabla$) [113]. Esta definição é útil para descrever a variação de propriedades na interface, uma vez que só considera a direção tangencial à superfície. Assim, a representação

da força de tensão interfacial inclui um termo tangencial, que correspondente ao gradiente superficial do campo, e uma contribuição normal proporcional ao produto da tensão pela curvatura média da superfície ($\kappa = -\nabla_S \cdot \mathbf{n}_I$).

Resgatando o balanço interfacial apresentado na Equação 3.13, é possível reescrevê-lo em termos de componentes normal e tangencial através do produto interno com seus vetores unitários \mathbf{n}_I e $(\mathbf{I} - \mathbf{n}_I \mathbf{n}_I)$, respectivamente. É necessário resgatar a definição do tensor \mathbf{T} para fluidos newtonianos incompressíveis, descrita pela Equação 3.6. Desta forma, geram-se as contribuições normal (Equação 3.15) e tangencial (Equação 3.16) para o balanço de forças aplicado no elemento superficial arbitrário, cuja dedução detalhada pode ser encontrada no Apêndice A.

$$p_B - p_A = \sigma \kappa - 2 (\mu_B - \mu_A) \nabla_S \cdot \mathbf{v} - (\rho_B - \rho_A) \mathbf{g} \cdot \mathbf{r} . \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \mu_A (\mathbf{n}_I \cdot \nabla \mathbf{v}_A) - \mu_B (\mathbf{n}_I \cdot \nabla \mathbf{v}_B) = \\ (\mu_B - \mu_A) [(\nabla_S \mathbf{v}) \cdot \mathbf{n}_I + \mathbf{n}_I (\nabla_S \cdot \mathbf{v})] + \nabla_S \sigma . \end{aligned} \quad (3.16)$$

A Equação 3.15 representa a variação de pressão na interface, levando em conta a contribuição hidrostática (Eq. 3.7). Este diferencial é contrabalançado pelo termo capilar $\sigma \kappa$ e uma contribuição viscosa atrelada à dilatação ou compressão da interface, que é representada pelo divergente superficial da velocidade. Para a parte tangencial (Eq. 3.16), a diferença entre tensões viscosas é decomposta em uma contribuição normal proveniente do gradiente de velocidade em ambos os lados da interface e termos complementares envolvendo o gradiente e divergentes superficiais de velocidade [124].

Adicionalmente, o gradiente de tensão interfacial está incluído no lado direito da Eq. 3.16 para representar variações de tensão interfacial devido à distribuição de surfactante ou temperatura não uniforme. Como comentado previamente, no atual trabalho serão tratados apenas casos de interface limpa, nos quais não há gradiente de tensão interfacial ($\nabla_S \sigma = 0$). Contudo, destaca-se que a estrutura matemática apresentada claramente possibilita a consideração de campo de tensão interfacial não-uniforme [125].

3.2.2 Referencial Não-Inercial

Tratando-se da ascensão ou sedimentação de partículas individuais, pode ser interessante considerar o movimento da partícula através de um referencial não-inercial posicionado em seu centro de massa (Figura 3.5). Esta estratégia geralmente é utilizada para facilitar o tratamento de malha relacionado à representação do deslocamento da partícula, que pode se estender por uma longa trajetória.

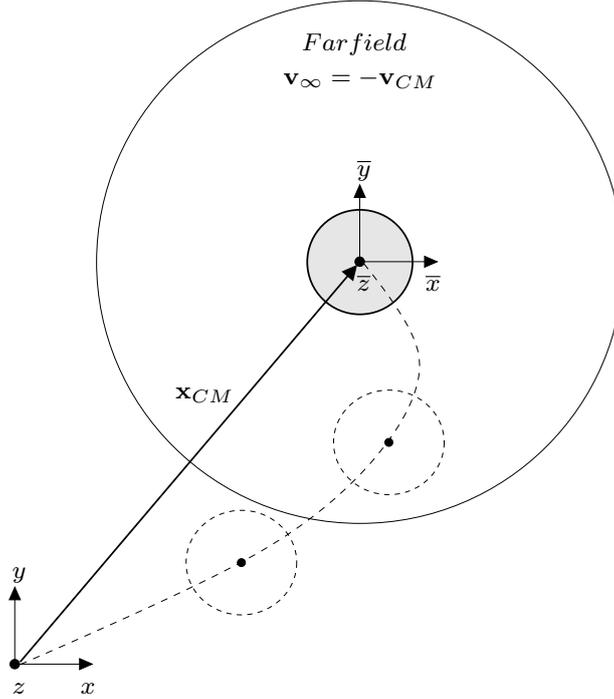


Figura 3.5: Representação do referencial não-inercial adotado, cuja posição é definida no centro de massa da partícula. As variáveis equivalentes ao referencial inercial \mathbf{x}_{CM} e \mathbf{v}_{CM} representam a posição e velocidade da partícula.

O esquema apresentado na Figura 3.5 ilustra os dois referenciais, a esquerda um referencial fixo no espaço e a direita um referencial móvel, que é posicionado no centro de massa (CM) da partícula. Sob a perspectiva do referencial móvel, ao invés da gota se movimentar pelo domínio computacional, seguindo uma trajetória de ascensão, o centro de massa da gota deve permanecer aproximadamente no centro do domínio computacional. Assim, a descrição da interface foca em deformações locais por ação de forças interfaciais e se reduz o esforço atrelado ao acompanhamento da translação da partícula pelo domínio.

Este cenário é possível desde que se imponha no campo externo (*farfield*) uma velocidade equivalente e contrária a movimentação da gota, i.e. $\mathbf{v}_{\infty} = -\mathbf{v}_{CM}$. Outro passo importante para uma representação consistente é garantir a equivalência com a formulação original de referencial fixo. Por este motivo, é necessário um termo adicional na equação de conservação de quantidade de movimento linear (Equação 3.8) que desconte a aceleração do centro de massa da gota \mathbf{a}_{CM} :

$$\int_{VC} \rho \mathbf{a}_{CM} dV . \quad (3.17)$$

Como a velocidade \mathbf{v}_{CM} e a aceleração \mathbf{a}_{CM} resultam do próprio escoamento, seus valores não são conhecidos a priori e é preciso adotar um procedimento para calcular estas variáveis ao longo da simulação. Para tal, segue-se a estratégia pro-

posta por RUSCHE [106], cuja formulação *ad-hoc* se baseia em princípios de controle. Primeiro, determina-se a posição \mathbf{r} do centro de massa a partir de somatórios contabilizando todos os VC 's pertencentes a fase dispersa:

$$\mathbf{r}_{CM} = \left(\frac{\sum_i \mathbf{r}_i V_i}{\sum_i V_i} \right)_{gota} \quad (3.18)$$

em que \mathbf{r}_i é o vetor posição apontando para o centroide da célula i , a qual possui volume V_i . Em seguida, para manter o centro de massa da gota \mathbf{r}_{CM} na origem do domínio computacional, o seguinte equacionamento é adotado:

$$\Delta \mathbf{v}_{CM}^n = \zeta_f \frac{\mathbf{r}_{CM}^n - \mathbf{r}_{CM}^{t_0}}{\Delta t} + \zeta_o \frac{\mathbf{r}_{CM}^n - \mathbf{r}_{CM}^o}{\Delta t}, \quad (3.19)$$

$$\mathbf{a}_{CM}^n = \frac{\Delta \mathbf{v}_{CM}^n}{\Delta t}, \quad (3.20)$$

$$\mathbf{v}_{CM}^n = \mathbf{v}_{CM}^o + \Delta \mathbf{v}_{CM}^n, \quad (3.21)$$

$$\mathbf{x}_{CM}^n = \mathbf{x}_{CM}^o + (\mathbf{v}_{CM}^o + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{v}_{CM}^n) \Delta t. \quad (3.22)$$

No início de cada passo de tempo, calcula-se uma correção para velocidade de acordo com a Eq. 3.19, onde Δt é o tamanho do passo de tempo e os sobrescritos t_0 , n e o denotam os tempos inicial, atual e anterior, respectivamente. O primeiro termo da correção representa o deslocamento necessário para transladar a partícula de volta a sua posição original em um único passo de tempo, enquanto que a segunda contribuição é proporcional a velocidade relativa da gota em relação ao referencial móvel. Os parâmetros ζ_f e ζ_o representam fatores de relaxação, cujo valor recomendado por RUSCHE [106] é de $\zeta_f = \zeta_o = 0,1$. Por fim, com as Eqs. 3.20–3.22, é possível ajustar as variáveis de aceleração \mathbf{a}_{CM} , velocidade \mathbf{v}_{CM} e posição \mathbf{x}_{CM} de acordo com a correção $\Delta \mathbf{v}_{CM}$ calculada.

Capítulo 4

Metodologia Numérica

No capítulo anterior foram deduzidas equações representativas para o escoamento fluido das fases contínua e dispersa, assim como as condições de salto apropriadas para a interface. A resolução destas equações pode ser viabilizada através de uma metodologia que as trata numericamente.

Neste trabalho, aborda-se a fluidodinâmica computacional através da técnica de volumes finitos para transformar equações diferenciais parciais em um conjunto de equações algébricas que possa ser resolvido numericamente. Esta metodologia aplicada a descrição do escoamento de fluidos pode ajudar na compreensão de fenômenos naturais, complementando análises teóricas e experimentais [3].

Com a evolução dos recursos computacionais observada nas últimas décadas, esta metodologia se torna cada vez mais atrativa para avaliar o comportamento dinâmico de fluidos, permitindo a simulação numérica de escoamentos complexos ou até mesmo o teste de condições que são inacessíveis experimentalmente [98]. Para implementação desta técnica, basicamente quatro etapas devem ser seguidas: discretização do domínio, aplicação das equações governantes no domínio, discretização das equações governantes e, por fim, montagem e solução do sistema discretizado.

O primeiro passo se baseia na divisão do domínio de interesse em pequenos volumes de análise representativos, formando a chamada malha computacional (Fig. 3.1). A discretização desse domínio permite a obtenção de campos de velocidade, pressão e outras propriedades através do cálculo das equações governantes em todos os nós [44]. Devido as particularidades de representação da interface, é necessário um tratamento específico para movimentação e deformação da malha computacional.

A segunda fase é caracterizada pela aplicação dos princípios fundamentais de conservação, referentes as propriedades que desejam ser analisadas, nos volumes de controle. Esta tarefa foi previamente realizada e descrita na Seção 3.2. Assim, são obtidas as equações governantes de balanço integral, cujas integrais devem ser aproximadas numericamente. Adotando a regra do ponto médio, as integrais volumétricas e superficiais podem ser aproximadas pelo valor das variáveis no centro

dos volumes e das faces, respectivamente. Neste momento, é importante determinar um esquema de interpolação adequado para relacionar o valor da variável no centro das faces a partir dos valores nos centros dos volumes.

Por se tratarem de escoamentos bifásicos, ainda é necessária uma metodologia específica para tratar da interação entre as fases, a qual rege a movimentação e deformação da interface. As condições de salto, que determinam a transferência de massa e quantidade de movimento através da interface, são incorporadas como condições de contorno na implementação. Em particular, a presente tese propõe uma nova estratégia de acoplamento que é capaz de resolver as interações interfaciais para sistemas líquido-líquido.

O resultado dessas primeiras etapas implica em um sistema linear, cujo tamanho é proporcional ao número de volumes de controle presentes na malha. Como consequência, o refinamento está diretamente relacionado com o custo computacional referente a solução do sistema algébrico. O sistema linear formado geralmente é caracterizado por matrizes esparsas, que podem ser resolvidas utilizando métodos iterativos, que possibilitam a obtenção de uma solução aproximada que pode ser melhorada com regras de iteração [111].

Para atingir as proposições do presente trabalho, utiliza-se como base o *software* livre OpenFOAM, que engloba um conjunto de bibliotecas implementadas em $C++$ [61]. Neste *software* tem-se disponível uma ampla gama de algoritmos para resoluções numéricas típicas de *CFD*, incluindo operadores para discretização aplicando volumes finitos e tratamento para movimentação de malhas não-estruturadas poligonais [60, 64]. Por se tratar de um código aberto com sintaxe bem documentada, este, certamente, é um ótimo ponto de partida para o atual desenvolvimento.

Este capítulo visa descrever as principais características da metodologia numérica desenvolvida nesta tese. A dedução detalhada de etapas intermediárias envolvidas neste processo não serão apresentadas aqui, podendo ser encontradas em livros específicos de *CFD* [3, 44, 111]. A Seção 4.1 descreve um tratamento específico para a movimentação e deformação da malha computacional, na qual são discretizadas espacial e temporalmente as equações de conservação (Seção 4.2). Na Seção 4.3 são detalhados os princípios da metodologia numérica desenvolvida para tratar do forte acoplamento entre fases com propriedades similares. Por fim, na Seção 4.4 descreve-se o procedimento de solução utilizado durante os cálculos.

4.1 Tratamento de Malha

Utilizar técnicas de fluidodinâmica computacional requer, primeiramente, que o domínio contínuo de avaliação seja aproximado por uma representação discreta. Esta representação pode ser realizada através da divisão do domínio em pequenos

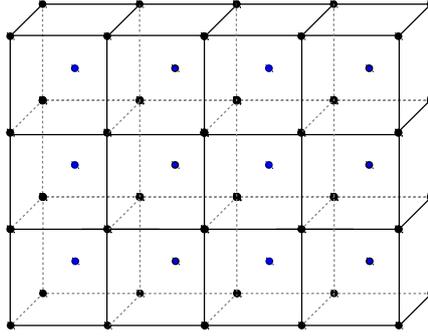


Figura 4.1: Ilustração esquemática de uma malha computacional regular, destacando os pontos azuis como centróides dos VC e os pontos pretos como pontos de conexão entre células.

volumes de controle formando a malha computacional, como é ilustrado na Figura 4.1. Os volumes de análise são delimitados por superfícies de contorno S compostas por um conjunto de faces f , que, por sua vez, podem ser compartilhadas entre VC ou podem pertencer exclusivamente a uma condição de contorno.

A determinação da estrutura desta rede discreta é fundamental, uma vez que a regularidade da malha está relacionada com a eficiência dos algoritmos de solução e sua capacidade de representação de geometrias complexas [111]. Neste quesito, é comum classificar as malhas em estruturadas ou não-estruturadas.

Malha estruturadas são caracterizadas por um arranjo regular de células, de forma que o padrão de conectividade entre pontos pode facilitar a discretização das equações ou o esquema de solução [44]. Como o número de vizinhos é sempre conhecido, geralmente é possível caracterizar toda a malha computacional simplesmente armazenando informações referentes ao posicionamento dos pontos e o tipo de células formado.

Por outro lado, malhas não-estruturadas apresentam conectividade irregular entre os pontos da malha, tornando necessário o armazenamento de mais informações para caracterizar completamente a malha computacional. Isto pode ser realizado através da criação de listas de: *(i)* pontos, em que são armazenadas as coordenadas espaciais de cada ponto presente no domínio; *(ii)* faces, que podem ser descritas por um conjunto de pontos; *(iii)* células, definidas como um agregado de faces; e *(iv)* *patches*, que englobam as faces presentes em uma condição de contorno [62].

De forma geral, malhas não-estruturadas proporcionam maior flexibilidade para representação de geometrias complexas, pois possibilitam a distribuição arbitrária de células sobre o domínio [111]. A discretização do domínio baseia-se em malhas computacionais não-estruturadas com um arranjo colocado de variáveis, isto é, todas as variáveis são calculadas nos centros dos volumes [60]. São criadas duas malhas volumétricas distintas para representação da gota e da fase contínua, de forma que

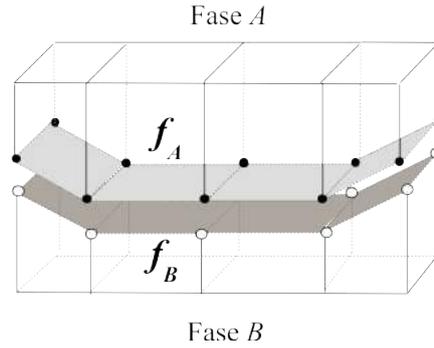


Figura 4.2: Representação da interface discretizada, definida pela justaposição dos *patches* representando as faces de contorno f_A e f_B pertencentes às malhas volumétricas, que representam as fases contínua A e dispersa B .

a interface de contato é definida pela interseção entre contornos das duas malhas, definidos pelos *patches*. Na Figura 4.2 são ilustradas as faces de contorno das fases contínua e dispersa, que, em conjunto, caracterizam a interface.

Após definir a forma com que o domínio será discretizado, é necessário adotar uma técnica para adaptação da malha computacional, que seja capaz de representar o movimento da interface e suavizar conseqüentes deformações nos volumes de controle adjacentes. Para tal, são introduzidos alguns conceitos básicos sobre adaptação de malha no tópico a seguir.

4.1.1 Adaptação de Malha

Problemas fluidodinâmicos que apresentam variações bruscas nas propriedades macroscópicas comumente necessitam de uma malha computacional fina para que as características do escoamento sejam calculadas com acurácia. Neste quesito, algoritmos de adaptação de malha podem ser úteis, pois apresentam a capacidade de capturar com maior acurácia regiões específicas do domínio, sem que seja necessário o refinamento completo da malha [44, 84].

No caso particular da representação da interface através de uma superfície discretizada, esquemas de adaptação de malha são essenciais, uma vez que a movimentação e deformação da interface é concretizada através da modificação correspondente na malha computacional. Na Figura 4.3 são mostrados exemplos de técnicas comuns de adaptação de malha, que fazem uso de uma das seguintes estratégias:

- aumento da resolução da malha computacional através da divisão de células. Geralmente, são utilizados parâmetros de sensibilidade que indicam as regiões do escoamento em que deve ser realizado o refinamento;
- modificação da malha computacional pela conectividade dos pontos. Neste

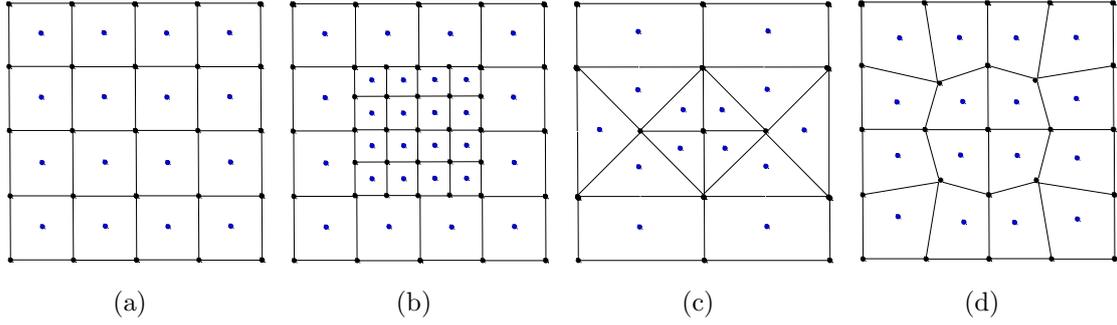


Figura 4.3: Estratégias mais comuns para adaptação de uma malha inicial (a) através de: (b) divisão das células; (c) modificação da conectividade dos pontos; (d) movimentação dos pontos.

caso, pode ocorrer inserção ou remoção de células e pontos, de forma que não há uma tendência para o total de VC presentes no domínio discretizado [26];

- alteração da malha sem modificar sua conectividade. Este tratamento pode ser realizado através da movimentação de pontos por critérios pré-estabelecidos, sem acréscimo ou diminuição no número de células total [28, 104].

Seguindo esta última estratégia, JASAK e TUKOVIĆ [62] desenvolveram um algoritmo de adaptação para malhas não-estruturadas, baseado no deslocamento de um contorno. Neste caso, distingue-se entre o deslocamento da interface e o movimento e deformação de volumes internos da malha computacional. O deslocamento da interface em si é realizado com base na discretização da conservação geométrica (Eq. 3.9), como será descrito mais adiante no texto. Assumindo uma movimentação conhecida da interface, o restante da malha computacional deve se ajustar a este formato variável, acomodando e acompanhando o movimento com deformações correspondentes nos volumes de controle.

Com intuito de preservar a validade e qualidade da malha computacional, JASAK e TUKOVIĆ [62] propõem a determinação do movimento dos volumes de controle pela solução da equação de Laplace:

$$\nabla \cdot (\gamma \nabla \mathbf{v}_S) = 0, \quad (4.1)$$

onde γ representa o campo de difusividade. Para minimizar a distorção da malha, controla-se a rigidez do movimento através de um campo de difusividade variável, dado por:

$$\gamma(l) = \frac{1}{l^2}, \quad (4.2)$$

de forma que γ é função quadrática do inverso da distância l em relação à interface. Com este procedimento, não há mudança na topologia da malha e ainda se viabiliza

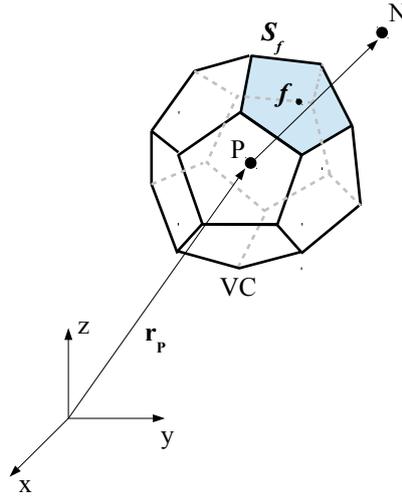


Figura 4.4: Volume de controle utilizado para discretização, representando a face compartilhada f entre o VC de análise e seu vizinho, que possuem centroides P e N , respectivamente.

uma distribuição propícia da deformação para volumes internos da malha.

Para que a aplicação do algoritmo seja bem sucedida, as malhas utilizadas devem atender a 3 critérios: *(i)* validade topológica, cujo teste envolve a relação entre: pontos, arestas, faces e células; *(ii)* volumes de controle válidos, o que é garantido se todos os VC forem delimitados por superfícies fechadas; e *(iii)* positividade das áreas e volumes calculados, o que pode ser verificado através de uma análise de convexidade e orientação das células. Maiores detalhes sobre etapas de discretização e solução envolvidas no procedimento podem ser encontrados em [62] e [124].

4.2 Discretização das Equações

No capítulo anterior foram derivadas equações representativas para o escoamento fluido das fases contínua e dispersa, assim como as condições de salto apropriadas para a interface. O conjunto resultante de equações integrais deve ser transformado em um sistema linear de equações algébricas, através da aplicação do método de volumes finitos. Para descrição dos volumes de controle nos quais são aplicados as equações volumétricas, é adotado um sistema de coordenadas global cartesiano, como mostra a Figura 4.4. Nesta Figura, ilustra-se um volume de análise genérico P que compartilha com seu vizinho N uma face f .

Inicialmente, é necessário aproximar numericamente as integrais volumétricas e superficiais presentes nas equações governantes do sistema. A maneira mais simples de realizar esta tarefa é através da regra do ponto médio, em que há a aproximação da integral volumétrica pela sua respectiva avaliação no centróide P (Equação 4.3),

cujo posicionamento é ilustrado na Figura 4.4.

$$\int_{VC} \psi \, dV \cong \psi_P V_P . \quad (4.3)$$

Por outro lado, as integrais aplicadas à superfície de contorno devem ser primeiramente transformadas em um somatório das mesmas integrais avaliadas nas faces que compõe esta superfície, para posteriormente aplicar a regra do ponto médio:

$$\oint_S \psi \, dS = \sum_f \int_f \psi \, dS \cong \sum_f \psi_f S_f . \quad (4.4)$$

4.2.1 Acoplamento Pressão-Velocidade

Resgatando a equação de continuidade (Eq. 3.10) e aplicando as definições propostas, a discretização resultante possui apenas um termo, que se refere ao fluxo de massa \dot{m}_f correspondente ao movimento do fluido. A Equação 4.5 implica na conservação de massa no volume de controle desde que o fluxo de massa total atravessando sua superfície delimitadora S seja nulo.

$$\oint_S \rho \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, dS = 0 \implies \sum_f \underbrace{\rho_f (\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_f)}_{\dot{m}_f} S_f = 0 . \quad (4.5)$$

De forma similar ao procedimento aplicado na equação da continuidade, a discretização da conservação de quantidade de movimento linear (Equação 3.8) resulta na Equação 4.6. Neste caso, utiliza-se um fluxo relativo $\phi_{r,f}$ na contabilização do termo convectivo, englobando não só o fluxo de massa \dot{m}_f correspondente ao movimento do fluido mas também o fluxo de volume \dot{V}_f devido à deformação do VC na malha computacional, i.e. $\phi_{r,f} = \dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f$.

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left[\int_{VC} \rho \mathbf{v} \, dV \right] + \oint_S \rho \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}_S) \mathbf{v} \, dS = \oint_S \mathbf{n} \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) \, dS - \int_{VC} \nabla p \, dV \\ \implies & \frac{d(\rho_P \mathbf{v}_P V_P)}{dt} + \sum_f [\dot{m}_f - \rho_f \underbrace{S_f (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_S)}_{\dot{V}_f}] \mathbf{v}_f = \sum_f \mu_f S_f (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v})_f - (\nabla p)_P V_P . \end{aligned} \quad (4.6)$$

Na Equação 4.6, o primeiro termo se refere à variação temporal da quantidade de movimento em um volume de controle móvel, cujo volume total V_P é alterado de acordo com a deformação da malha computacional. Para tratar deste termo, aplica-se um esquema de discretização temporal implícito de segunda ordem, também conhecido como *BDF* (*backward differentiation formula*) [111, 125]. Considerando um passo de tempo fixo Δt , a discretização resultante é apresentada na Equação 4.7, onde os sobrescritos n , o e oo representam respectivamente o instante atual e dois

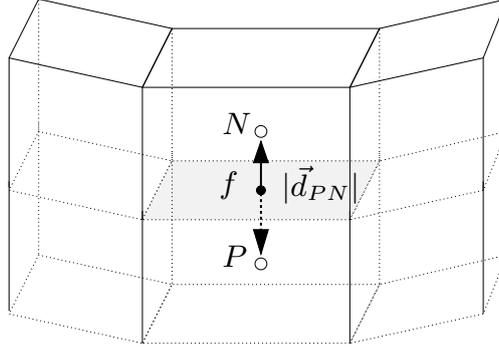


Figura 4.5: Representação de um volume de controle interno P e seu vizinho N para uma malha sem erro de *skewness*, onde o vetor distância \mathbf{d}_{PN} passa exatamente pelo centro da face f .

passos de tempo anteriores.

$$\frac{d(\rho_P \mathbf{v}_P V_P)}{dt} = \frac{3\rho_P V_P^n}{2\Delta t} \mathbf{v}_P^n - \frac{2\rho_P V_P^o}{\Delta t} \mathbf{v}_P^o + \frac{\rho_P V_P^{oo}}{2\Delta t} \mathbf{v}_P^{oo}. \quad (4.7)$$

Em seguida, esquemas de interpolação devem ser aplicados para aproximar os termos convectivo e difusivo, uma vez que estes englobam valores de variáveis avaliados no centro das faces (Eq. 4.6). Como no interior da malha os volumes de controle têm suas faces compartilhadas com VC 's vizinhos, pode-se estabelecer uma relação entre valores centrados na face f e valores centrados nas células P e N . A Figura 4.5 ilustra os volumes internos de uma malha computacional, na qual $|\mathbf{d}_{PN}|$ representa o vetor de distância entre os nós centrais.

Vários esquemas de interpolação já se encontram implementados na plataforma OpenFOAM, os quais compreendem relações simples, e.g. *Upwind* [44], bem como estratégias mais sofisticadas, como limitação de fluxo e correção de *skewness* [1, 60]. Durante as simulações, o esquema de discretização *Gamma* [63] foi aplicado para tratar do termo convectivo, de forma que se consegue obter uma aproximação de segunda ordem limitada (*bounded*) para os valores de velocidade nas faces.

No entanto, para propiciar uma comparação clara com o tratamento interfacial que será apresentado posteriormente (Seção 4.3), considera-se nesta descrição que os valores de velocidade nas faces são representados por simples interpolação linear entre volumes de controle vizinhos:

$$\mathbf{v}_f = \omega_f \mathbf{v}_P + (1 - \omega_f) \mathbf{v}_N, \quad \omega_f = \frac{|\mathbf{d}_{Nf}|}{|\mathbf{d}_{Nf}| + |\mathbf{d}_{Pf}|}. \quad (4.8)$$

A componente normal do gradiente de velocidade no termo difusivo é aproximada através de dois termos, como mostra a Equação 4.9. O primeiro representa uma contribuição associada à distância dada pelo vetor Δ_f , que é paralelo ao vetor de distância \mathbf{d}_{PN} . O segundo termo refere-se a uma correção para a não-ortogonalidade

da malha computacional, que é calculada pela diferença ($\mathbf{n}_f - \mathbf{\Delta}_f$).

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v})_f = |\mathbf{\Delta}_f| \frac{\mathbf{v}_N - \mathbf{v}_P}{|\mathbf{d}_{PN}|} + (\mathbf{n}_f - \mathbf{\Delta}_f) \cdot (\nabla \mathbf{v})_f . \quad (4.9)$$

Analogamente a aproximação da velocidade nas faces (Eq. 4.8), o gradiente de velocidade presente no lado direito da equação acima é aproximado por interpolação linear dos gradientes avaliados nos centros dos volumes de controle adjacentes. Este termo de não-ortogonalidade é incluído como uma contribuição explícita para o sistema linear resultante do processo de discretização, que compreende:

$$a_P \mathbf{v}_P^n + \sum_N a_N \mathbf{v}_N^n = \mathbf{r}_P - (\nabla p)_P^o , \quad (4.10)$$

com

$$a_P = \left(\frac{3\rho_P}{2\Delta t} \right) + \sum_f \frac{\phi_{r,f}}{V_P^n} \omega_f + \sum_f \mu_f \frac{S_f}{V_P^n} \frac{\mathbf{\Delta}_f}{|\mathbf{d}_{PN}|} ; \quad (4.11)$$

$$a_N = \sum_f \frac{\phi_{r,f}}{V_P^n} (1 - \omega_f) - \sum_f \mu_f \frac{S_f}{V_P^n} \frac{\mathbf{\Delta}_f}{|\mathbf{d}_{PN}|} ; \quad (4.12)$$

$$\mathbf{r}_P = \left(\mathbf{v}_P^o \frac{2\rho_P V_P^o}{\Delta t} - \mathbf{v}_P^{oo} \frac{\rho_P V_P^{oo}}{2\Delta t} \right) + \sum_f \mu_f \frac{S_f}{V_P^n} (\mathbf{n}_f - \mathbf{\Delta}_f) \cdot (\nabla \mathbf{v})_f^n , \quad (4.13)$$

sendo que a contribuição de pressão é considerada explicitamente aplicando o teorema de Gauss e a regra do ponto médio ao gradiente de pressão original:

$$\int_{VC} \nabla p \, dV = \oint_S p \mathbf{n} \, dS \approx \sum_f S_f p_f \mathbf{n}_f . \quad (4.14)$$

Nota-se que a solução deste sistema linear sozinha não garante o princípio da conservação de massa discretizado anteriormente (Equação 4.5). Para tratar do acoplamento entre as conservações de *momentum* e massa, adota-se a estratégia de solução segregada *PISO* (*Pressure-Implicit with Splitting of Operators*) [44, 60]. Esta abordagem se baseia na resolução iterativa dos campos de pressão e velocidade, derivando uma equação para pressão que atenda a continuidade (Eq. 3.10). Para tal, primeiramente parte-se da Equação 4.10 visando obter uma expressão para a velocidade avaliada no centro dos volumes de controle:

$$\mathbf{v}_P^n = \frac{1}{a_P} \left(\overbrace{\mathbf{r}_P - \sum_N a_N \mathbf{v}_N^n}^{\mathbf{H}} - (\nabla p)_P^n \right) . \quad (4.15)$$

Em seguida, aplicam-se interpolações visando aproximar a velocidade \mathbf{v} para as faces seguindo o método de Rhie-Chow modificado proposto em [126]. Em particular,

este procedimento de interpolação garante que os valores de velocidade nas faces para tempos anteriores, i.e. $(\mathbf{v}_P^o)_f$ e $(\mathbf{v}_P^{oo})_f$, também satisfaçam a equação de continuidade discretizada em configurações prévias de malha. Para aproximar outros termos $\overline{(\quad)}_f$, utiliza-se o procedimento padrão de interpolação linear com valores centrados em células vizinhas. Assim, obtém-se:

$$\mathbf{v}_f^n = \overline{\left(\frac{\mathbf{H}}{a_P}\right)}_f^{mRC} - \frac{1}{\overline{(a_P)}_f} (\nabla p)_f^n, \quad (4.16)$$

para faces de volumes internos.

Tratando-se de fluidos incompressíveis, a conservação de massa implica em um campo de velocidade solenoidal. Seguindo este princípio, aplica-se o operador divergência à Eq. 4.16 juntamente com o teorema de Gauss, o que resulta na equação de pressão discretizada (Eq. 4.17). De forma análoga à quantidade de movimento linear, a Equação 4.17 gera um segundo sistema linear para o cálculo do campo de pressão nos VC 's internos a malha computacional. Com isso, tem-se todo equacionamento representativo das conservações de *momentum* e massa no seio das fases (Eqs. 4.10–4.13 e 4.17), cujo procedimento de solução é detalhado na Seção 4.4.

$$\sum_f S_f \left(\frac{1}{\overline{(a_P)}_f} \right) \mathbf{n}_f \cdot (\nabla p)_f = \sum_f S_f \mathbf{n}_f \cdot \overline{\left(\frac{\mathbf{H}}{a_P}\right)}_f^{mRC}. \quad (4.17)$$

4.2.2 Movimentação da Interface

Para que a deformação da malha computacional não interfira na conservação de massa do sistema, deve-se adicionar ao procedimento de cálculo a equação de conservação espacial, que iguala a mudança no volume de análise VC com o respectivo movimento da superfície de controle S que o limita (Eq. 3.9). Na Figura 4.6 é mostrado que a modificação total no volume de controle pode ser vista como a soma do movimento individual das faces f que o compõe.

Assim, pode-se igualar a diferença no volume entre dois instantes de tempo consecutivos $(V_P^n - V_P^o)$ ou $(V_P^o - V_P^{oo})$ com o somatório das modificações geradas neste mesmo volume pelas faces f quando estas se movimentam, como mostra a Equação 4.18. Esta estratégia é interessante, pois, permite o cálculo da diferença de volume através de informações transientes da malha computacional.

$$V_P^n - V_P^o = \sum_f \delta V_f^n, \quad V_P^o - V_P^{oo} = \sum_f \delta V_f^o. \quad (4.18)$$

Substituindo estas definições na equação original (Equação 3.9) e aplicando o mesmo esquema de discretização temporal descrito anteriormente, obtém-se uma

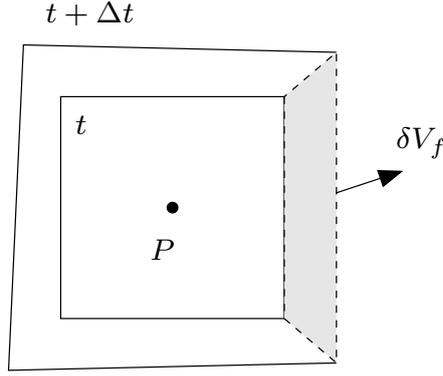


Figura 4.6: Modificação espacial de uma face δV_f entre os tempos t^0 e t^n . Imagem adaptada de TUKOVIĆ [124].

relação entre o fluxo de volume \dot{V}_f e a modificação gerada pelo movimento das faces δV_f , que é representada pela Equação 4.19.

$$\frac{d}{dt} \int_{VC} dV - \underbrace{\sum_f \int_{S_f} \mathbf{v}_S \cdot \mathbf{n} dS}_{\dot{V}_f} = 0 \implies \dot{V}_f^n = \frac{3 \delta V_f^n}{2 \Delta t} - \frac{1 \delta V_f^o}{2 \Delta t}. \quad (4.19)$$

Além de necessária ao cálculo de $\phi_{r,f}$ em cada face (Eq. 4.6), a equação acima é fundamental para o cálculo do movimento da interface. Como a interface deve acompanhar exatamente o movimento dos fluidos ao final de cada passo de tempo, os vértices da malha superficial são deslocados iterativamente para atender a condição de fluxo de massa relativo nulo. Na prática, o fluxo relativo avaliado na interface pode não ser nulo ao final de uma iteração it do acoplamento pressão-velocidade, i.e. $\phi_{r,f}^{it} \neq 0$. Com isso, determina-se uma correção para \dot{V}_f a partir deste fluxo remanescente:

$$\dot{V}_f^* = (\dot{V}_f^n - \dot{V}_f^{it}) = \frac{\dot{m}_f^{it}}{\rho_f} - \dot{V}_f^{it}. \quad (4.20)$$

O valor resultante \dot{V}_f^* é utilizado para movimentar pontos de controle, os quais são posicionados nos centroides das faces [87, 126]. Para tal, calcula-se o volume a ser varrido por uma face δV_f^* para zerar o fluxo relativo utilizando a correção calculada (Eq. 4.20) de acordo com o esquema de discretização temporal escolhido. Além disso, é necessário estabelecer uma direção \mathbf{f} para o movimento, que pode ser normal aos elementos de área da interface ou outra direção qualquer pré-especificada. Assim, geram-se expressões que regem o deslocamento h dos pontos de controle:

$$h^{it} = \frac{\delta V_f^*}{S_f(\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{f})}, \quad \delta V_f^* = \frac{2}{3} \dot{V}_f^* \Delta t. \quad (4.21)$$

Em seguida, a posição dos vértices da malha superficial é modificada para seguir

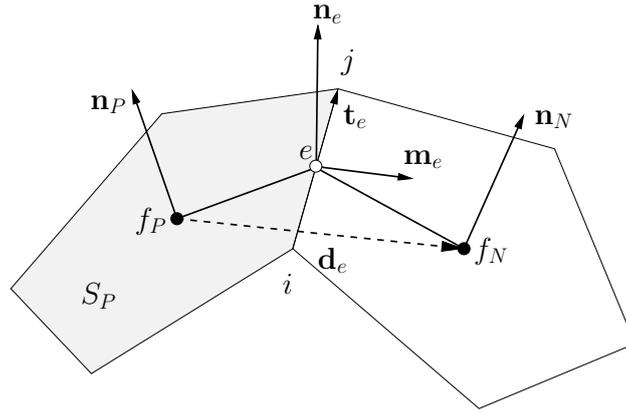


Figura 4.7: Representação de faces com centróides f_P e f_N . Destaca-se o sistema de coordenadas local formado pelos vetores unitários normal \mathbf{n}_e , tangencial \mathbf{t}_e e binormal \mathbf{m}_e à aresta e compartilhada entre as faces.

o deslocamento dos pontos de controle, ajustando-se uma nova posição para a malha superficial, como detalhado em [124]. Desta forma, o procedimento de movimentação da interface visa assegurar a conservação de volume.

Para garantir que o movimento dos nós interfaciais seja calculado com uma velocidade interfacial convergida e que se atenda corretamente a condição de fluxo de massa relativo nulo, é necessária uma resolução iterativa. Assim, introduz-se um *loop* adicional dentro do cálculo do passo de tempo, compreendendo o acoplamento pressão-velocidade, o movimento interfacial e o acoplamento entre as fases. O movimento interfacial final é utilizado como condição de contorno para adaptação do restante da malha volumétrica, conforme previamente comentado na Seção 4.1.1.

4.2.3 Termos Interfaciais

Para auxiliar o tratamento de termos relacionados à interface, definem-se os vetores unitários normal \mathbf{n}_e , tangencial \mathbf{t}_e e binormal \mathbf{m}_e no centro da aresta e compartilhada entre duas faces com centroides f_P e f_N , como esquematizado na Figura 4.7. Esses vetores são calculados de acordo com a Equação 4.22, sendo que os subscritos i e j indicam a avaliação do vetor nos dois vértices da aresta e .

$$\mathbf{t}_e = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad \mathbf{n}_e = \frac{\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j}{|\mathbf{n}_i + \mathbf{n}_j|} \quad \text{e} \quad \mathbf{m}_e = \mathbf{t}_e \times \mathbf{n}_e. \quad (4.22)$$

Na equação acima, o vetor tangencial \mathbf{t}_e é definido pela diferença entre o vetor posição avaliado no início e fim da aresta, isto é, entre \mathbf{r}_i e \mathbf{r}_j . Com intuito de melhorar a acurácia no cálculo da força de tensão interfacial, o vetor normal unitário \mathbf{n}_e é estabelecido como a média dos vetores normais nos vértices. Os vetores \mathbf{n}_i e \mathbf{n}_j , por sua vez, são calculados com base em superfícies biquadráticas ajustadas

utilizando vértices vizinhos, conforme descrito em TUKOVIĆ e JASAK [126]. Por fim, o vetor binormal \mathbf{m} é dado pelo produto vetorial entre os outros dois vetores \mathbf{n} e \mathbf{t} .

Definidos os vetores unitários na aresta, discretiza-se a força de tensão interfacial com a Eq. 4.23, aproximando a integral de linha com a regra do ponto médio. A discretização resultante é dada por um somatório nas arestas compondo a área de controle, o qual inclui o produto do comprimento L_e com a força de tensão interfacial por unidade de comprimento. Esta força é avaliada no centro de cada aresta e seguindo as definições prévias da Eq. 4.22.

$$\mathbf{F}_S^\sigma = \oint_C \sigma \mathbf{m} \, dL = \sum_e (\sigma \mathbf{m})_e L_e . \quad (4.23)$$

Com esta formulação, a premissa de força de tensão interfacial total nula para superfícies fechadas é satisfeita desde que os vetores binormais para duas áreas de controle adjacentes que compartilham a mesma aresta e sejam paralelos, tenham a mesma magnitude, mas sentidos opostos [126]. Em seguida, resgata-se a Eq. 3.14 para o cálculo efetivo das componentes normal e tangencial da força \mathbf{F}_S^σ , que entram diretamente nas condições interfaciais (Eqs. 3.15 e 3.16). Para tal, a regra do ponto médio é aplicada para aproximar as integrais de superfície, resultando em:

$$(\nabla_S \sigma)_f = \frac{1}{S_f} (\mathbf{I} - \mathbf{n}_f \mathbf{n}_f) \cdot \sum_e (\sigma \mathbf{m})_e L_e , \quad (4.24)$$

$$(\sigma \kappa)_f \mathbf{n}_f = \frac{1}{S_f} (\mathbf{n}_f \mathbf{n}_f) \cdot \sum_e (\sigma \mathbf{m})_e L_e . \quad (4.25)$$

Para o cenário considerado na tese, o coeficiente de tensão interfacial é constante ao longo da superfície, de forma que a componente tangencial na Eq. 4.24 será nula. Neste caso, a curvatura média κ na área de controle atende a Eq. 4.26, a qual inclui o somatório dos vetores binormais às arestas contornando a face em questão.

$$\kappa_f \mathbf{n}_f = \frac{1}{S_f} \sum_e \mathbf{m}_e L_e . \quad (4.26)$$

Ao considerar a contribuição normal da força de tensão interfacial com o presente tratamento, surge uma condição de estabilidade relacionada com a evolução temporal do campo de pressão [18]. Portanto, a escala de tempo da solução deve ser menor do que o tempo necessário para a propagação de ondas capilares, o que é assegurado pela seguinte restrição:

$$\Delta t < \sqrt{\frac{(\rho_{Af} + \rho_{Bf})(\Delta x)^3}{4\pi\sigma}} , \quad (4.27)$$

em que Δx representa o tamanho do menor elemento da malha superficial.

Além da força de tensão interfacial, é necessário também discretizar os operadores divergente e gradiente superficiais presentes nas condições de salto (Eqs. 3.15 e 3.16). Antecedendo o processo de discretização, os operadores superficiais aplicados ao vetor velocidade são decompostos com o teorema de Stokes-Kelvin:

$$\int_S \nabla_S \mathbf{v} \, dS = \oint_C \mathbf{m} \mathbf{v} \, dL - \int_S \kappa(\mathbf{n} \mathbf{v}) \, dS , \quad (4.28)$$

$$\int_S \nabla_S \cdot \mathbf{v} \, dS = \oint_C \mathbf{m} \cdot \mathbf{v} \, dL - \int_S \kappa(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}) \, dS . \quad (4.29)$$

Em sequência, estas integrais de superfície e contorno são aproximadas numericamente com a regra do ponto médio e passam a ser representadas pela avaliação direta nos centroides de faces e arestas. Particularmente para uma face genérica f delimitada pelas arestas e , esta aproximação resulta em:

$$S_f(\nabla_S \mathbf{v})_f = \sum_e L_e(\mathbf{m}_e \mathbf{v}_e) - \kappa_f S_f(\mathbf{n}_f \mathbf{v}_f) , \quad (4.30)$$

$$S_f(\nabla_S \cdot \mathbf{v})_f = \sum_e L_e(\mathbf{m}_e \cdot \mathbf{v}_e) - \kappa_f S_f(\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_f) . \quad (4.31)$$

A interpolação de variáveis para as arestas leva em consideração os valores dos centroides das faces adjacentes (Fig. 4.7), analogamente ao procedimento adotado para faces internas compartilhadas por volumes (Seção 4.2.1). Contudo, devido à curvatura da malha superficial, o fator de ponderação é baseado em distâncias geodésicas entre f_P , e e f_N . Além disso, para aproximar variáveis tensoriais entre pontos de uma superfície curva não é adequada a interpolação por componentes [124]. Então, o cálculo de \mathbf{v}_e ainda considera tensores de transformação \mathcal{T} entre sistemas de coordenadas curvilíneas locais posicionados nos pontos de avaliação da velocidade f_P , e e f_N (Figura 4.7):

$$\mathbf{v}_e = (\mathcal{T}_e)^T \cdot [e_x \mathcal{T}_{f_P} \cdot \mathbf{v}_{f_P} + (1 - e_x) \mathcal{T}_{f_N} \cdot \mathbf{v}_{f_N}] , \quad (4.32)$$

de acordo com procedimento detalhado em TUKOVIĆ [124].

Com isso, tem-se estabelecido todos os elementos necessários para o cálculo de termos interfaciais como curvatura, força de tensão interfacial, gradiente e divergente superficiais da velocidade.

4.3 Acoplamento entre Fases

Os volumes de controle no contorno requerem um tratamento diferenciado em relação à interpolação para as faces, já que as faces do contorno não possuem volumes de controle vizinhos. Esta tarefa geralmente é realizada aplicando os seguintes tipos de condições de contorno:

- Dirichlet, em que se adota um valor fixo para a variável nas faces do contorno ($\psi_{f,conhecido}$);
- Neumann, que prescreve o valor da componente normal do gradiente nas faces do contorno ($\mathbf{n}_f \cdot (\nabla\psi)_f = \Phi_{f,conhecido}$).

A aplicação dessas CC numéricas na discretização dos termos convectivo e difusivo nos contornos acaba produzindo diferentes contribuições para o sistema linear de equações governantes. Adotando valor fixo nas faces de contorno, isto é, condição de Dirichlet, a convecção entra diretamente como termo fonte enquanto o termo difusivo contribui para o termo fonte e a diagonal principal:

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla\psi)_f = \frac{\psi_{f,conhecido}}{|\mathbf{d}_{Pf}|} + \left(\frac{-1}{|\mathbf{d}_{Pf}|} \right) \psi_P . \quad (4.33)$$

Já com a condição de Neumann, como o valor da componente normal do gradiente é especificado, o termo difusivo contribui apenas para o lado direito do sistema linear. Neste caso, a aproximação do termo convectivo no contorno não só contribui para o termo fonte, mas também depende do valor no volume interno P :

$$\psi_f = \psi_P + |\mathbf{d}_{Pf}| \Phi_{f,conhecido} . \quad (4.34)$$

Além dos contornos que determinam a entrada ou saída no domínio, a interface apresenta-se como um tipo especial de fronteira. De acordo com a abordagem adotada, a interface é caracterizada pelo encontro de duas superfícies geometricamente idênticas que pertencem a domínios volumétricos distintos representando cada fase, como ilustrado na Figura 4.8. O tratamento das condições de contorno na interface é particularmente importante, uma vez que condições de salto devem ser garantidas para descrever corretamente a troca de informações entre fases.

Em TUKOVIĆ e JASAK [126], as condições de contorno interfaciais são representadas através dos esquemas clássicos de Dirichlet e Neumann, atribuindo a fase mais densa a um lado da interface ($\rho_A > \rho_B$). Tais condições são atualizadas antes do acoplamento pressão-velocidade de acordo com as condições de salto (Eqs. 3.11–3.16), que são incorporadas no cálculo de propriedades nas faces para ambos os lados da interface.

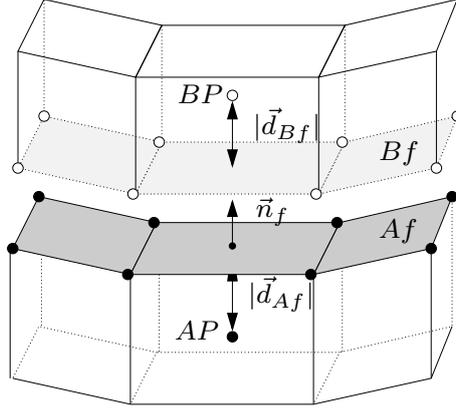


Figura 4.8: Representação da interface discretizada, definida pela justaposição das faces de contorno Af e Bf pertencentes às malhas volumétricas, que representam as fases contínua A e dispersa B .

Para a velocidade, impõe-se um valor no lado B da interface (\mathbf{v}_{Bf}) que é estabelecido a partir da solução da fase A . Já no lado A da interface, a componente normal do gradiente de velocidade ($n_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_{Af}$) é especificada para as faces de acordo com a solução da fase B . Enquanto isso, para a pressão, as condições de Dirichlet e Neumann são trocadas entre os lados, ou seja, valor conhecido nas faces Af (p_{Af}) e componente normal do gradiente de pressão especificada para o lado B ($\mathbf{n}_f \cdot (\nabla p)_{Bf}$).

Os resultados de [124] mostram que esta estratégia representa adequadamente a interação entre fases com propriedades físicas muito diferentes, como em sistemas gás-líquido. Conforme discutido anteriormente, esses sistemas podem exibir uma direção tendenciosa para a transferência de informações entre fases, uma vez que a fase mais leve geralmente apresenta pouca influência sobre o escoamento da fase mais pesada. Ao definir a fase A como a mais densa, essa direção preferencial é naturalmente contemplada com os tipos de condição de contorno adotados para cada lado da interface.

No entanto, quando ambas as fases exibem viscosidades e densidades similares ($0,1 < \mu_B/\mu_A < 10$ e $0,1 < \rho_B/\rho_A < 10$), esta estratégia não reproduziu satisfatoriamente as soluções analíticas disponíveis. Duas fases líquidas imiscíveis frequentemente exibem propriedades macroscópicas semelhantes acarretando em um nível de interação mais forte, o que requisita um tratamento numérico diferenciado. Neste estudo, implementamos uma estratégia de acoplamento mais abrangente que permite a simulação de sistemas de duas fases que podem ter propriedades semelhantes ou diferentes.

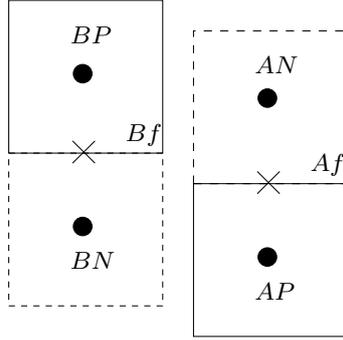


Figura 4.9: Representação ilustrativa dos volumes de controle fictícios, AN e BN , criados como vizinhos virtuais dos volumes de controle, AP e BP .

4.3.1 Tratamento Implícito

No presente estudo, aborda-se o cenário de propriedades macroscópicas similares através do aprimoramento da comunicação entre as fases. A abordagem desenvolvida considera os valores centrados nas células de ambos os lados da interface para aproximar termos convectivos e difusivos nos contornos interfaciais.

Aplica-se a metodologia de interface generalizada *GGI* [13] (*Generalized Grid Interface*) para interpolar campos entre os lados da interface, com base em ponderações por área. O método *GGI* possibilita o mapeamento conservativo de dados em uma malha com nós não-coincidentes na interface, considerando restrições adequadas na definição dos fatores de ponderação.

Os campos interpolados são atribuídos a vizinhos virtuais, AN e BN , que são criados para os volumes do contorno, AP e BP , conforme ilustrado na Figura 4.9. Então, é necessário estabelecer relações entre o volume de controle original e seu vizinho virtual (BP e AN ou AP e BN) para calcular valores nas faces, Af e Bf , de modo a assegurar as condições de contorno cinemática e dinâmica na interface. A formulação desenvolvida é apresentada a seguir.

Condição Interfacial para Velocidade

Primeiro, adota-se interpolação linear para calcular os valores nas faces, como descrito nas Eqs. 4.35 e 4.36. Definindo os fatores de interpolação pela Eq. 4.37, a igualdade entre o vizinho virtual e o VC oposto implica na continuidade do vetor de velocidade ($\mathbf{v}_{Af} = \mathbf{v}_{Bf}$). Com estas definições, assegura-se a condição cinemática (Eq. 3.11) e a condição de não-deslizamento (Eq. 3.12) na aproximação da veloci-

dade nas faces.

$$\mathbf{v}_{Af} = \omega_{Af}\mathbf{v}_{AP} + (1 - \omega_{Af})\mathbf{v}_{AN} , \quad \mathbf{v}_{AN} = \mathbf{v}_{BP} ; \quad (4.35)$$

$$\mathbf{v}_{Bf} = \omega_{Bf}\mathbf{v}_{BP} + (1 - \omega_{Bf})\mathbf{v}_{BN} , \quad \mathbf{v}_{BN} = \mathbf{v}_{AP} ; \quad (4.36)$$

$$\omega_{Af} = \frac{|\mathbf{d}_{Bf}|}{|\mathbf{d}_{Af}| + |\mathbf{d}_{Bf}|} , \quad \omega_{Bf} = \frac{|\mathbf{d}_{Af}|}{|\mathbf{d}_{Af}| + |\mathbf{d}_{Bf}|} . \quad (4.37)$$

Nota-se que a discretização proposta para aproximação da velocidade na interface (Eqs. 4.35 – 4.37) não garante diretamente a condição dinâmica interfacial (Eq. 3.16). Contudo, espera-se que isto efetivamente exerça pouca influência na contribuição interfacial para o termo convectivo, cuja discretização é definida pelo produto da velocidade na face e do fluxo relativo $\phi_{r,f}$. Como a condição de fluxo relativo nulo é o que governa o movimento interfacial, ou seja, $\phi_{r,Af} = \phi_{r,Bf} \approx 0$, os valores de velocidade nas faces devem ter efeito limitado sobre a contribuição interfacial para o termo convectivo. Assim, presume-se que esta aproximação é suficiente para representar o termo convectivo, impondo contribuições para os coeficientes da diagonal principal do sistema linear (a_P) e fora da diagonal (a_N), da mesma forma que a formulação apresentada para VC 's internos (Eqs. 4.8 e 4.10–4.13).

A componente tangencial da condição dinâmica é incorporada na formulação do termo difusivo interfacial. O Apêndice B descreve esta dedução, em que o objetivo é considerar contribuições implícitas de ambas as fases usando uma propriedade difusiva efetiva e o conceito de ‘vizinhos fictícios’ AN e BN . As Equações 4.38 e 4.39 representam a aproximação da componente normal do gradiente de velocidade para os lados A e B , respectivamente.

$$\mu_A \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_{Af} = \mu_{eff} \left[\frac{\mathbf{v}_{AN} - \mathbf{v}_{AP}}{|\mathbf{d}_{AB}|} + \Delta_v \left(\frac{\omega_A}{\mu_B} \right) \right] , \quad (4.38)$$

$$\mu_B \mathbf{n}_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_{Bf} = \mu_{eff} \left[\frac{\mathbf{v}_{BP} - \mathbf{v}_{BN}}{|\mathbf{d}_{AB}|} - \Delta_v \left(\frac{\omega_B}{\mu_A} \right) \right] , \quad (4.39)$$

sendo que o salto interfacial Δ_v e a viscosidade efetiva μ_{eff} são definidos como:

$$\Delta_v = \nabla_S \sigma + (\mu_{Bf} - \mu_{Af}) [(\nabla_S \mathbf{v}_f) \cdot \mathbf{n}_f + \mathbf{n}_f \cdot (\nabla_S \cdot \mathbf{v}_f)] , \quad (4.40)$$

$$\mu_{eff} = \frac{1}{\frac{\omega_{Bf}}{\mu_A} + \frac{\omega_{Af}}{\mu_B}} . \quad (4.41)$$

Como resultado, o termo difusivo avaliado na interface contribui não só com os coeficientes da diagonal principal (a_P) e fora da diagonal (a_N), mas também incluem uma contribuição para o termo fonte (\mathbf{r}_P). Uma vez que o sistema linear é resolvido,

as condições interfaciais são reforçadas pela atualização de valores de velocidade de acordo com:

$$\mathbf{v}_f = \frac{\mathbf{v}_{BP} \frac{\mu_B}{|\mathbf{d}_{Bf}|} + \mathbf{v}_{AP} \frac{\mu_A}{|\mathbf{d}_{Af}|} + \Delta_v}{\frac{\mu_A}{|\mathbf{d}_{Af}|} + \frac{\mu_B}{|\mathbf{d}_{Bf}|}}. \quad (4.42)$$

A Equação 4.42 é derivada a partir da componente tangencial da condição dinâmica (Eq. 3.16) aplicando as seguintes definições: (i) $\mathbf{v}_{Af} = \mathbf{v}_{Bf} = \mathbf{v}_f$; e (ii) a discretização de gradiente normal definida pela Eq. 4.43. Desta forma, a atualização de \mathbf{v}_{Af} e \mathbf{v}_{Bf} assegura simultaneamente a condição cinemática, a componente tangencial da condição dinâmica e a condição de não-deslizamento. O campo de velocidade interfacial atualizado é empregado na computação dos termos de gradiente e divergente superficial.

$$\mathbf{n}_f \cdot (\nabla \mathbf{v})_f = \frac{\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_P}{|\mathbf{d}_{Pf}|}. \quad (4.43)$$

Condição Interfacial para Pressão

Mesmo sem um termo convectivo na equação de pressão (Eq. 4.17), aplica-se interpolação linear como uma primeira aproximação para a pressão nas faces a fim de estabelecer uma relação entre volumes AN e BP ou BN e AP que assegure a componente normal da condição dinâmica (Eq. 3.15):

$$p_{Af} = \omega_{Af} p_{AP} + (1 - \omega_{Af}) p_{AN}, \quad \omega_{Af} = \frac{|\mathbf{d}_{Bf}|}{|\mathbf{d}_{Af}| + |\mathbf{d}_{Bf}|}; \quad (4.44)$$

$$p_{Bf} = \omega_{Bf} p_{BP} + (1 - \omega_{Bf}) p_{BN}, \quad \omega_{Bf} = \frac{|\mathbf{d}_{Af}|}{|\mathbf{d}_{Af}| + |\mathbf{d}_{Bf}|}; \quad (4.45)$$

$$p_{AN} = p_{BP} - \Delta_{p_1}, \quad p_{BN} = p_{AP} + \Delta_{p_1}; \quad (4.46)$$

com salto interfacial de pressão Δ_{p_1} definido por:

$$\Delta_{p_1} = \sigma \kappa - 2(\mu_B - \mu_A) \nabla_S \cdot \mathbf{v}_f - (\rho_B - \rho_A) \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}. \quad (4.47)$$

Quanto ao fluxo de pressão normal à interface, não há restrição física imposta pelo salto interfacial e condições de salto (Seção 3.2.1). Assim, propõe-se adotar uma relação matemática que descreva esse fluxo assegurando a continuidade da componente normal da velocidade, ou seja, $\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{Af} = \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{Bf}$. Esta dedução é

apresentada no Apêndice C e as equações resultantes seguem:

$$\left(\frac{1}{a_P}\right)_{Af} \mathbf{n}_f \cdot (\nabla p)_{Af} = \frac{1}{(a_P)_{eff}} \left[\frac{p_{AN} - p_{AP}}{|\mathbf{d}_{AB}|} + (a_P)_{Bf} \omega_{Af} \Delta_{p_2} \right], \quad (4.48)$$

$$\left(\frac{1}{a_P}\right)_{Bf} \mathbf{n}_f \cdot (\nabla p)_{Bf} = \frac{1}{(a_P)_{eff}} \left[\frac{p_{BP} - p_{BN}}{|\mathbf{d}_{AB}|} - (a_P)_{Af} \omega_{Bf} \Delta_{p_2} \right], \quad (4.49)$$

sendo que o parâmetro difusivo efetivo e o salto interfacial Δ_{p_2} são descritos pelas seguintes expressões:

$$\frac{1}{(a_P)_{eff}} = \frac{1}{(a_P)_{Bf} \omega_{Af} + (a_P)_{Af} \omega_{Bf}}, \quad \Delta_{p_2} = \mathbf{n}_f \cdot \left[\left(\frac{\mathbf{H}}{a_P}\right)_{Af} - \left(\frac{\mathbf{H}}{a_P}\right)_{Bf} \right]. \quad (4.50)$$

Os termos $(\mathbf{H})_f$ e $(a_P)_f$ em todos os contornos, inclusive na interface, são aproximados por uma abordagem de gradiente nulo, ou seja, $(\mathbf{H})_f = (\mathbf{H})_P$ e $(a_P)_f = (a_P)_P$.

Esta formulação matemática representa indiretamente a condição de continuidade da velocidade normal ($\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{Af} = \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{Bf}$). Além disso, ambos os lados da interface contribuem para termos na diagonal principal, fora da diagonal e fonte do sistema linear formado pela equação de pressão discretizada (Eq. 4.17).

De forma similar ao procedimento adotado para a velocidade interfacial, os valores de pressão nas faces são recalculados após a resolução da equação governante. Os valores de pressão no lado A são atualizados usando a Equação 4.51, que assegura as condições de salto (Eqs. 3.11 e 3.15), como demonstrado no Apêndice C. Por fim, os valores de pressão no lado B são obtidos substituindo p_{Af} atualizado na condição de salto na direção normal, isto é, na Equação 3.15. Os valores interfaciais atualizados p_{Af} e p_{Bf} contribuem para o termo de pressão na equação do movimento (Eq. 4.14).

$$p_{Af} = \frac{p_{AP} \frac{1}{|\mathbf{d}_{Af}|(a_P)_{Af}} + p_{AN} \frac{1}{|\mathbf{d}_{Bf}|(a_P)_{Bf}} + \Delta_{p_2}}{\frac{1}{|\mathbf{d}_{Af}|(a_P)_{Af}} + \frac{1}{|\mathbf{d}_{Bf}|(a_P)_{Bf}}}. \quad (4.51)$$

4.4 Procedimento de Cálculo

O procedimento de solução baseia-se no cálculo segregado das equações de velocidade e pressão. Um *loop* temporal é aplicado para evoluir os campos calculados em um determinado intervalo de tempo. No início de cada passo do tempo, a malha volumétrica é ajustada de acordo com o deslocamento de nós interfaciais do período anterior, conforme as etapas discutidas na Seção 4.1.1. Essa adaptação da malha computacional (Eqs. 4.1 e 4.2) é executada apenas uma vez por passo de tempo, assumindo que o movimento total da interface nesse período é pequeno em comparação

com a espessura da célula adjacente [126].

Após este ajuste de malha, há um *loop* que inclui a atualização das condições de salto (Seção 4.3.1), o acoplamento de pressão-velocidade (Seção 4.2.1) e o deslocamento da interface (Seção 4.2.2). Este ciclo é necessário para garantir a convergência do acoplamento entre fases e, conseqüentemente, que as condições de salto sejam atendidas no movimento resultante dos nós interfaciais. O deslocamento da interface é calculado para atender à restrição de fluxo de massa relativo nulo através da interface, de acordo com a estratégia descrita anteriormente (Eqs. 4.18–4.21).

Além disso, o acoplamento pressão-velocidade pode ser dividido em duas partes: (i) o preditor de quantidade de movimento linear (*momentum predictor*) que engloba a montagem e solução da equação de *momentum* com o campo de pressão atual; (ii) o corretor de pressão (*pressure corrector*), em que a equação de pressão é resolvida e o campo de velocidade é corrigido explicitamente com novos valores de pressão. As principais implicações das condições de contorno interfaciais (Seção 4.3) sobre o procedimento numérico são destacadas a seguir.

Preditor de *momentum*

A equação de conservação para quantidade de movimento leva em consideração o termo convectivo avaliado na interface, incluindo as Eqs. 4.35 – 4.37 para aproximar os valores centrados na face. Eqs. 4.38 e 4.39 são consideradas na contribuição difusiva, sendo que a viscosidade efetiva é calculada com a Eq. 4.41. O salto interfacial Δ_v (Eq. 4.40) entra como uma contribuição explícita no sistema linear.

Antes de resolver o sistema gerado, a contribuição do gradiente de pressão dada pela Eq. 4.14 é adicionada ao lado direito. Na interface, as Eqs. 4.51 e 3.15 são utilizadas para aproximar os valores de pressão na interface. Após a solução, os valores da velocidade na interface são recalculados de acordo com a Eq. 4.42.

Corretor de pressão

Para montar a equação de pressão, o salto interfacial Δ_{p_1} (Eq. 4.47) é atualizado e substituído na avaliação de p_{AN} e p_{BN} (Eq. 4.46). Esses novos valores nodais, por sua vez, são usados na aproximação do termo difusivo (Eqs. 4.48 a 4.50). Os coeficientes da matriz correspondentes são atualizados e o salto Δ_{p_2} (Eq. 4.50) é adicionado ao termo fonte.

O lado direito da equação de pressão (Eq. 4.17) é computado considerando a solução precedente da quantidade de movimento linear com a_P e \mathbf{H} definidos pelas Eqs. 4.11 e 4.15, respectivamente. Depois de resolver a equação da pressão, o salto Δ_{p_1} e os valores dos centroides dos volumes de controle, p_{AN} e p_{BN} , são recalculados e utilizados para obter novos valores de pressão interfacial de acordo com as Eqs.

4.51 e 3.15. Por fim, o campo de velocidade é corrigido com uma contribuição de pressão atualizada no final do ciclo *PISO*. Os valores interfaciais de velocidade também são recalculados de acordo com a Eq. 4.42.

Visando uma ilustração mais clara do procedimento numérico, as principais etapas de resolução são destacadas no fluxograma abaixo:

```
while loop Temporal do  
  Ajuste da malha volumétrica;  
  while loop Externo do  
    Preditor de momentum;  
    while loop PISO do  
      Corretor de pressão;  
    end  
    Deslocamento da interface;  
  end  
end
```

Este procedimento atualiza as condições dos contornos interfaciais dentro do acoplamento pressão-velocidade, de modo que os valores interfaciais são reavaliados toda vez que as equações governantes são montadas e resolvidas. Além disso, o novo esquema fornece contribuições similares de ambas as fases para o sistema linear, aproximando valores das variáveis na interface e os fluxos associados usando valores nodais dos dois lados da interface. Assim, a formulação proposta favorece a comunicação entre os domínios computacionais.

Capítulo 5

Resultados e Discussão

No presente Capítulo, são descritos os cenários selecionados para verificação e aplicação da metodologia numérica desenvolvida. Primeiramente, averigua-se o procedimento através de casos testes nos quais é possível obter soluções analíticas, que fornecem uma base de comparação. Posteriormente, a estrutura é aplicada para descrever eventos fenomenológicos reais, nos quais a evolução do formato da interface é resultado de uma complexa interação entre escoamentos interno e externo, assim como a força interfacial de tensão.

5.1 Acoplamento entre Fases

Nesta seção, demonstra-se a capacidade de predição da metodologia descrita em termos de comportamento de interface. Três casos com soluções analíticas foram selecionados para avaliar o código implementado contra diferentes efeitos dominantes regendo o movimento e deformação da interface. O primeiro compreende simulações bidimensionais da evolução de ondas gravitacionais e capilares na interface entre dois fluidos imersos em uma cavidade retangular. O segundo caso trata da oscilação tridimensional de uma gota inicialmente deformada em torno do formato esférico devido à força de tensão interfacial. Finalmente, apresenta-se um caso teste em que a gota é submetida a um escoamento cisalhante e sua interface deforma para atingir o equilíbrio entre força de tensão interfacial e tensão viscosa dos fluidos.

5.1.1 Tanque Bidimensional

O primeiro caso é caracterizado pela evolução de ondas gravitacionais e capilares na interface de dois fluidos imiscíveis. Fluidos com densidades ρ_A e ρ_B são posicionados em camadas numa cavidade retangular, com a fase mais leve acima da mais pesada.

As paredes da cavidade, compostas pelos contornos inferior, esquerdo e direito, são tratadas com uma condição de deslizamento livre. No contorno superior, aplica-

se uma condição de valor nulo para pressão. Inicialmente, os fluidos estão em repouso e o formato da interface é descrito por:

$$y(x) = H + \frac{a_0}{2} \cos\left(\frac{\pi x}{W}\right), \quad (5.1)$$

sendo $a_0 = 0,01 \text{ m}$, $H = W = 1,00 \text{ m}$, e adota-se a mesma altura para as duas camadas de fluido. Todas essas variáveis são ilustradas pela Figura 5.1, que também descreve a posição das coordenadas x e y .

Considerando oscilações de pequena amplitude, i.e. $a_0/W \ll 1$, e viscosidades cinemáticas iguais para ambos os fluidos, i.e. $\nu_A = \nu_B = \nu$, Prosperetti [97] derivou expressões analíticas para evolução da amplitude de ondas capilares e gravitacionais. Tal equacionamento é descrito a seguir

$$a(t) = \frac{4(1-4\beta)\nu^2 k^4}{8(1-4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2} a_0 \operatorname{erfc}(\sqrt{\nu k^2 t}) + \sum_{i=1}^4 \frac{z_i}{Z_i} \frac{\omega_0^2 a_0}{z_i^2 - \nu k^2} \exp[(z_i^2 - \nu k^2)t] \operatorname{erfc}(z_i \sqrt{t}), \quad (5.2)$$

onde ν representa a viscosidade cinemática e $k = \frac{\pi}{W}$ o número de onda. O parâmetro adimensional β e a frequência natural invíscida ω_0 são calculados de acordo com:

$$\beta = \frac{\rho_A \rho_B}{(\rho_A + \rho_B)^2}, \quad \omega_0^2 = \frac{\rho_A - \rho_B}{\rho_A + \rho_B} |\mathbf{g}| k + \frac{\sigma}{\rho_A + \rho_B} k^3. \quad (5.3)$$

Adicionalmente, z_1, z_2, z_3 e z_4 representam as raízes da equação algébrica abaixo:

$$z^4 - 4\beta\sqrt{k^2\nu} z^3 + 2(1-6\beta)k^2\nu z^2 + 4(1-3\beta)\sqrt{(k^2\nu)^3} z + [(1-4\beta)\nu^2 k^4 + \omega_0^2] = 0. \quad (5.4)$$

Por fim, $Z_1 = (z_2 - z_1)(z_3 - z_1)(z_4 - z_1)$ e Z_2, Z_3, Z_4 são obtidos de forma análoga por permutação circular dos índices. A resolução destas equações é usada como referência para comparar o código implementado com o procedimento apresentado em [126]. Além disso, a comparação com perfis analíticos permite a avaliação da versatilidade do esquema implícito frente a variações nas propriedades físicas.

Figura 5.2 mostra a malha computacional utilizada em todas as simulações, a menos que indicado o contrário. A malha consiste de 3.200 elementos quadriláteros com 40 e 80 divisões nas direções x e y , respectivamente. Todos os cálculos para este caso teste foram realizados em processamento serial, i.e. em um único processador.

Ondas Gravitacionais

Primeiramente, analisou-se o caso em que o movimento interfacial é dominado predominantemente por efeitos gravitacionais. A distorção inicial da interface (Eq. 5.1)

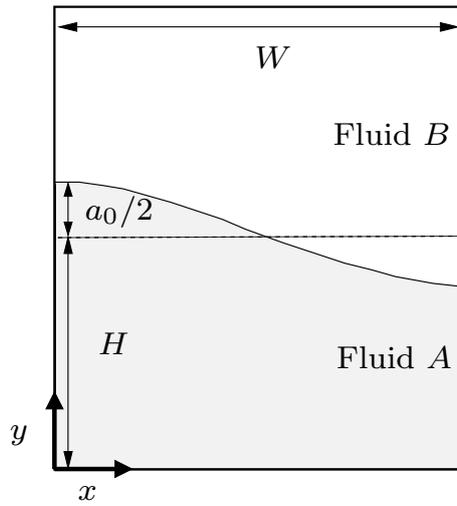


Figura 5.1: Representação da geometria utilizada para o cálculo da evolução de ondas com pequena amplitude na interface.

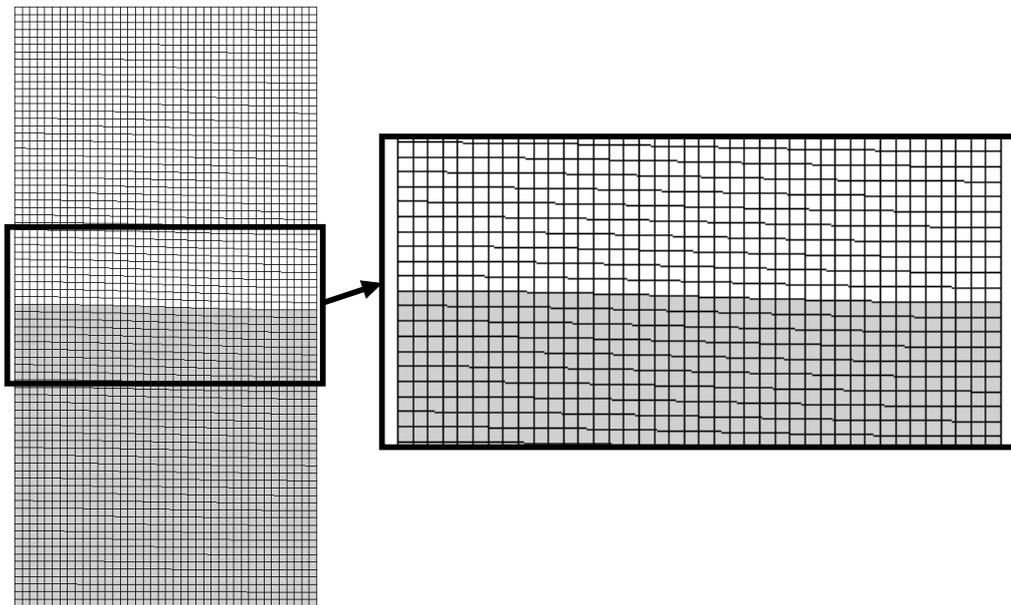


Figura 5.2: Malha hexaédrica empregada para o caso do tanque bidimensional com nós coincidentes na interface.

acarreta em uma variação na pressão interfacial devido à contribuição hidrostática de cada fase (Eq. 4.47). A medida que a simulação evolui, a onda interfacial oscila em torno da posição de equilíbrio por ação de forças gravitacionais, como empuxo e peso. Os efeitos viscosos gradualmente amortecem essas oscilações até que uma interface plana seja alcançada em algum ponto.

Para atender a restrição de viscosidade cinemática igual para ambas as fases, $\nu = 0,01 \text{ m}^2/\text{s}$ foi adotado para os dois fluidos. Foram testadas três razões de densidade, $\eta = \rho_B/\rho_A$, fixando a densidade da fase A em $\rho_A = 1000 \text{ kg}/\text{m}^3$, enquanto a densidade da outra fase foi variada entre $\rho_B = 25, 100$ ou $500 \text{ kg}/\text{m}^3$. Além dessas propriedades físicas, o número de *loops* externos usados nos cálculos também foi variado para avaliar a eficácia do código implementado.

A solução analítica de PROSPERETTI [97] (Eqs. 5.2 a 5.4) é usada para estabelecer uma linha base de comparação entre o código implícito e a abordagem explícita de Tukovic [124], frente a diferentes propriedades físicas. Com este propósito, analisa-se o desvio da posição da interface numérica y_n em relação à previsão analítica y_a em $x = 0$, ao longo do tempo.

Devido ao amortecimento na oscilação interfacial, deslocamentos muito pequenos na posição da interface podem acarretar em erros relativos maiores para tempos de simulação avançados. Assim, é mais apropriado considerar a média temporal do erro absoluto, da seguinte forma:

$$\bar{\xi} = \frac{\sum_i^N |y_a - y_n|_i}{N}, \quad N = \frac{T}{\Delta t}, \quad (5.5)$$

sendo $T = 20 \text{ s}$ o tempo total simulado e $\Delta t = 0,1 \text{ s}$ o passo de tempo adotado. O erro calculado permite avaliar a capacidade de predição do movimento da interface em termos de desvios absolutos da solução analítica.

A Tabela 5.1 lista os tempos de execução para os diversos casos testados, sendo estimados pelo tempo de *CPU* necessário para simular o total de $T = 20 \text{ s}$. Evidentemente, os resultados mostram que o tempo de *CPU* aumenta junto com o número de *loops* externos. Em linhas gerais, mantidos constantes a razão de densidade η e o número de *loops* externos, o tempo de *CPU* para ambos os esquemas são similares.

Ao aumentar a densidade da fase B , surgem diferentes tendências para cada tratamento. Embora os tempos de execução permaneçam praticamente inalterados nos casos implícitos, há um aumento visível nestes valores para os resultados explícitos. Esse comportamento se deve principalmente à diferença no número de iterações necessárias para atingir os critérios de convergência conforme $\eta \rightarrow 1$.

Fixando o número de *loops* externos em 20, verifica-se que o número médio de iterações necessário para resolver a equação de pressão com o procedimento implícito ficou entre 13 – 15 iterações para todos valores de η testados. Por outro lado, nas

Tabela 5.1: Tempo de execução para simulações no tanque 2D para diferentes razões de densidade e número de loops externos.

		Tempo de Execução [s]			
		5 loops	10 loops	15 loops	20 loops
$\eta = 0,025$	Implícito	47,9	63,5	78,5	93,6
	Explícito	46,7	60,5	73,3	87,7
$\eta = 0,1$	Implícito	48,6	64,3	79,7	94,4
	Explícito	48,7	65,7	77,9	90,9
$\eta = 0,5$	Implícito	49,4	64,6	79,4	93,4
	Explícito	-	71,9	92,2	110,6

simulações com cálculo explícito, o número de iterações exigidos foi aumentando junto com η e variou entre 13 – 50.

A Tabela 5.2 apresenta a média temporal de erros absolutos calculada pela Eq. 5.5 . Para o código implícito, observa-se que os valores de erro quase não são afetados pelo número de *loops* externos, mas um pequeno decréscimo é notável quando a razão de densidade se aproxima do valor unitário. Por outro lado, a acurácia da abordagem explícita decai com o aumento de η e mais *loops* externos são necessários para reduzir o erro absoluto médio. No caso extremo de $\eta = 0,5$ e apenas 5 *loops* externos, a simulação usando o método explícito diverge.

Tabela 5.2: Média temporal do erro absoluto para a posição da interface y em $x = 0$ para simulações no tanque 2D.

		Média Temporal do Erro Absoluto ($\times 10^{-4}$ [m])			
		5 loops	10 loops	15 loops	20 loops
$\eta = 0,025$	Implícito	1,53	1,51	1,50	1,49
	Explícito	1,57	1,54	1,55	1,53
$\eta = 0,1$	Implícito	1,10	1,08	1,07	1,07
	Explícito	3,05	1,20	1,19	1,18
$\eta = 0,5$	Implícito	0,19	0,18	0,18	0,18
	Explícito	-	149	50,40	2,50

Os resultados apresentados confirmam o que foi discutido previamente na Seção 4.4. Ao aumentar a densidade da fase B mantendo uma condição fixa para A , a magnitude da diferença entre as propriedades do fluido é reduzida, i.e. $\rho_A - \rho_B = 975, 900$ ou 500 kg/m^3 . Isto implica em saltos interfaciais menores (Eqs. 3.15 e 3.16) se todas as outras propriedades permanecerem constantes. Como resultado prático, os erros introduzidos pela atualização tardia das condições de contorno acabam se tornando mais importantes.

Conforme $\eta \rightarrow 1$, o acoplamento explícito requer mais *loops* externos para atingir um erro aceitável, resultando em tempos de execução mais altos. Com a estratégia implícita, por outro lado, os erros calculados permanecem praticamente inalterados com o número de *loops*. Neste caso, como a atualização das condições interfaciais é realizada dentro do acoplamento pressão-velocidade, menos ciclos externos são necessários para alcançar a convergência do acoplamento entre as fases.

Esse comportamento de convergência pode ser investigado com uma análise de resíduos, na qual se monitora a evolução de uma variável interfacial para cada abordagem de acoplamento. O resíduo médio da velocidade interfacial \mathbf{v}_f é dado por:

$$Res(\mathbf{v}_f) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |\mathbf{v}_{f,j}^{new} - \mathbf{v}_{f,j}^{old}|, \quad (5.6)$$

sendo que a diferença de valores de velocidade interfacial é avaliada entre duas iterações consecutivas no *loop* externo, representadas pelos sobrescritos *new* e *old*. Além disso, o cálculo do resíduo considera a média nas faces compondo a interface.

A convergência do acoplamento ao longo das simulações é reportada na Figura 5.3, que apresenta apenas a última avaliação do resíduo em cada passo de tempo. Utilizando apenas 5 *loops* externos, os resultados mostram que o acoplamento implícito proporciona uma melhor convergência para todas as razões de densidade testadas, com resíduos absolutos girando em torno de $10^{-8} - 10^{-10} \text{ m/s}$.

Com 20 *loops* externos, ambas as abordagens apresentam resíduos similares para razões de densidade mais baixas. Já para $\eta = 0,5$, surgem diferenças substanciais e a estratégia explícita apresenta dificuldades em convergir. Esta análise indica que o esquema de acoplamento desenvolvido proporciona uma melhor convergência com um número menor de *loops* externos, em comparação ao acoplamento explícito tipo Dirichlet-Neuman.

Método de Interface Generalizada Conforme previamente comentado, a implementação atual interpola os campos entre lados da interface através do esquema de Interface Generalizada *GGI*, que permite a conservação dos fluxos entre malhas não conformacionais [13].

Para demonstrar o potencial do método de interpolação aplicado, o caso com $\eta =$

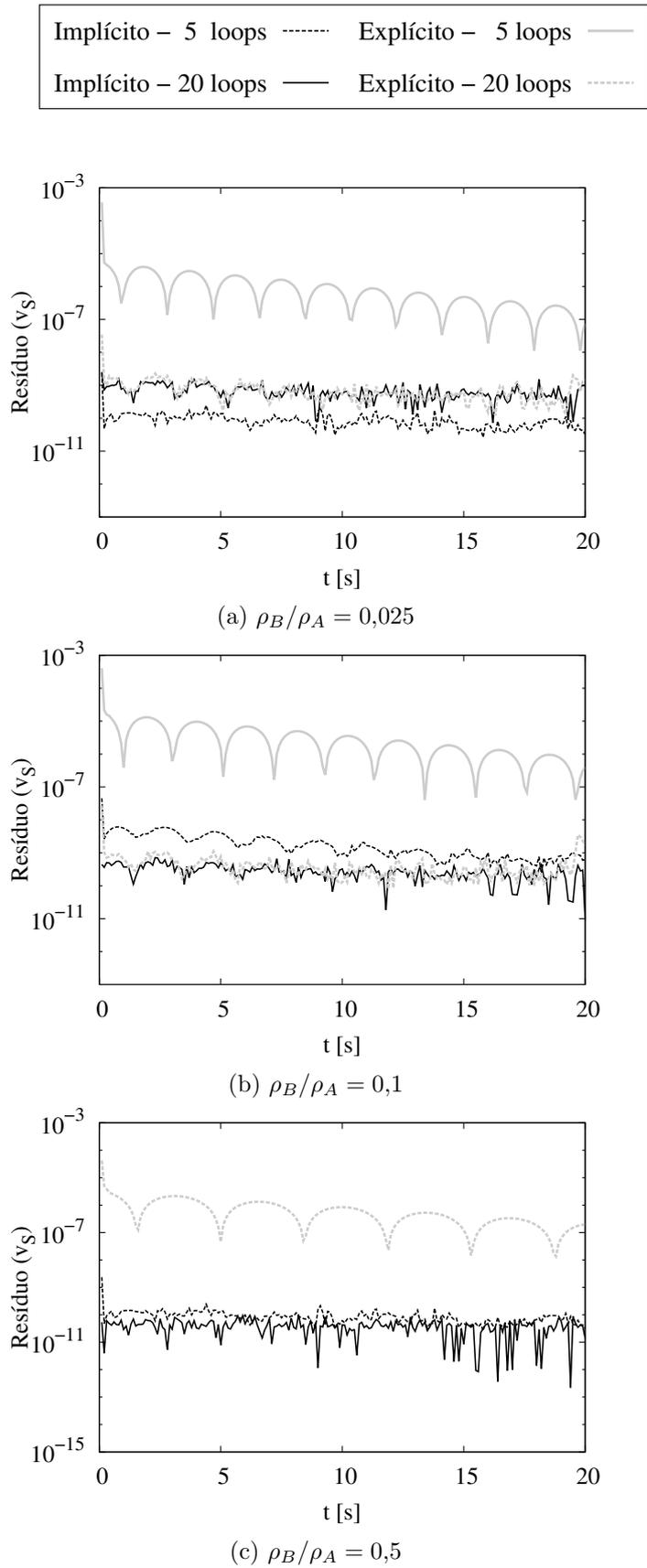


Figura 5.3: Análise dos resíduos de velocidade interfacial v_S para sistemas com diferentes razões de densidade. As linhas pontilhadas representam simulações com 5 *loops* externos e as linhas contínuas com 20 *loops* externos.

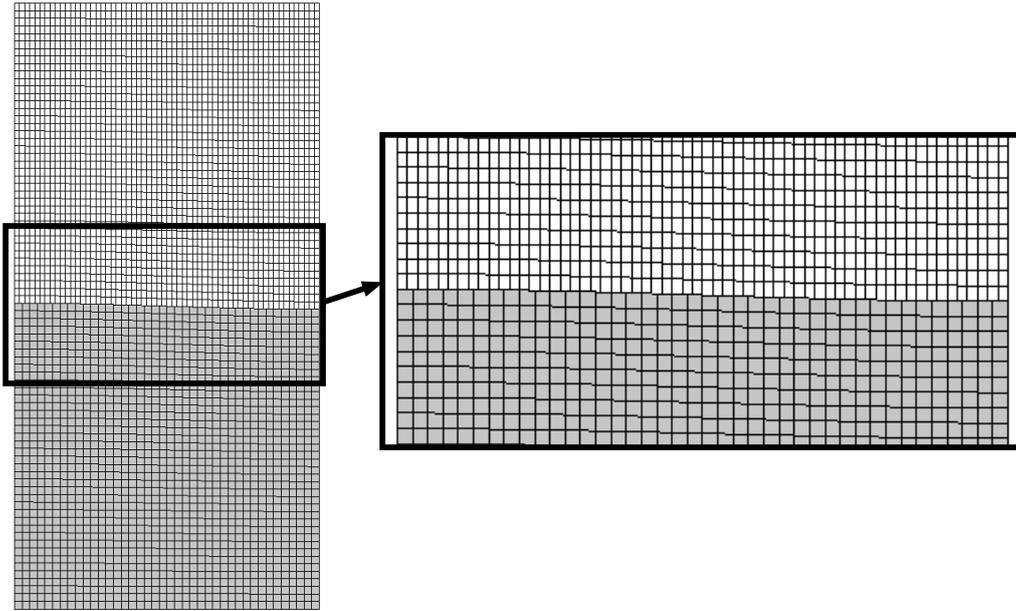


Figura 5.4: Malha hexaédrica empregada para o caso do tanque 2D com nós não-conformacionais na interface.

0,5 e 5 *loops* externos foi recalculado, mas agora empregando a malha computacional ilustrada na Figura 5.4. Esta malha possui 4.000 nós distribuídos em 40×40 divisões na região inferior e 60×40 na parte superior.

A Figura 5.5 mostra a evolução da posição da interface na extremidade esquerda do domínio, i.e. $x = 0$. A comparação com o perfil analítico confirma que tanto a malha conformacional quanto a não conformacional representam adequadamente o comportamento interfacial. A proximidade entre os dois perfis numéricos evidencia a precisão do método de interpolação *GGI*.

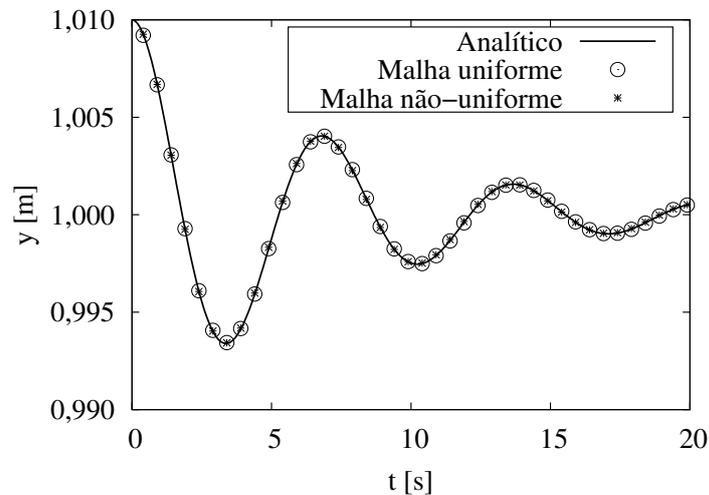


Figura 5.5: Comparação entre resultados para um tanque 2D com $\rho_B/\rho_A = 0,5$ e $\nu_B/\nu_A = 0,01$ usando malhas conformacional e não-conformacional.

Ondas Capilares

Se os efeitos da gravidade forem negligenciados, a interface se move em função da força de tensão interfacial que age no sentido de obter uma superfície de curvatura constante. Como este movimento envolve escalas menores do que o caso de teste anterior, o cálculo dos períodos de oscilação implica em simulações significativamente mais longas. O tempo total de simulação para cerca de 4 períodos de oscilação foi de $T = 600, 2000$ ou 6000 s, correspondendo aos casos com tensões interfaciais de $\sigma = 0,1; 0,01$ e $0,001$ N/m, respectivamente.

As outras propriedades físicas foram mantidas constantes com valores $\eta = 0,5$, $\rho_A = 1000$ kg/m³ e $\nu = 10^{-5}$ m²/s. A magnitude da viscosidade cinemática foi escolhida para garantir um comportamento oscilatório do sistema, assim como se aproximar de condições típicas de líquidos comuns. Diferentes passos de tempo foram adotados para cada caso, cumprindo o critério de estabilidade estabelecido na Eq. 4.27 para a abordagem explícita de tensão superficial ($\Delta t = 0,05; 0,2$ e 1 s).

A Figura 5.6 mostra que a presente implementação reproduz com êxito os perfis analíticos de Prosperetti [97] para os três casos. Além da avaliação da capacidade de previsão do código por períodos mais longos, essas simulações também exibem a capacidade da metodologia para lidar com sistemas que apresentam diferentes magnitudes de tensão interfacial.

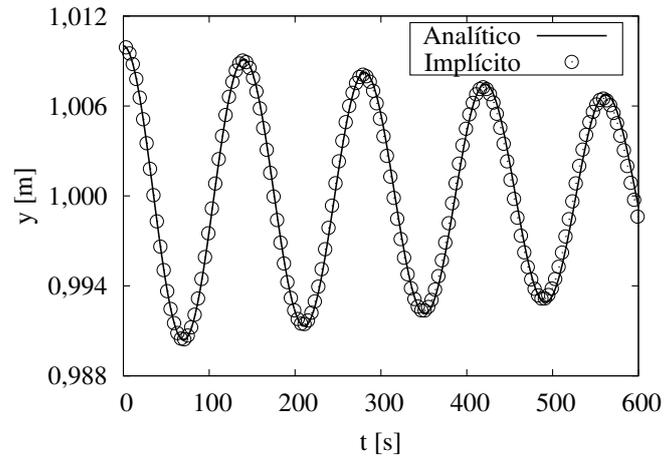
5.1.2 Oscilação de Gotas em Repouso

O segundo caso teste é um problema clássico para avaliar o rastreamento de interfaces: uma partícula não-esférica que oscila devido à força de tensão interfacial. O efeito dominante sobre o movimento da interface é similar ao caso das ondas capilares. Contudo, agora se tratam de simulações tridimensionais nas quais a força interfacial age no sentido de atingir uma superfície esférica de curvatura constante.

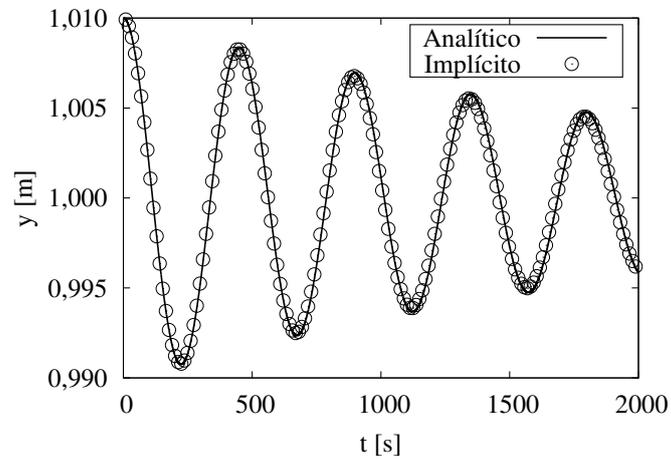
A Figura 5.7 mostra a representação esquemática para este caso. No início das simulações, um formato elipsoidal prolato é imposto na partícula com $L = 0,00105$ m como eixo maior e eixo menor B , sendo este definido para atingir o volume equivalente à esfera com raio $R = 0,001$ m. Esta partícula está imersa em um meio líquido quiescente e forças gravitacionais foram desconsideradas durante os cálculos.

O cenário apresentado é frequentemente empregado na validação de métodos, considerando combinações específicas de propriedades físicas que propiciem a obtenção de soluções comparativas. Devido à maior complexidade envolvida neste tipo de escoamento, uma fórmula geral para propriedades físicas arbitrárias requer cálculos numéricos [86].

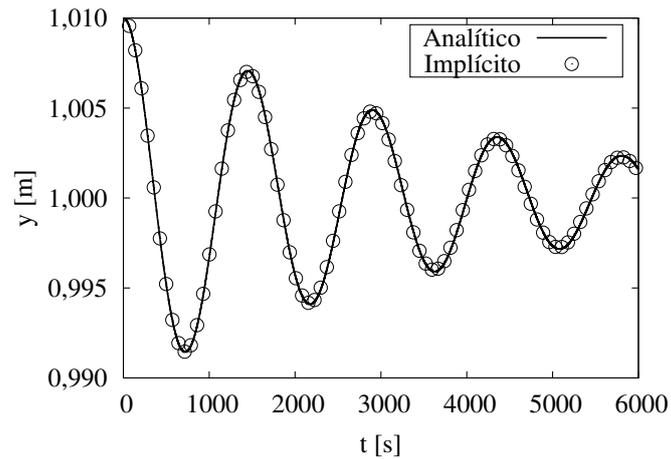
No entanto, é possível obter perfis analíticos aproximados para condições específicas, como uma gota viscosa imersa em meio contínuo de densidade e viscosidade



(a) $\sigma = 0,1 \text{ N/m}$



(b) $\sigma = 0,01 \text{ N/m}$



(c) $\sigma = 0,001 \text{ N/m}$

Figura 5.6: Comparação entre perfis analítico e numérico em um sistema com $\rho_B/\rho_A = 0,5$ e $\nu = 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ variando a tensão interfacial de $\sigma = 0,001$ a $0,1 \text{ N/m}$.

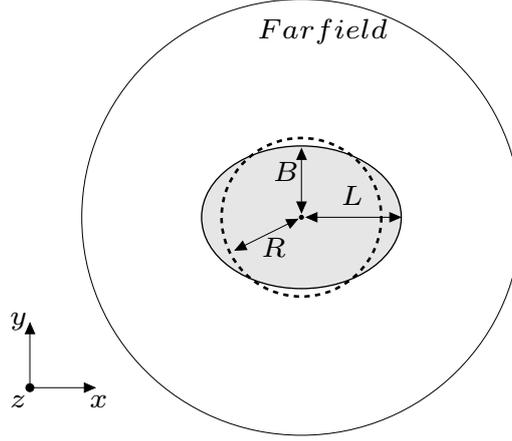


Figura 5.7: Representação do caso teste com oscilações devido à força de tensão interfacial.

negligenciáveis, ou o limite de baixa viscosidade para ambos os fluidos. O limite de baixas viscosidades é particularmente interessante para explorar a interação entre dois líquidos. Neste caso, a condição interfacial de continuidade nas velocidades tangenciais tende a gerar escoamento nas camadas adjacentes à interface. O efeito viscoso associado a este movimento se torna o fator dominante sobre o amortecimento das oscilações, mesmo quando a viscosidade de ambos os fluidos é baixa, como mostrado pela solução analítica de MILLER e SCRIVEN [86].

O equacionamento derivado por MILLER e SCRIVEN [86] é apresentado a seguir (Equações 5.7 a 5.9). Nesta formulação, a evolução temporal de pequenas oscilações é representada por uma relação exponencial simples $e^{-\beta t}$, na qual a parte real de β define o fator de decaimento, enquanto a contribuição imaginária determina a frequência de oscilação.

$$\beta = (\Omega + \Theta) \pm i (\beta^* - \Omega) , \quad (5.7)$$

onde

$$\beta^* = \sqrt{\frac{\sigma(l-1)l(l+1)(l+2)}{R^3\Gamma}} , \quad \Omega = \frac{(2l+1)^2 \sqrt{\beta^* \mu_A \mu_B \rho_A \rho_B}}{2\sqrt{2}R\Gamma(\sqrt{\mu_A \rho_A} + \sqrt{\mu_B \rho_B})} , \quad (5.8)$$

$$\Theta = \frac{(2l+1)[2(l^2-1)\mu_A^2\rho_A + 2l(l+2)\mu_B^2\rho_B + \mu_B\mu_A(\rho_A(l+2) - \rho_B(l-1))]}{2R^2\Gamma(\sqrt{\mu_A\rho_A} + \sqrt{\mu_B\rho_B})^2} , \quad (5.9)$$

o parâmetro β^* representa a frequência natural de oscilação para dois fluidos invíscidos, que inclui $\Gamma = \rho_B l + \rho_A(l+1)$, $l = 2$ como o modo de oscilação e R sendo o raio da esfera equivalente. Em contraste com o caso de fluidos invíscidos [70], a solução para dois fluidos de baixa viscosidade requer os termos adicionais Ω e Θ para representação da frequência e decaimento das oscilações.

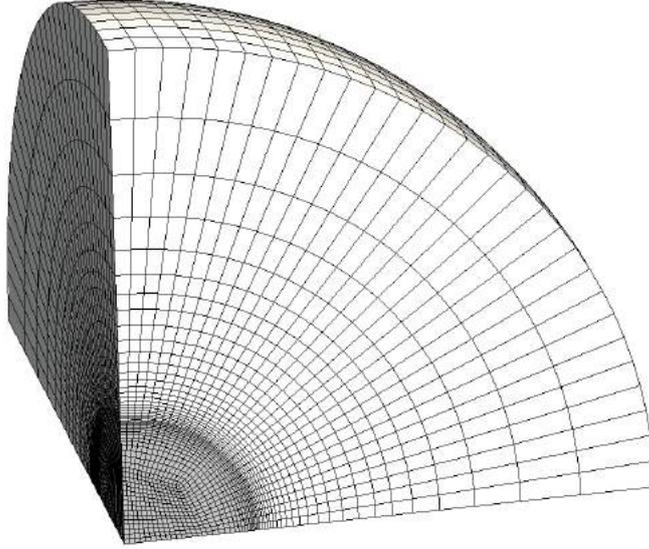


Figura 5.8: Parte da malha hexaédrica inicial associada com a computação em um processador, para o caso de oscilações na gota em repouso.

Além de MILLER e SCRIVEN [86], PROSPERETTI [96] também propõe uma formulação analítica para o mesmo problema, adicionando um termo na taxa de decaimento que teria sido previamente ignorado, como indicado na Equação 5.10. Ambas as soluções serão usadas para comparação com resultados numéricos.

$$\beta = (\Omega + \Theta - \Psi) \pm i (\beta^* - \Omega) , \quad \Psi = \frac{(2l + 1)^4 \mu_A \rho_A \mu_B \rho_B}{4R^2 \Gamma^2 (\sqrt{\mu_A \rho_A} + \sqrt{\mu_B \rho_B})} . \quad (5.10)$$

Embora as viscosidades cinemáticas adotadas variem dentro de uma gama de valores pequenos, ou seja, $10^{-6} - 10^{-7} m^2 s$, deve-se ter em mente que a aproximação de baixa viscosidade foi realmente derivada para o limite de viscosidades cinemáticas nulas, ou seja, $\nu_A \rightarrow 0$ e $\nu_B \rightarrow 0$. Não obstante, os perfis analíticos fornecem uma boa base de comparação para avaliar o potencial do código para lidar com sistemas líquido-líquido de diferentes tensões interfaciais.

As propriedades do fluido foram selecionadas para corresponder a configurações reais recomendadas como sistemas modelo para extração líquido-líquido [11, 38]. Os casos simulados compreendem três conjuntos de propriedades físicas para representar sistemas com tensão interfacial alta, média ou baixa. Tabela 2.1 mostra que a água foi adotada como fase contínua para todos os casos enquanto a fase dispersa era tolueno, n-butil acetato ou n-butanol. Os passos de tempo, respectivamente, adotados para esses casos foram $\Delta t = 0,5 \times 10^{-5}$, $1,0 \times 10^{-5}$ e $2,5 \times 10^{-5} s$.

A malha tridimensional empregada nas simulações contém perto de 250.000 células hexaédricas, com maior nível de refino próximo à interface. Cerca de 100.000 nós pertencem à gota enquanto as outras 150.000 representam o meio contínuo. A malha é segmentada em 8 partes iguais para cálculos em paralelo (Figura 5.8).

Tabela 5.3: Resultados de taxa de decaimento e frequência para os casos de oscilação.

		Taxa de Decaimento	Frequência
Tolueno/Água	Analítico (M)*	19,05	412,33
	Analítico (P)**	17,87	412,33
	Numérico	18,19	408,42
N-Butil Acetato/Água	Analítico (M)	17,11	255,50
	Analítico (P)	15,65	255,50
	Numérico	15,81	251,34
N-Butanol/Água	Analítico (M)	19,62	80,14
	Analítico (P)	15,99	80,14
	Numérico	17,45	81,69
	Numérico***	17,44	81,69

* Analítico (M) se refere a solução de MILLER e SCRIVEN [86]

** Analítico (P) se refere a solução de PROSPERETTI [96]

*** O mesmo caso simulado com uma malha de 500.000 nós

Considerando a forma esférica de equilíbrio como a linha tracejada na Figura 5.7, a comparação entre resultados analíticos e numéricos considera a oscilação da posição da interface em torno do raio R . As posições da interface que foram monitoradas se referem às extremidades nas direções x e y , representadas respectivamente pelos eixos maior L e menor B do elipsoide prolato inicial de acordo com a Figura 5.7.

A Tabela 5.3 apresenta os resultados calculados para taxa de decaimento e frequência referentes aos três sistemas de avaliação. A frequência de oscilação numérica foi determinada usando o diagrama de Lomb [95], enquanto o fator de decaimento foi estimado ajustando uma função exponencial aos picos de amplitude do eixo principal com o método de mínimos quadrados. De forma geral, os resultados numéricos para os três sistemas concordam com as soluções analíticas selecionadas.

Adicionalmente, a Figura 5.9 descreve a evolução temporal da posição do eixo principal para o caso água/tolueno, que representa um sistema de tensão interfacial alta. Observa-se uma excelente concordância entre soluções analíticas e numéricas. Além da reprodução dos perfis de decaimento, a frequência numérica apresentou um desvio de apenas 0,95% em relação às previsões analíticas.

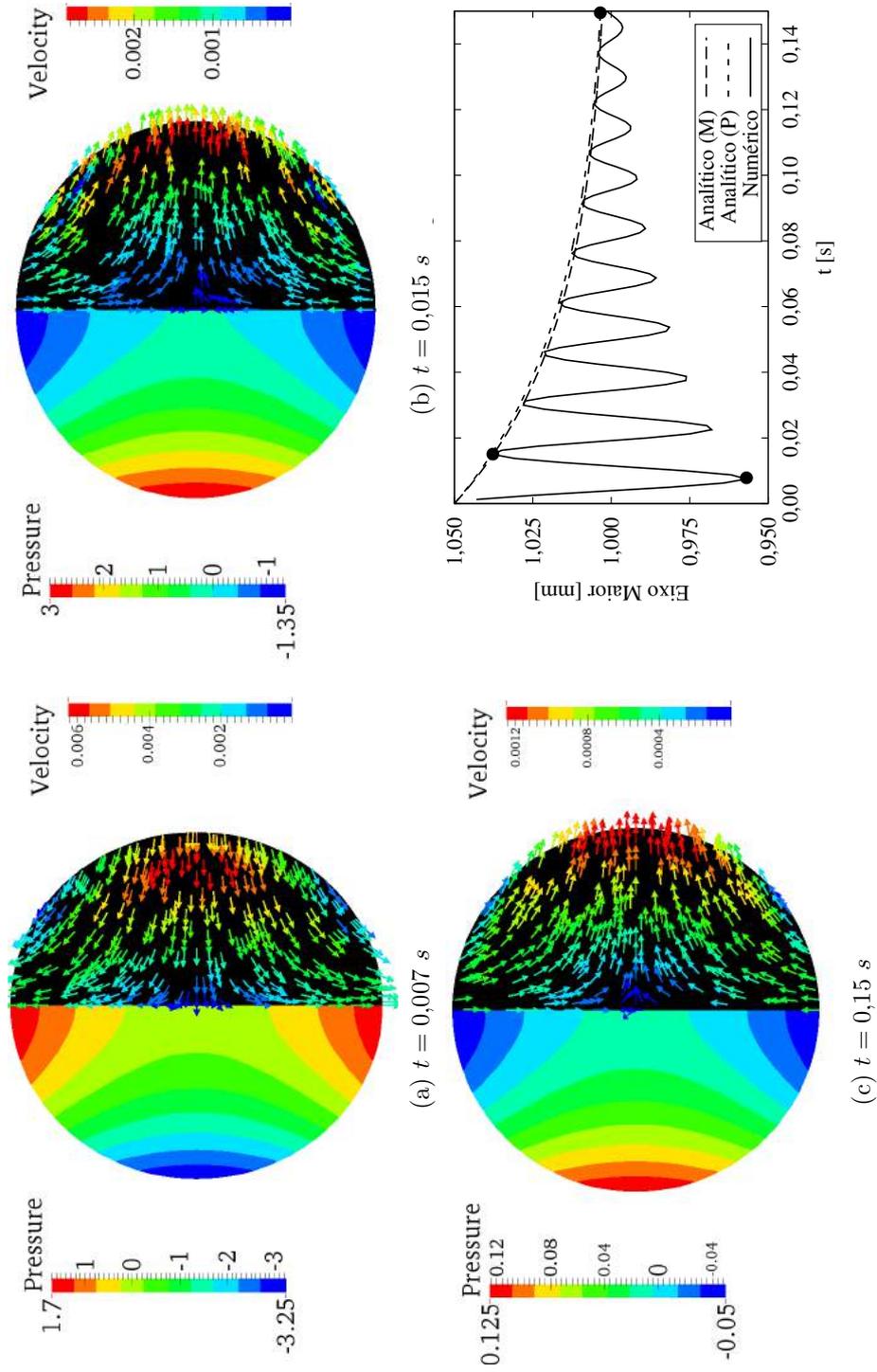


Figura 5.9: Resultados para o comportamento transiente de uma gota de tolueno inicialmente elipsoidal imersa em um meio contínuo de água, incluindo uma comparação com os perfis de decaimento analíticos de MILLER e SCRIVEN [86] (M) e PROSPERETTI [96] (P) para o eixo maior da elipse L .

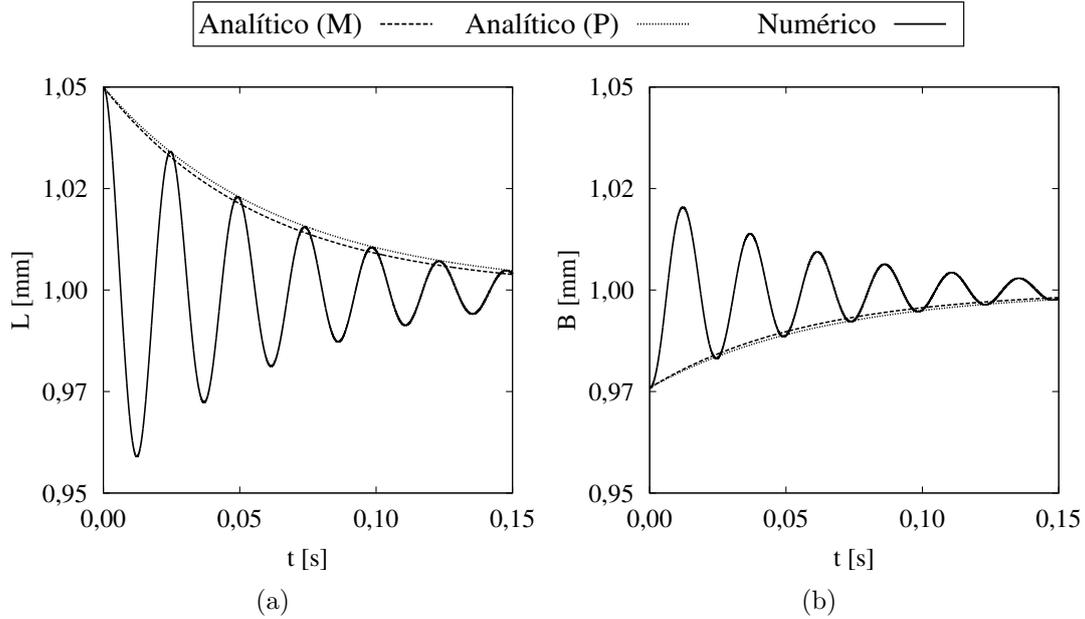


Figura 5.10: Comparação entre perfis de decaimento analíticos de Miller e Scriven [86] (M) e Prosperetti [96] (P) com a solução numérica para oscilações nos eixos maior L (a) e menor B (b) da elipse do sistema n-butil acetato/água.

A Figura 5.9 também mostra os contornos de pressão e vetores velocidade para três instantes: (a) em $t = 0,007$ s o eixo principal atinge seu ponto mínimo; (b) $t = 0,015$ s exibe o segundo ponto máximo alcançado após o deslocamento inicial; e (c) $t = 0,15$ s representa o estado final da interface no final da simulação. Os vetores de velocidade são atenuados à medida que o formato se aproxima de esférico e a diferença de pressão máxima dentro da gota varia de $4,95$ Pa em $t = 0,007$ s até $0,175$ Pa após simular um total de 15 s.

Por fim, os outros dois sistemas simulados são analisados através da evolução temporal dos eixos maior (L) e menor (B) da elipse. As Figuras 5.10 e 5.11 indicam que o amortecimento dos picos de amplitude para ambos os eixos se aproximam dos perfis analíticos. Esta observação é suportada pela Tabela 5.3, uma vez que a taxa de decaimento estimada para os dois casos simulados está entre os valores das duas previsões analíticas. Além disso, os resultados da simulação reproduzem o comportamento oscilatório com desvios relativos abaixo de 2% para frequência.

A Figura 5.11 mostra que o sistema n-butanol/água apresenta períodos de oscilação maiores com amortecimento mais rápido. Esse comportamento resulta de uma grande contribuição viscosa ao balanço interfacial que, por sua vez, pode aumentar a dependência da qualidade da malha para a predição correta da posição da interface. Visando examinar essa influência, o mesmo caso foi simulado com uma malha mais refinada de aproximadamente 500.000 nós e espessura da primeira camada ao lado da interface de $0,75 \times 10^{-5}$ m frente a $1,5 \times 10^{-5}$ m da malha anterior.

Resultados descritos na Tabela 5.3 não mostram alterações significativas na pre-

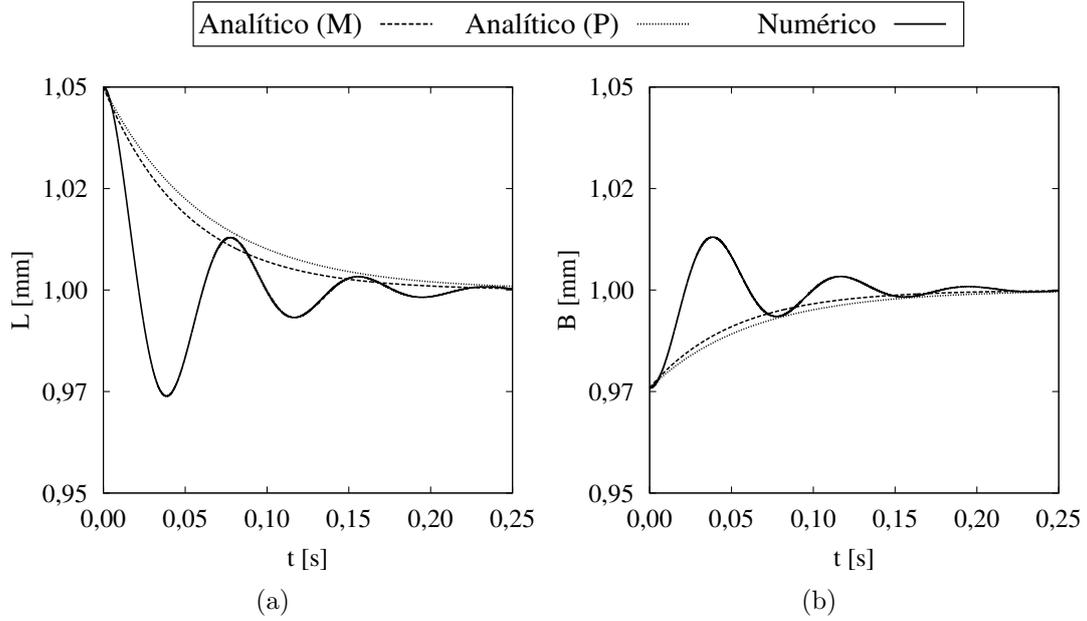


Figura 5.11: Comparação entre perfis de decaimento analíticos de Miller e Scriven [86] (M) e Prosperetti [96] (P) com a solução numérica para oscilações nos eixos maior L (a) e menor B (b) da elipse do sistema n-butanol/água.

visão do decaimento e frequência de oscilação. Embora este caso apresente os maiores desvios em termos de taxa de decaimento, ele também é o sistema com maior viscosidade em ambos os fluidos (Tabela 2.1), o que pode afetar a capacidade de previsão das soluções analíticas aproximadas.

5.1.3 Gotas sob Escoamento Cisalhante

O último caso de teste apresenta um sistema bifásico tridimensional submetido a escoamento cisalhante, onde uma das fases está na forma de gota, como ilustrado na Figura 5.12. A condição inicial do sistema é caracterizada por um meio quiescente que contém uma gota perfeitamente esférica ($R_0 = 0,001 \text{ m}$) e os efeitos gravitacionais são negligenciados. Os valores de velocidade impostos $|\mathbf{v}_{top}| = |\mathbf{v}_{bottom}| = 3,5 \text{ m/s}$ nas paredes superior e inferior produzem o cisalhamento de acordo com:

$$\dot{\gamma} = \frac{\mathbf{v}_{top} - \mathbf{v}_{bottom}}{H}, \quad (5.11)$$

onde $H = 8 R_0$ é o comprimento total entre as paredes e $\dot{\gamma} = 875 \text{ s}^{-1}$ é a taxa de cisalhamento resultante para essas condições.

A deformação da gota será determinada pelo equilíbrio entre as tensões decorrentes do cisalhamento e da força de tensão interfacial que atua para manter o formato esférico da gota. A interface eventualmente alcançará uma forma estacionária elipsoidal com eixos maior L e menor B , orientados com coordenadas modificadas de $x^* - y^*$, conforme ilustrado pela Figura 5.12. Essa rotação de eixos $x - y$ deve atingir

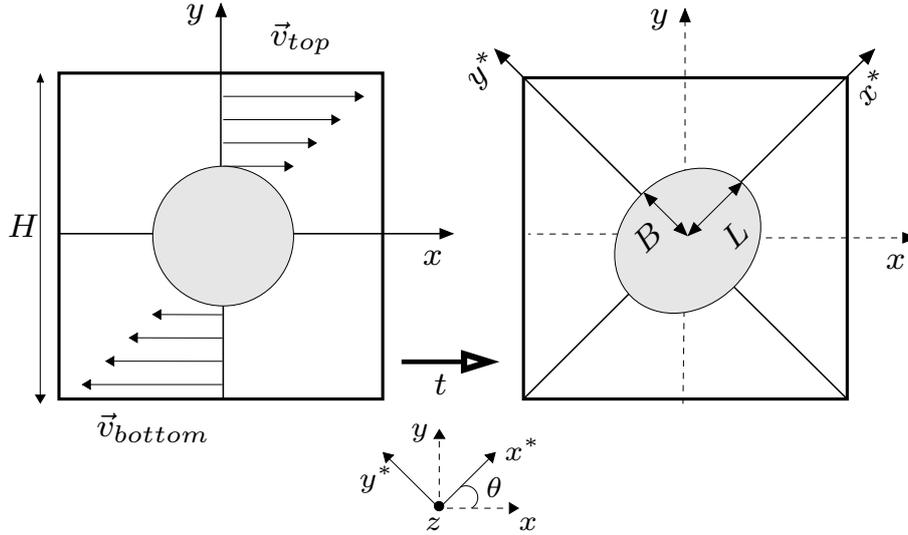


Figura 5.12: Representação de escoamento cisalhante e consequente deformação da gota para formato elipsoidal com B e L como eixos menor e maior, respectivamente.

$\theta = 45^\circ$ devido à simetria do escoamento cisalhante em relação ao centro da gota.

As propriedades físicas de ambos os fluidos foram selecionadas para coincidir com propriedades líquidas à temperatura ambiente com densidades $\rho_A = \rho_B = 1000 \text{ kg/m}^3$, viscosidades $\mu_A = 0,0015 \text{ Pa s}$ e $\mu_B = 0,001 \text{ Pa s}$ e tensão interfacial com valor uniforme de $\sigma = 0,035 \text{ N/m}$. A malha utilizada para simulações contém um padrão de refinamento semelhante ao apresentado anteriormente para simular as oscilações de forma de uma gota (Figura 5.8), exceto que os limites externos assumem uma forma plana como indicado pela Figura 5.12.

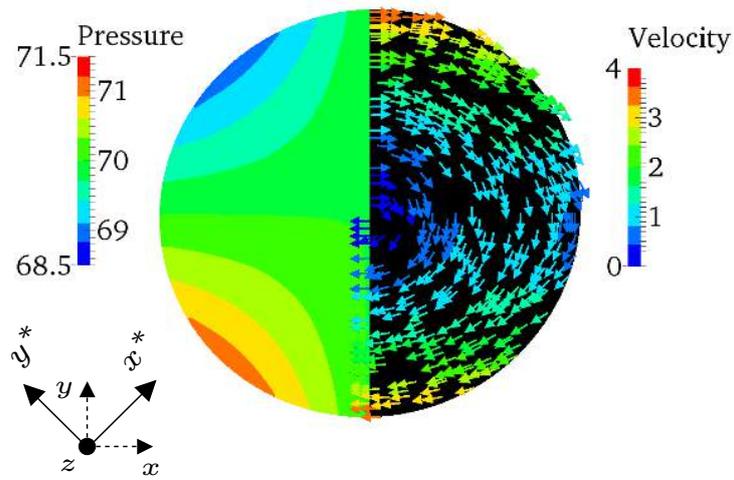
De acordo com a teoria de pequenas deformações de TAYLOR [118], a forma final da gota pode ser descrita por uma medida escalar:

$$D_f \approx Ca \frac{19\lambda + 16}{16(\lambda + 1)} ; \quad D_f = \frac{L - B}{L + B}, \quad (5.12)$$

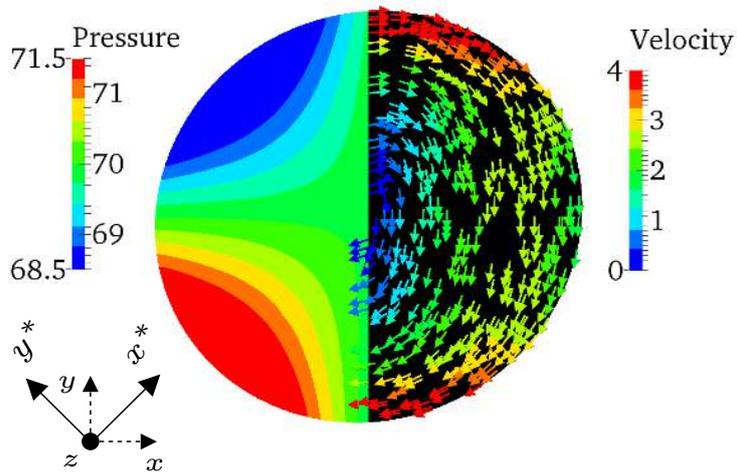
em que $Ca = \mu\dot{\gamma}R/\sigma$ é o número capilar e $\lambda = \mu_A/\mu_B$ é a proporção de viscosidade. O parâmetro de deformação D_f é definido como a relação entre a subtração e a soma dos semi-eixos maior (L) e menor (B) do elipsoide formado (Figura 5.12).

Apesar da sua simplicidade, a teoria de Taylor tem sido amplamente comparada com resultados experimentais [131] demonstrando sua confiabilidade como base de comparação para este caso. Portanto, a evolução do parâmetro escalar D_f no tempo é exibida na Figura 5.13. O formato da gota atinge um estado estacionário com valor aproximado de $D_f = 0,0273$, o que implica em um erro relativo de 1,8% quando comparado com o valor analítico de Taylor de $D_f = 0,0278$.

A Figura 5.13 descreve dois resultados intermediários com os campos de velocidade e pressão da fase dispersa. O comportamento transiente também é avaliado monitorando os eixos maior (L) e menor (B) do elipsoide que está se formando, como



(a) $t = 0,025 \text{ s}$



(b) $t = 0,12 \text{ s}$

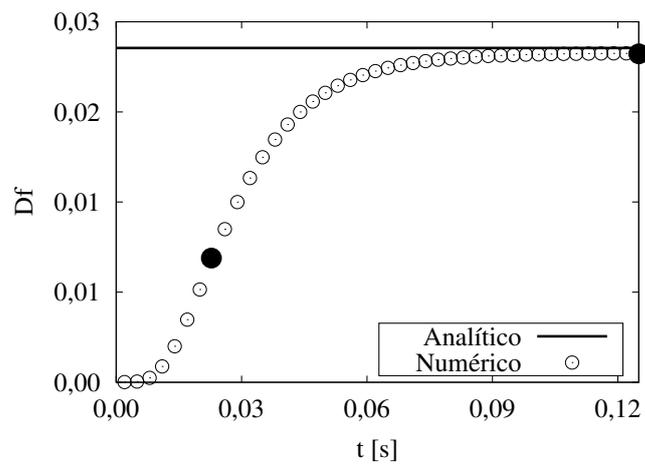


Figura 5.13: Comparação entre soluções analítica e numérica para a deformação da gota sob escoamento cisalhante, analisado pelo parâmetro D_f .

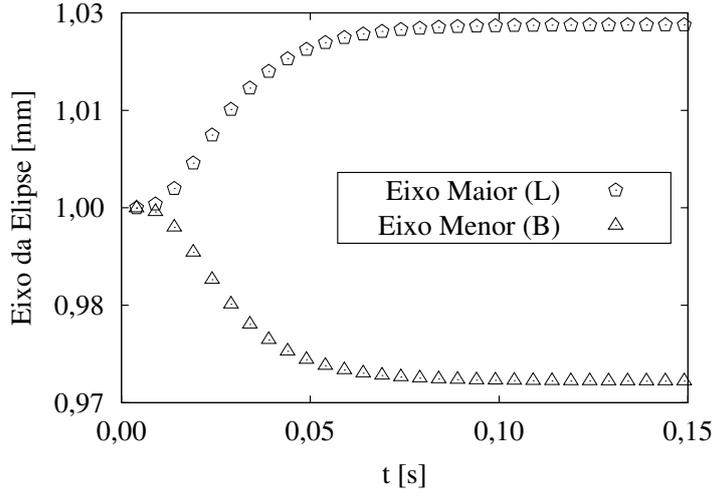


Figura 5.14: Resultados para deformação transiente da gota devido ao escoamento cisalhante, com raio inicial da gota de $R_0 = 0,001 \text{ m}$ e $Ca = 0,025$ ($\dot{\gamma} = 875 \text{ s}^{-1}$, $\sigma = 0,035 \text{ N/m}$, $\rho_B = \rho_A = 1000 \text{ kg/m}^3$ e $\mu_B/\mu_A = 1,5$).

mostra a Figura 5.14. Uma vez que a gota inicialmente tem uma forma esférica, os dois eixos são próximos do raio da esfera para tempos iniciais. A medida que o escoamento externo se desenvolve, o escoamento no interior da gota se aproxima do cisalhamento imposto. Ao final da simulação, os valores calculados para os eixos maior e menor foram $L = 1,028 \times 10^{-3} \text{ m}$ e $B = 9,733 \times 10^{-4} \text{ m}$, respectivamente. Além disso, a rotação total observada para os eixos $x - y$ foi de $\theta = 45^\circ$, mostrando que a simetria do escoamento foi incorporada no formato final da gota.

5.2 Ascensão de Gotas Individuais

Nesta seção examina-se a ascensão transiente de gotas individuais em meio líquido imiscível. Partindo do repouso, partículas esféricas tendem a ascender ou sedimentar por sua diferença de densidade com o meio contínuo e a ação da gravidade. Tratando-se de uma gota mais leve que o meio, esta ascende e sua interface pode deformar pela ação combinada dos escoamentos interno e externo e da tensão interfacial.

O presente estudo de caso visa representar o cenário experimental de WEGENER *et al.* [139] com simulações tridimensionais, nas quais gotas de tolueno ascendem em água purificada. Desta forma, são utilizadas as propriedades físicas do sistema tolueno-água descritas na Tabela 2.1. A partir das simulações, a dinâmica de ascensão pode ser avaliada em termos dos vetores aceleração, velocidade e deslocamento da gota, i.e. \mathbf{a}_{CM} , \mathbf{v}_{CM} e \mathbf{x}_{CM} . Estas variáveis são calculadas de acordo com as definições de referencial móvel descritas anteriormente (Seção 3.2.2).

Ao adotar tal referencial, a gota permanece centralizada no domínio compu-

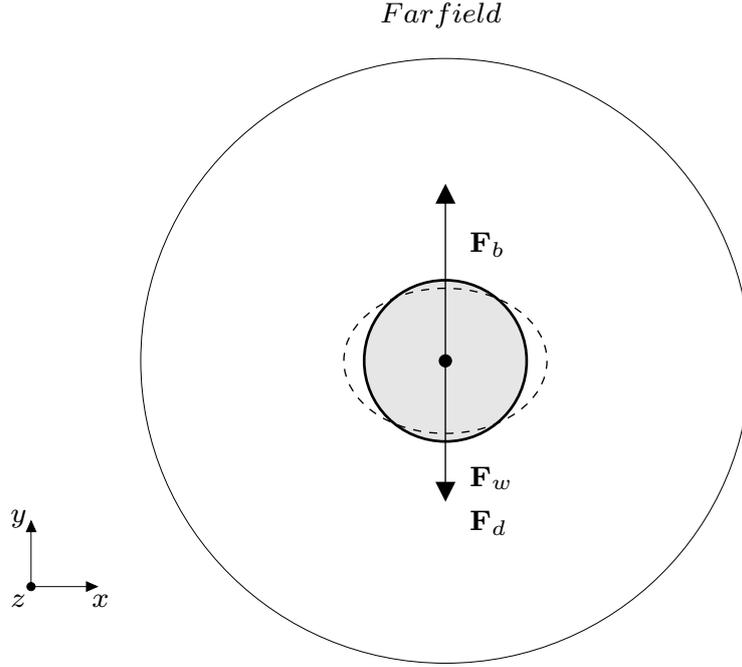


Figura 5.15: Representação esquemática referente a ascensão de gotas individuais em meio líquido quiescente. Sobre o centro de massa da gota agem as forças globais de empuxo \mathbf{F}_b , peso \mathbf{F}_w e arrasto \mathbf{F}_d .

tacional com o decorrer das simulações, como indicado na Figura 5.15. Sob esta perspectiva, o movimento da partícula também pode ser caracterizado por forças globais que atuam sobre seu centro de massa. Assim, o diferencial de pressão hidrostática, que gera o escoamento, é representado pela diferença entre as forças de empuxo (\mathbf{F}_b) e peso (\mathbf{F}_w). Além disso, uma força resistiva ao movimento \mathbf{F}_d surge devido à interação entre as fases pela interface.

A condição de contorno na fronteira externa do domínio é estabelecida de forma a garantir a preservação de massa global do sistema. Para tal, aplicam-se diferentes equacionamentos a depender do fluxo relativo nas faces deste contorno, i.e. $\phi_{r,f} = \dot{m}_f - \rho_f \dot{V}_f$. Para valores positivos, há fluido entrando no domínio e então se especifica a velocidade da gota para as faces juntamente com pressão nula, i.e. $\mathbf{v}_f = -\mathbf{v}_{CM}$ e $p_f = 0$. Para faces com fluxo relativo negativo, aplica-se uma condição de contorno de derivada normal nula para pressão e velocidade.

A malha computacional inicial é representada na Figura 5.16. Visando evitar efeitos da condição de contorno na movimentação da gota, adota-se um extenso domínio computacional, com tamanho total de $10 \times D$. Em adição, a malha contempla um refinamento próximo à interface, caracterizando uma distância de $0,01 D$ na direção normal entre elementos adjacentes a este contorno, similar a casos anteriores (Seção 5.1.2). Na direção tangencial, parte-se de uma condição que fornece espaçamento médio de $0,04 D$, seguindo recomendações de TUKOVIĆ [124].

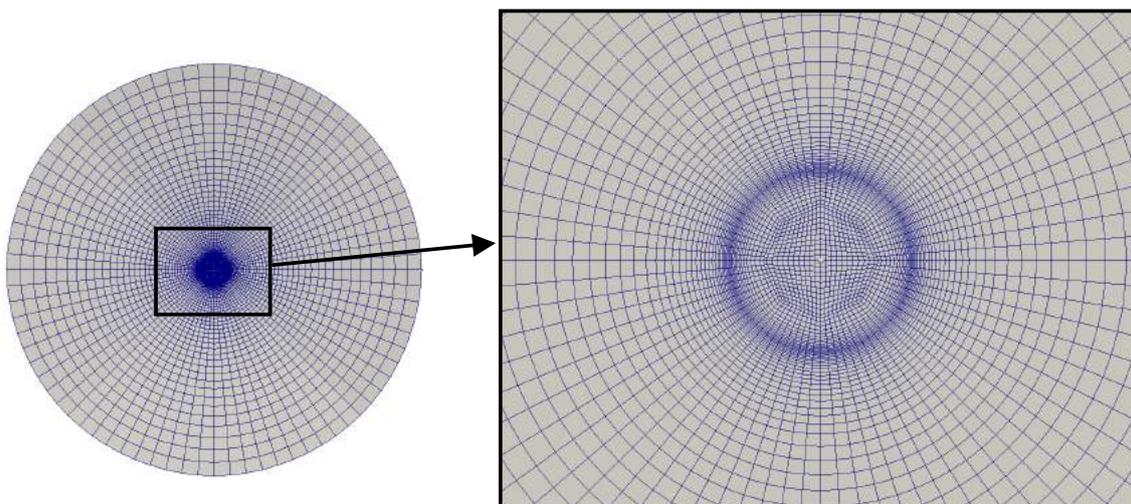


Figura 5.16: Malha hexaédrica inicial utilizada para o caso de gotas ascendentes em meio quiescente.

Como a quantidade de faces representando a interface depende desse refino tangencial, deve-se garantir que o espaçamento adotado nesta direção é adequado. Assim, realiza-se um teste de malha preliminar variando apenas o número de divisões angulares, como indicado na Figura 5.17. Os valores propostos de 20, 24 e 30 divisões angulares implicam em espaçamentos médios na direção tangencial à interface de $0,04 D$; $0,03125 D$ e $0,025 D$, respectivamente.

Estas configurações de malha são aplicadas para o caso de diâmetro inicial $D = 3,2 \text{ mm}$, no qual são esperadas deformações significativas na gota, mas sem oscilações na velocidade de ascensão. Neste cenário, ao iniciar o movimento de ascensão, a resistência oferecida pelo meio contínuo resulta no progressivo achatamento da parte frontal da gota. Após o tempo de simulação de $T = 2 \text{ s}$, o formato da gota já está estacionário e a deformação total é ilustrada na Figura 5.18.

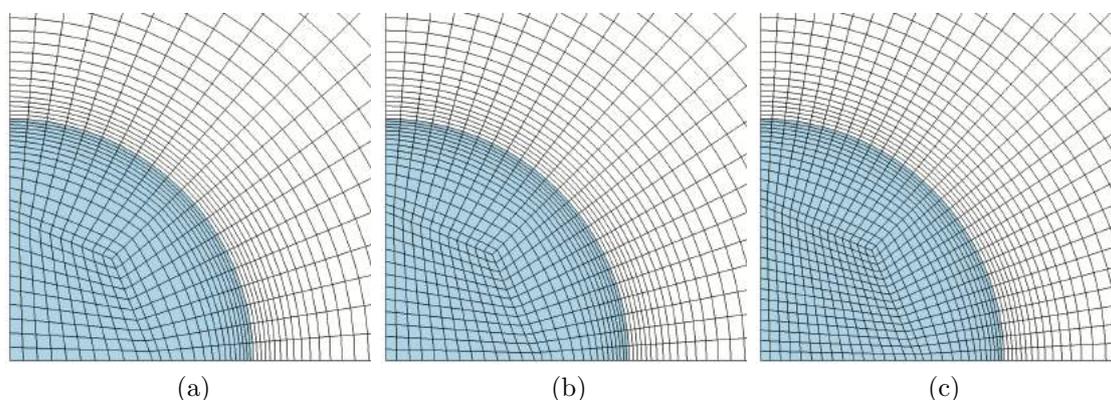


Figura 5.17: Representação ilustrativa de malhas avaliadas variando o número de divisões angulares por bloco entre: (a) 20, (b) 24 e (c) 30 divisões.

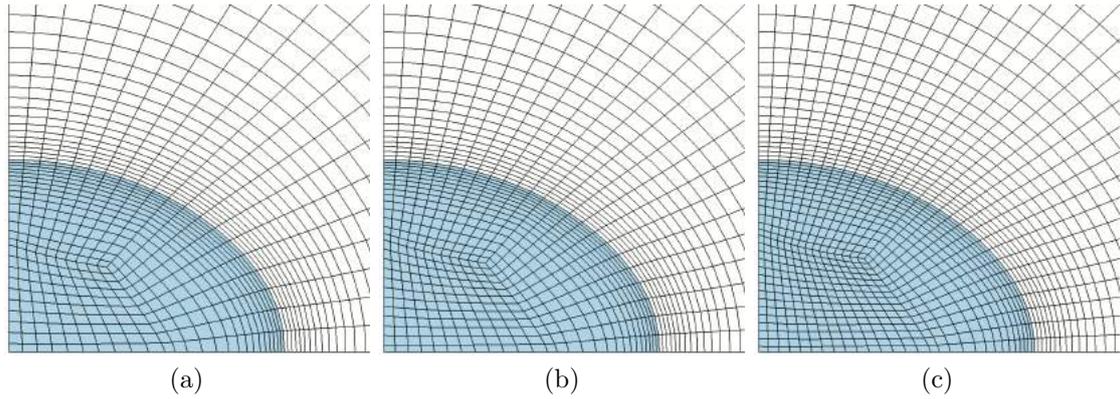


Figura 5.18: Deformação das malhas avaliadas após simulação de $T = 2$ s para: (a) 20, (b) 24 e (c) 30 divisões angulares.

A Tabela 5.4 apresenta uma comparação entre os três casos simulados. Primeiramente, reportam-se as características de malha, como o número total de faces na interface e de nós na malha computacional. Por causa da estrutura de blocos empregada, o tamanho da malha interfacial é diretamente proporcional ao quadrado do número de divisões tangenciais. Além disso, uma variação no número de segmentos angulares se propaga por todo domínio computacional, de forma que as modificações propostas afetam significativamente o tamanho total da malha resultante.

Os resultados reportados na Tabela 5.4 mostram que o tempo computacional requerido para simular $T = 2$ s aumenta significativamente com mais divisões angulares. Isto se dá porque o tamanho da malha impacta não só sobre a resolução do sistema linear, mas também sobre o custo dos procedimentos de movimentação da interface e ajuste da malha volumétrica. Apesar desse impacto considerável sobre o tempo de execução, as modificações propostas (24 e 30 divisões) exibem um efeito limitado sobre a previsão do movimento da gota. Em termos da velocidade máxima de ascensão, observa-se uma variação relativa inferior a 0,03 % entre os casos simulados. Desta forma, opta-se por utilizar a configuração de malha menos custosa (Figs. 5.16 e 5.17a) para as outras simulações.

Tabela 5.4: Propriedades das malhas avaliadas para diâmetro $D = 3,2$ mm.

Divisões angulares por bloco	Nº de faces na interface	Nº de VC's na malha	Tempo de execução [h]	Velocidade máxima [mm/s]
20	2.400	132.800	187	180,2
24	3.456	193.536	236	180,5
30	5.400	302.400	733	180,6

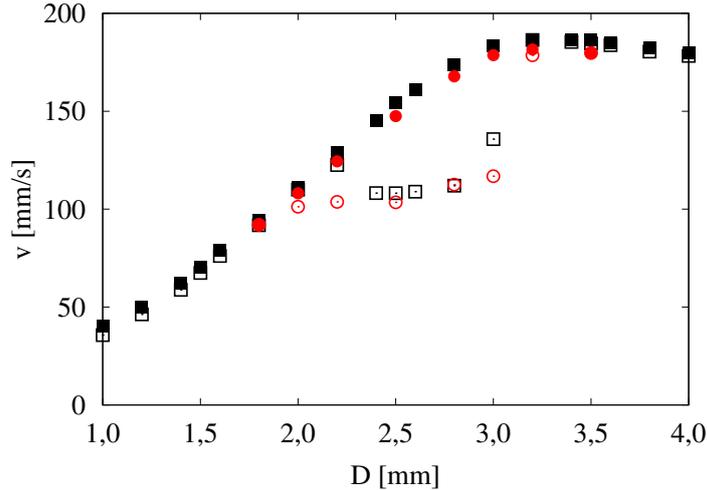


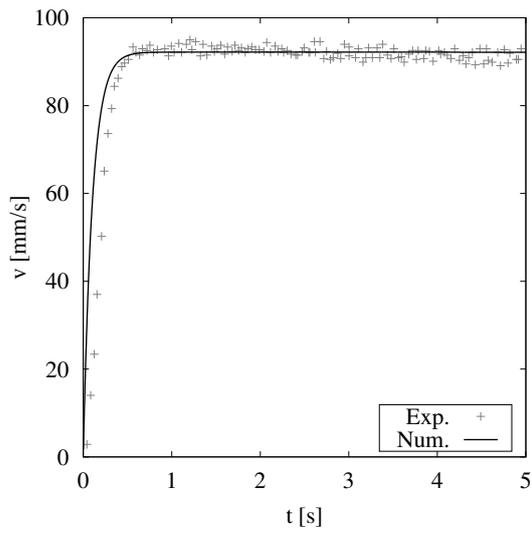
Figura 5.19: Resultados numéricos de velocidade máxima v_{max} (●) e terminal v_{final} (○) comparados com dados experimentais de WEGENER *et al.* [139] para velocidades máxima v_{max} (■) e média v_{media} (□).

Determinada a malha computacional, realizam-se simulações para gotas de tolueno na faixa de $1,5 \leq D \leq 3,5$ mm. Com intuito de avaliar inicialmente a representatividade das resoluções, a Fig. 5.19 apresenta uma comparação com os dados experimentais [139] para velocidade de ascensão. Para velocidade máxima v_{max} (Fig. 2.12), verifica-se que as simulações exibem excelente concordância com experimentos, apresentando erros inferiores a 5% para todos os casos simulados.

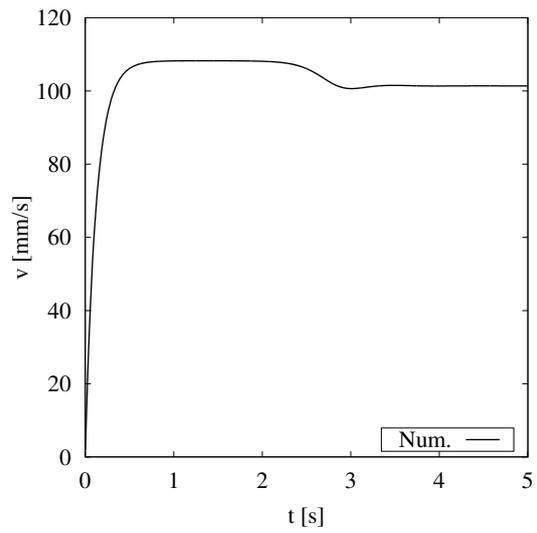
Além da velocidade máxima de ascensão, compara-se a velocidade média de WEGENER *et al.* [139] (Figura 2.12) com a velocidade terminal numérica, a qual é avaliada ao final das simulações, após o escoamento atingir um estado estacionário. Esta comparação claramente demonstra a capacidade das simulações para detectar a faixa de diâmetros oscilatória, o que também é corroborado pelos perfis transientes de velocidade de ascensão apresentados na Figura 5.19.

De forma geral, as simulações conseguem prever satisfatoriamente o comportamento exibido por gotas de tolueno na faixa de diâmetros de $1,5 \leq D \leq 3,5$ mm (Tabela 5.5). Tal intervalo também pode ser descrito em termos de números adimensionais, caracterizando faixas de $Eu = 0,085 - 0,462$, $Ar = 5.600 - 71.200$, $Re = 117 - 705$ e $We = 0,21 - 3,22$. Em todos os casos, verifica-se que as gotas aceleram rapidamente até atingirem a velocidade máxima de ascensão v_{max} . Para os maiores e menores diâmetros do intervalo avaliado, isto é, para $D < 2,0$ mm e $D > 3,0$ mm, a gota atinge um estado estacionário logo após essa aceleração inicial e sua velocidade terminal se iguala à máxima velocidade observada.

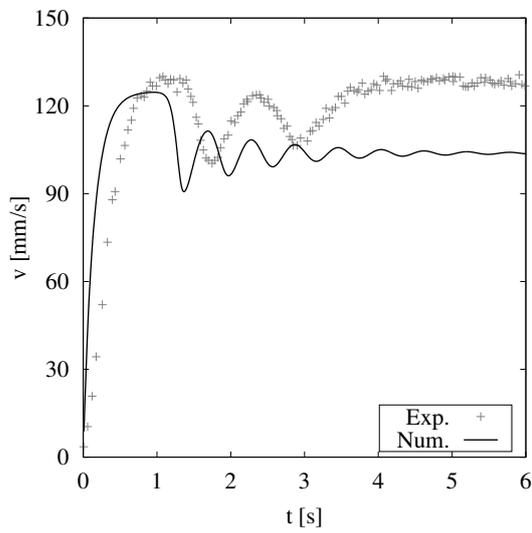
Partindo do limite inferior de diâmetros, a gota com $D = 2,0$ mm é a primeira a exibir um comportamento diferenciado. Após um aparente período de estabilidade,



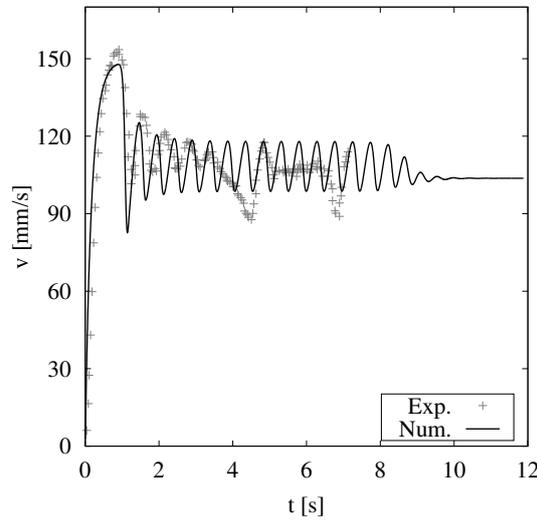
(a) $D = 1,8 \text{ mm}$



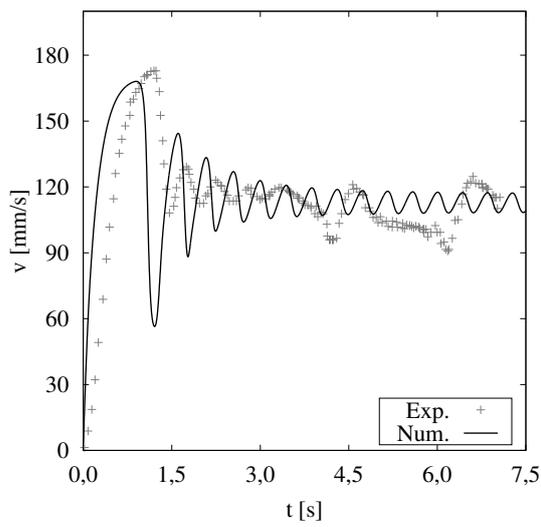
(b) $D = 2,0 \text{ mm}$



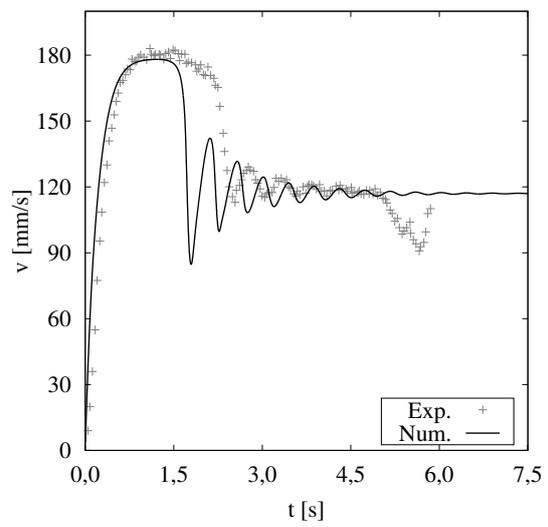
(c) $D = 2,2 \text{ mm}$



(d) $D = 2,5 \text{ mm}$



(e) $D = 2,8 \text{ mm}$



(f) $D = 3,0 \text{ mm}$

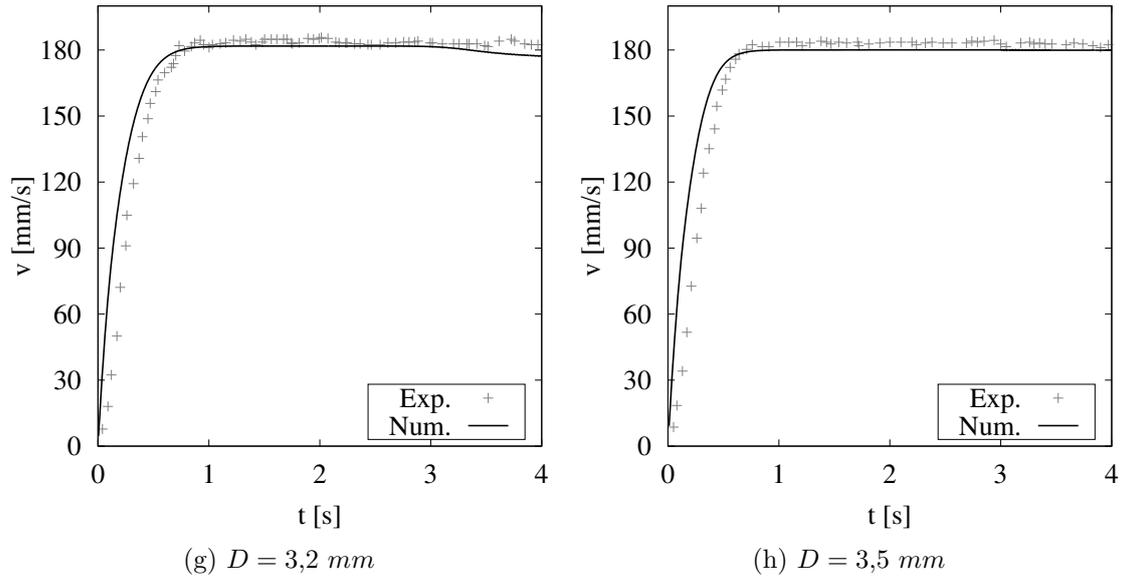


Figura 5.19: Resultados transientes de velocidade de ascensão para diâmetros iniciais variando entre $D = 1,8 - 3,5 \text{ mm}$.

Tabela 5.5: Resultados das simulações para gotas de tolueno em água ($Mo = 1,93 \times 10^{-11}$) na faixa de diâmetros de $1,5 \leq D \leq 3,5 \text{ mm}$, incluindo comparação com dados experimentais de WEGENER *et al.* [139].

D [mm]	Ar ($\times 10^4$)	Eo	Experimental		Numérico			
			v_{max} [mm/s]	v_{medio} [mm/s]	v_{max} [mm/s]	v_{final} [mm/s]	Re_{final}	We_{final}
1,5	0,56	0,085	70,53	67,43	69,76	69,46	116,7	0,206
1,8	0,97	0,122	94,49	91,81	92,11	92,01	185,5	0,434
2,0	1,33	0,151	111,16	109,96	108,08	101,23	226,8	0,584
2,2	1,77	0,183	128,95	122,52	124,39	103,69	255,5	0,674
2,5	2,60	0,236	154,43	108,17	147,54	103,50	289,8	0,763
2,8	3,65	0,296	173,60	112,01	167,83	112,56	353,0	1,011
3,0	4,48	0,339	183,31	135,76	178,66	116,82	392,5	1,166
3,2	5,44	0,386	186,74	186,39	181,53	178,57	640,0	2,907
3,5	7,12	0,462	186,31	184,64	179,72	179,72	704,5	3,220

sua velocidade é levemente reduzida próximo de $t = 2,5$ s, de forma que a velocidade final e máxima de ascensão deixam de ser coincidentes. Nos diâmetros subsequentes ($2,2 \leq D \leq 3,0$ mm), a rápida ascensão inicial é seguida de uma drástica redução na velocidade das gotas, que passam a oscilar intercalando momentos de aceleração e desaceleração. Para esta faixa de diâmetros, a velocidade terminal atingida ao final da simulação tem valor significativamente menor do que a velocidade máxima de ascensão adquirida pelas mesmas gotas em tempos iniciais.

A comparação com os dados experimentais mostra que a resolução numérica transiente se aproxima da dinâmica observada experimentalmente. Isto posto, destaca-se o potencial das simulações em explorar detalhes do escoamento, que certamente podem auxiliar na compreensão dos mecanismos envolvidos no comportamento oscilatório resultante. Nas próximas seções são investigadas diversas características do sistema tolueno-água, as quais trazem informações no que diz respeito à relação entre formato, trajetória e comportamento da esteira. Para tal, utilizam-se quatro casos base, com diâmetros iniciais específicos de $D = 2,0, 2,5, 3,0$ e $3,5$ mm.

5.2.1 Formato e Trajetória

Com o movimento da partícula, o balanço interfacial de forças passa a definir o formato dinâmico da interface. Este balanço é composto por tensões advindas do seio das fases e a força de tensão interfacial, as quais apresentam efeitos competidores que propiciam ou resistem à deformação.

Quanto maior o diâmetro inicial da gota, menos resistência esta deve oferecer contra a deformação. Isto se dá porque a força de tensão interfacial é proporcional a curvatura média que, para o formato esférico, pode ser calculada diretamente pelo inverso do raio. Além disso, geralmente também são mais significativas as outras forças atreladas a deformação, como é o caso da pressão hidrostática. Conseqüentemente, espera-se que gotas maiores deformem mais.

Como a ascensão se dá em um meio quiescente, uma gota inicialmente esférica tende a adquirir um formato elipsoidal oblato conforme as forças que provocam deformações ganham importância. Este comportamento é verificado na Figura 5.20a, que apresenta o gráfico correspondente a evolução da razão de aspecto para os quatro diâmetros sob avaliação. A razão de aspecto E fornece uma medida relativa entre os semi-eixos do elipsoide que se forma com a deformação, isto é:

$$E = \frac{B}{\sqrt{L_x L_z}} , \quad (5.13)$$

sendo que L_x e L_z representam os semi-eixos maiores, em direções perpendiculares a gravidade (Figura 5.15). Enquanto isso, o semi-eixo menor B é definido pela média

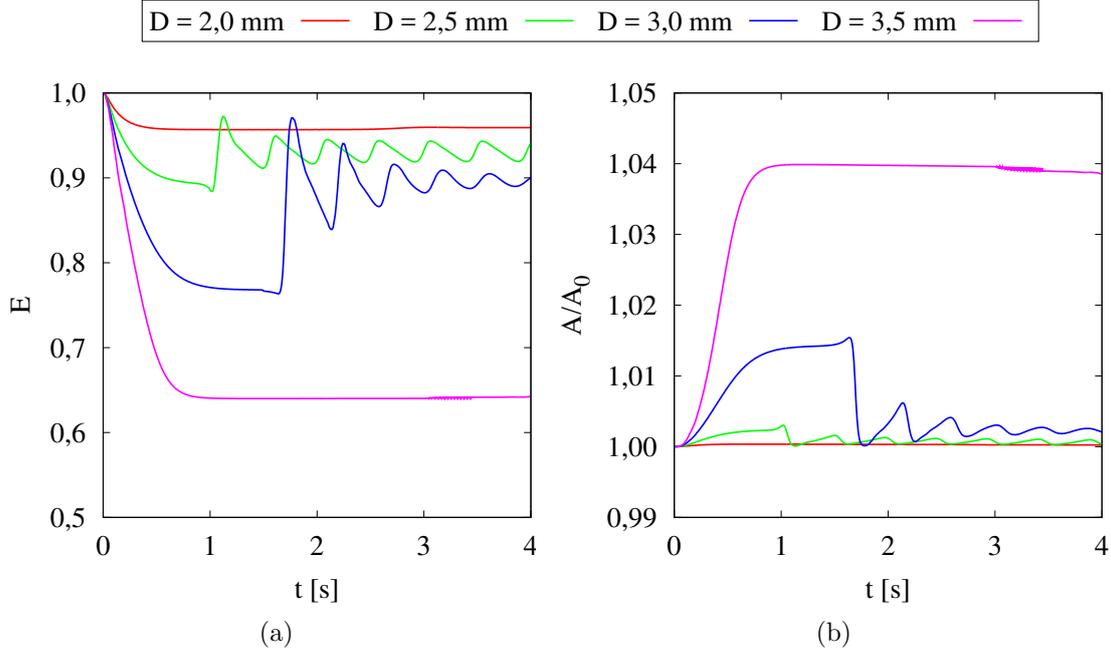


Figura 5.20: Resultados transientes de gotas, com diâmetros iniciais variando entre $D = 2,0 - 3,5 \text{ mm}$, avaliando: (a) a razão de aspecto E entre os eixos do elipsoide formado e (b) a área interfacial normalizada pela área da esfera inicial (A/A_0).

entre valores extremos da posição da interface no eixo y , i.e. $(y_{max} - y_{min})/2$.

Avaliando o diâmetro inicial $D = 2,0 \text{ mm}$ na Figura 5.20a, verificam-se desvios muito pequenos do formato esférico, com valores inferiores a 5%. Enquanto isso, gotas com $D = 3,5 \text{ mm}$ apresentam uma deformação considerável, com a razão de aspecto atingindo valores próximos a $E \approx 0,65$. Por outro lado, partículas de diâmetro $D = 2,5 \text{ mm}$ e $D = 3,0 \text{ mm}$ exibem comportamento intermediário, deformando inicialmente a $E = 0,89$ e $E = 0,77$ até o momento que se instauram as oscilações. Em contraste com o estudo de caso anterior (Seção 5.1.2), no qual as gotas oscilam tendendo ao formato esférico ($E = 1$) e passam por formas elipsoidais tipo prolato ($E > 0$) e oblato ($E < 0$), no atual cenário a oscilação ocorre em torno de um formato deformado elipsoidal oblato devido a ação da gravidade.

Na Figura 5.20b se apresenta a variação da área interfacial A em termos de uma normalização que utiliza a área da esfera inicial A_0 como referência. Os resultados indicam uma modificação negligenciável para a menor gota, enquanto que a maior gota exibe uma variação total positiva e estável em torno de 4% na área total.

Para a faixa oscilatória, as gotas parecem não conseguir sustentar as deformações iniciais e seguem em busca de um formato deformado com área mínima, de forma que a área interfacial atrelada se aproxima do valor esférico inicial. Esta observação é corroborada pelo exposto na Figura 5.21, em que se ilustra o formato das gotas no plano XY ($Z = 0$). A partir das Figuras 5.21b e 5.21c, é possível verificar que as

gotas de diâmetro intermediário retraem de um formato mais deformado para um menos deformado após as oscilações.

Com intuito de caracterizar variações locais no formato da gota, também são avaliados os perfis de curvatura média em quatro posições distintas da interface: nos pontos de y_{max} e y_{min} sobre o eixo y , assim como nas extremidades laterais $(L_x, 0, 0)$ e $(0, 0, L_z)$. Estes resultados são apresentados na Figura 5.22. Em todos os casos, averigua-se uma diferença considerável entre $\kappa_{y_{max}}$ e $\kappa_{y_{min}}$, mostrando que a curvatura é sensivelmente menor na posição frontal da gota, devido a resistência enfrentada durante a ascensão. Tal particularidade tende a gerar um diferencial de pressão entre as partes fronteira e traseira da gota, que deve impactar sobre as características de separação do escoamento.

Analisando as Figuras 5.22a a 5.22d em sequência, constata-se que a proporção dos valores de curvatura nos pontos avaliados vai se modificando com o aumento do tamanho inicial da gota. Para a menor gota, a mudança de curvatura no eixo alinhado com a gravidade é dominante. Conforme se aumenta o diâmetro, as deformações laterais se tornam cada vez mais significativas e passam a ocorrer oscilações na curvatura. Até que, para a gota de tamanho maior, o aumento da curvatura nas direções laterais x e z claramente a curvatura adquirida no eixo y , caracterizando uma estabilidade no formato elipsoidal oblato.

Outro aspecto notável na Figura 5.22 é o surgimento da diferença entre os perfis de curvatura referentes aos eixos perpendiculares à ascensão, indicando uma assimetria no formato da gota. O desvio entre as curvas κ_x e κ_z é inicialmente detectado para gota de $D = 2,0 \text{ mm}$ em torno de $t = 2,0 \text{ s}$, momentos antes da redução da velocidade de ascensão que ocorre próximo de $t = 2,5 \text{ s}$ (Figura 5.19b). Para $D = 2,5 \text{ mm}$ e $D = 3,0 \text{ mm}$, observa-se que a perda de simetria entre os eixos x e z ocorre pouco antes do início das oscilações na velocidade (Figuras 5.19e e 5.19f).

Com base na discussão apresentada, constata-se que as oscilações no perfil de velocidade tem certa ligação com modificações na forma. Para gotas na faixa oscilatória, observa-se o surgimento de uma assimetria no formato que é seguida por oscilações em torno de um elipsoide oblato. Contudo, tratam-se de variações sutis que possivelmente não são capturadas pela escala de visualização dos experimentos.

Para complementar a análise do formato das gotas, apresenta-se na Figura 5.23 o gráfico de Eötvös *versus* Reynolds para o sistema tolueno/água, mostrando ótima concordância entre os resultados numéricos e os dados experimentais de [139]. Nesta figura, também se verifica a proximidade dos casos avaliados ($D = 2,0 - 3,5 \text{ mm}$) à região em que ocorre uma sensível mudança de inclinação na curva de $Eo \times Re$, indicando a relação do comportamento oscilatório observado com uma transição entre a estabilização de formatos esféricos e elipsoidais.

Em se tratando da trajetória, avalia-se o caminho percorrido pelas gotas através

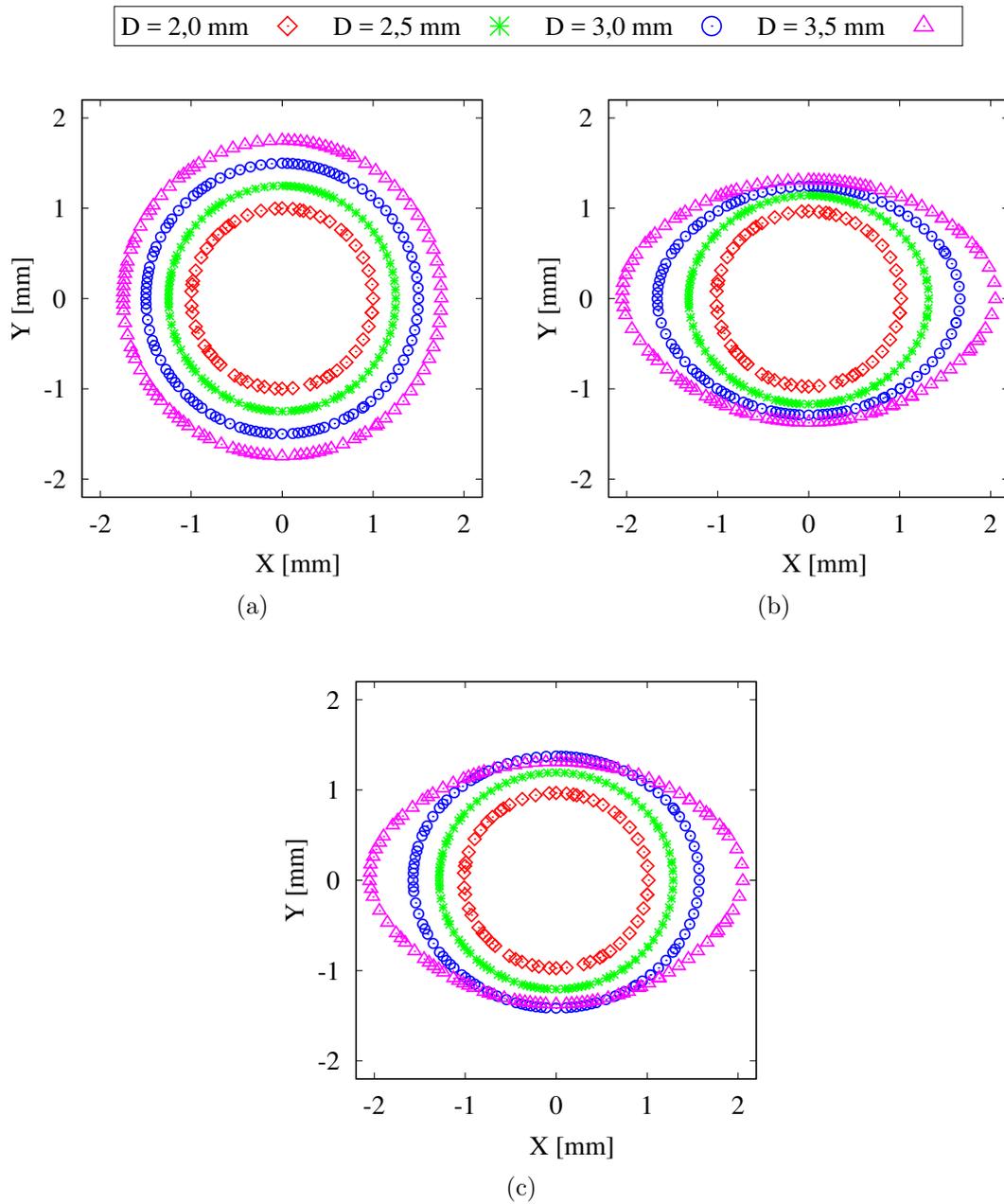


Figura 5.21: Formato das gotas analisado no plano XY ($Z = 0$) para: (a) tempo inicial, (b) tempo intermediário para o qual se tem a máxima área e (c) tempo final de simulação. Gotas de diâmetro inicial $D = 2,0; 2,5; 3,0$ e $3,5 \text{ mm}$ sendo representadas por diferentes cores.

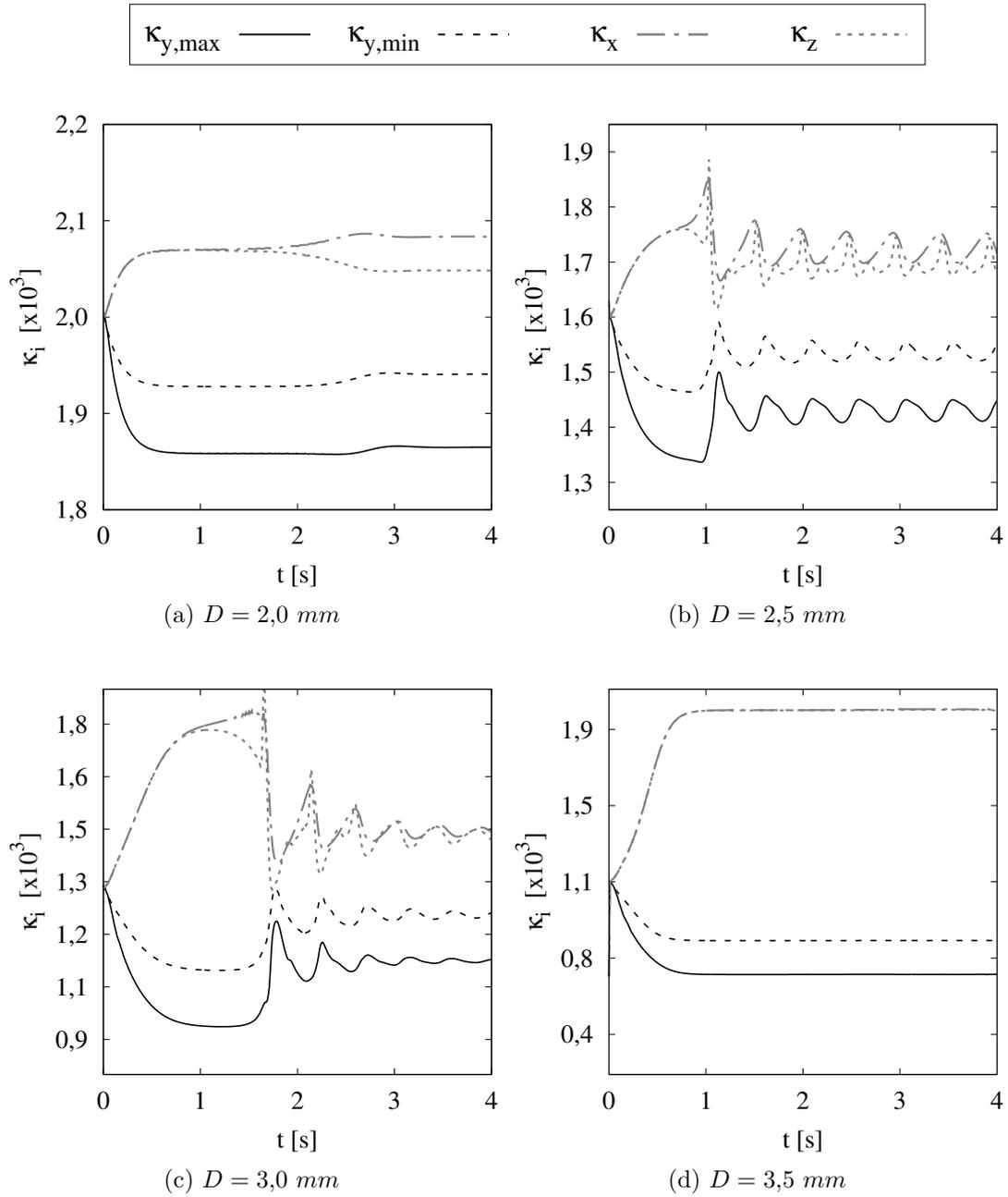


Figura 5.22: Resultados transientes de curvatura média κ avaliada em diferentes pontos da interface (L_x , L_z , $B_{y,min}$ e $B_{y,max}$).

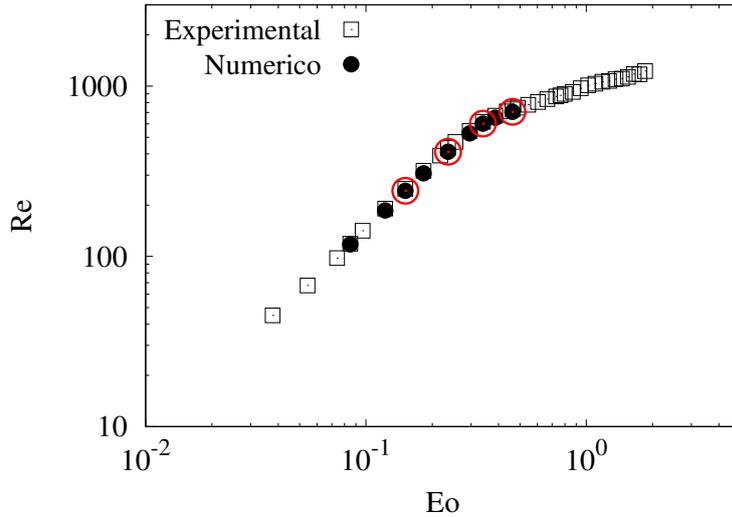


Figura 5.23: Gráfico de Eötvös *versus* Reynolds para o sistema tolueno/água, comparando com os resultados numéricos com os dados experimentais de [139]. Destaca-se ainda em vermelho os diâmetros iniciais de $D = 2,0; 2,5; 3,0$ e $3,5$ mm.

do vetor posição avaliado no centro de massa da partícula \mathbf{x}_{CM} , em concordância com a Fig. 3.5. Os resultados são exibidos na Figura 5.24, onde se ilustram as componentes do vetor posição no referencial inercial, cuja origem é o centro da gota em $t = 0$. Da Fig. 5.24c observa-se uma inclinação crescente com o diâmetro inicial das gotas, indicando o ganho de velocidade para as maiores partículas. Na mesma figura, ainda é possível verificar o momento que se instaura a oscilação na velocidade de ascensão pela mudança no coeficiente angular das curvas na direção y .

Avaliando as Figuras 5.24a a 5.24c em conjunto, observa-se que o deslocamento na direção de ascensão é claramente dominante em comparação com o movimento lateral. Enquanto a locomoção na direção vertical é da ordem de centenas de diâmetros, nos eixos laterais o deslocamento total não atinge nem 10% do raio. Apesar da existência destes pequenos desvios nas direções x e z , eles não aparentam ter forte relação com o mecanismo progenitor das oscilações na velocidade.

Não obstante, um comportamento diferenciado é observado para gota de $D = 2,5$ mm em tempos tardios da simulação. Na Figura 5.25 verifica-se que a gota adquire um movimento lateral considerável em torno de $t \approx 8$ s, atingindo velocidades significativas na direção z ($v_{z,final} = 26,9$ mm/s). Neste caso, tem-se indícios de que a manifestação do movimento secundário age no sentido de atenuar a oscilação na direção da gravidade, isto é, ao se iniciar o movimento lateral com aumentos substantivos em v_z observa-se o fim da oscilação em v_y . Com isso, a gota adquire movimento no plano ZY inclinado de 14,5 graus em relação ao eixo y .

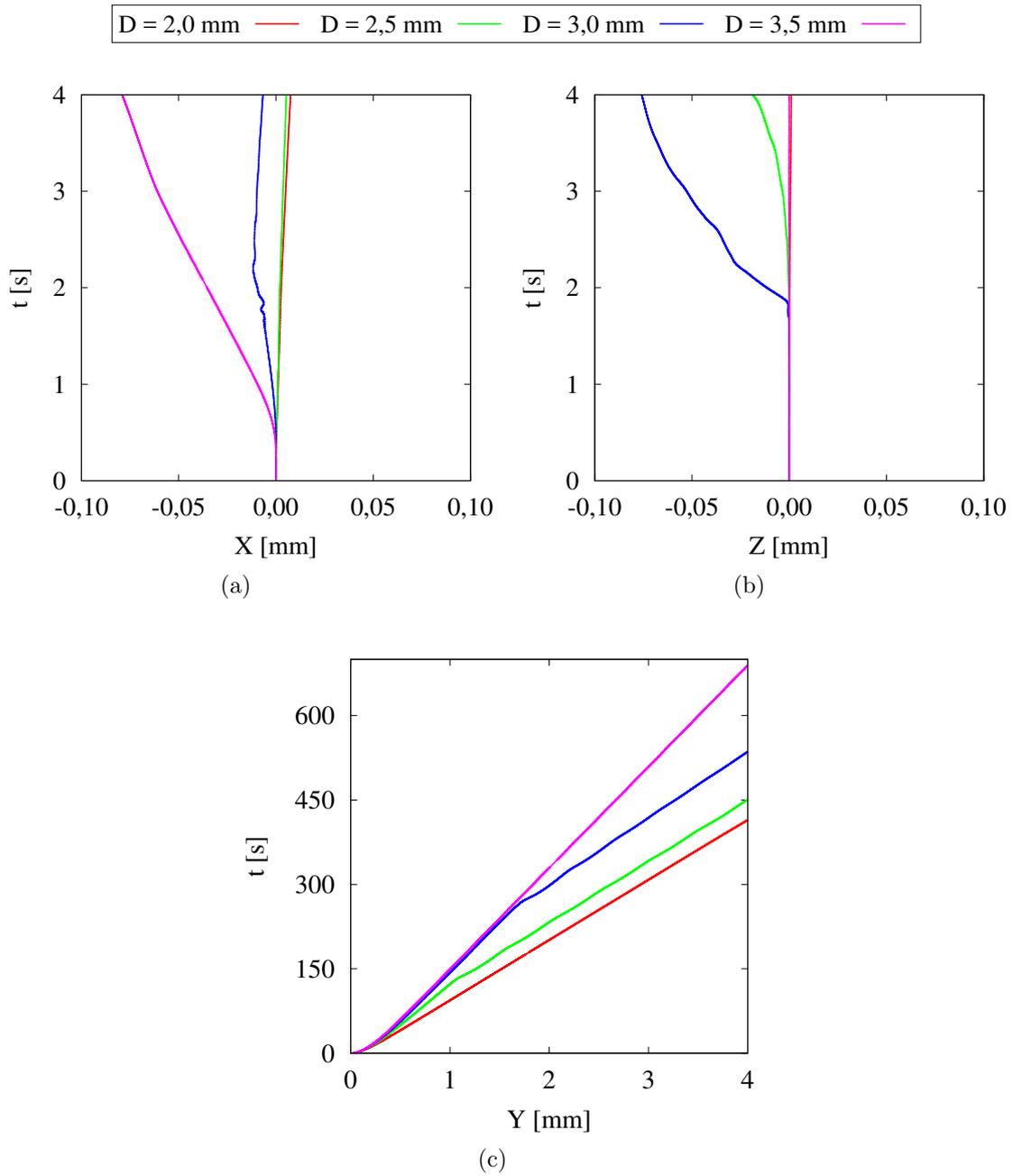


Figura 5.24: Resultados transientes de trajetória em: (a) plano XY ; (b) plano ZY ; e (c) direção vertical. Gotas com diâmetros iniciais de $D = 2,0$; $2,5$; $3,0$ e $3,5$ mm são representadas pelas curvas em vermelho, verde, azul e rosa, respectivamente.

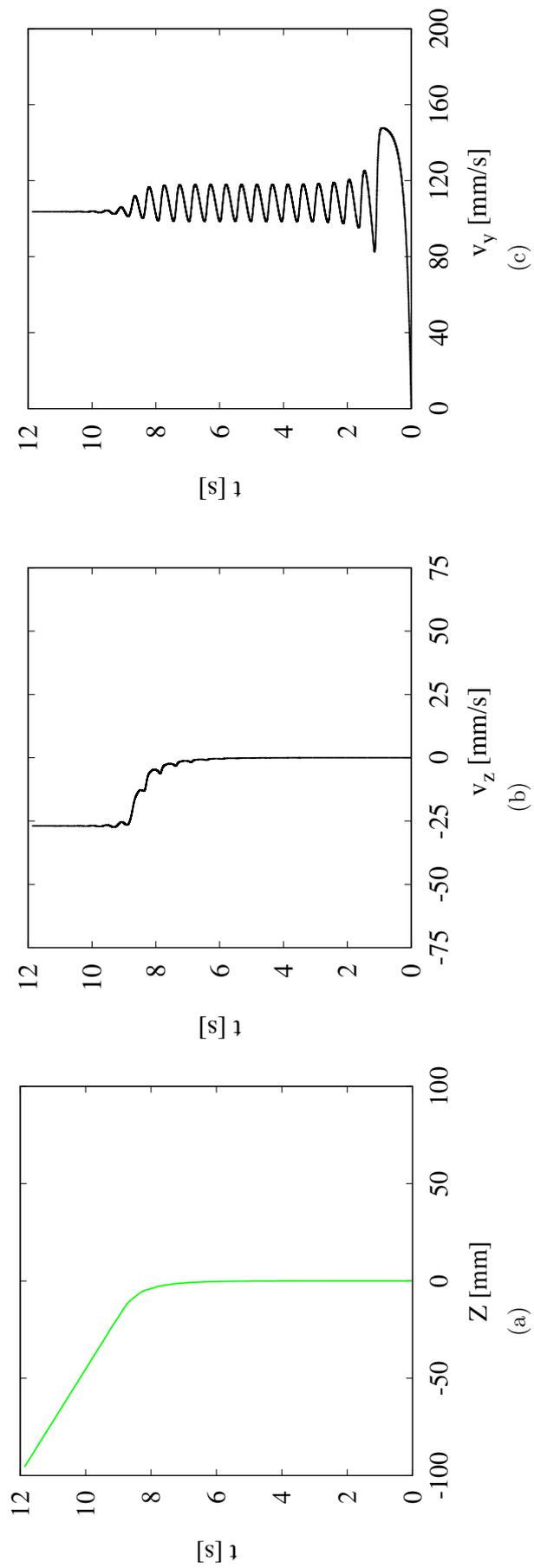


Figura 5.25: Resultados referentes a gota de $D = 2,5 \text{ mm}$ no tempo total de simulação $T = 12 \text{ s}$ para: (a) trajetória no plano ZY ; (b) velocidade lateral na direção z ; e (c) velocidade de ascensão na direção y .

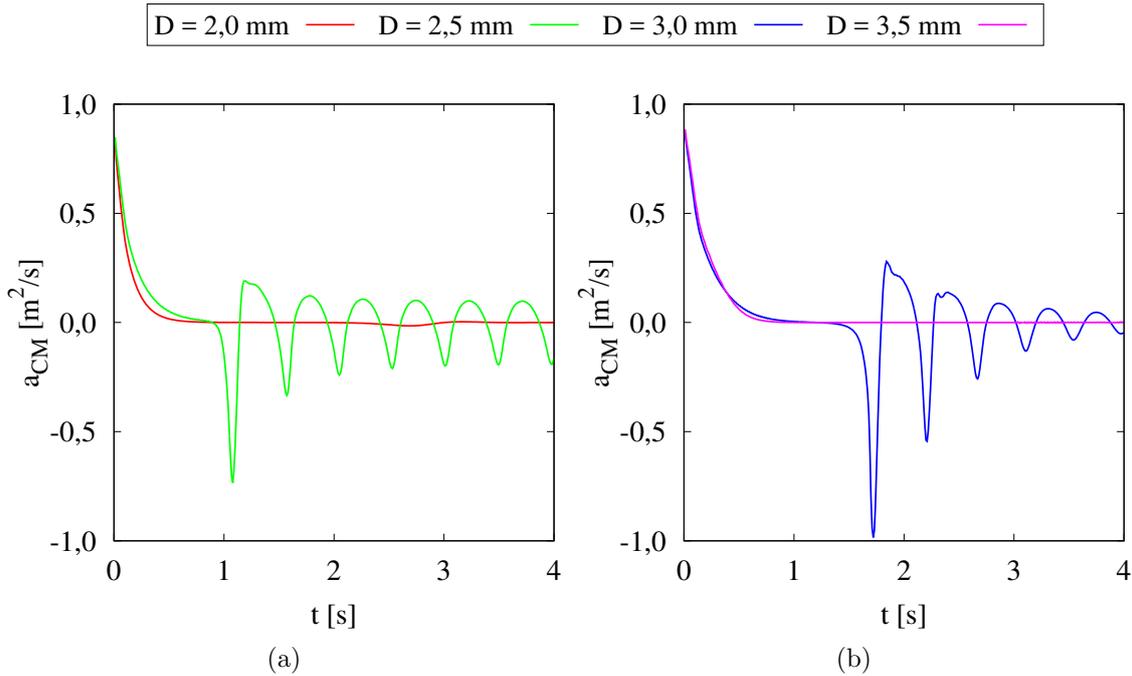


Figura 5.26: Resultados transientes de aceleração para gotas com diâmetro inicial variando entre $D = 2,0 - 3,5 \text{ mm}$.

5.2.2 Forças Interficiais

O movimento da partícula também pode ser avaliado em termos de sua aceleração, caracterizando as variações observadas sob a perspectiva de forças globais que atuam sobre o centro de massa das gotas (Seção 3.2.2). Com a resolução completa do escoamento e aplicação das condições de salto na superfície divisora, todas as forças globais podem ser computadas diretamente das simulações.

Os perfis transientes de aceleração para os diâmetros sob avaliação são apresentados na Figura 5.26. Gotas nos extremos do intervalo, isto é, com $D = 2,0 \text{ mm}$ e $D = 3,5 \text{ mm}$, adquirem uma aceleração inicial que vai sendo reduzida com o tempo. Até que as forças globais atuantes se equilibram e a gota atinge velocidade de ascensão constante, com aceleração resultante nula.

Em contrapartida, gotas na faixa de diâmetros oscilatórios apresentam um comportamento diferenciado. Após um aparente equilíbrio de forças, há uma drástica modificação no perfil de aceleração que resulta em valores negativos, sugerindo uma força resultante contrária ao movimento de ascensão. Em seguida, tem-se uma oscilação progressiva em torno da aceleração nula, a qual eventualmente é atingida. Esta análise traz informações sobre o balanço de forças, indicando que alguma força presente se torna predominante e age contra a gravidade, o que promove o comportamento oscilatório observado.

Com intuito de investigar a magnitude das forças que atuam sobre toda a in-

terface da gota, primeiro é necessário definir o cálculo das forças globais. Sobre a partícula agem inicialmente as forças de peso \mathbf{F}_w e empuxo \mathbf{F}_b , que serão constantes ao longo do tempo, pois dependem apenas do volume total da gota V_T e do diferencial de densidade entre as fases $\Delta\rho$, como mostra a Equação 5.14.

$$\mathbf{F}_b - \mathbf{F}_w = \oint_V \Delta\rho \mathbf{g} dV = (\rho_D - \rho_C)V_T \mathbf{g} . \quad (5.14)$$

A resistência ao escoamento experienciada por um corpo, como discutido anteriormente na Seção 2.1, resulta do acoplamento dinâmico entre as fases na interface (Apêndice A). Com isso, as duas fontes de resistência são: (i) as tensões viscosas, que geram a força de arrasto por fricção $\mathbf{F}_{v,d}$, e (ii) a distribuição de pressão ao longo da partícula, que dá origem a força de arrasto por forma $\mathbf{F}_{p,d}$. O equacionamento utilizado para cálculo de tais forças é dado por:

$$\mathbf{F}_{p,d} = \oint_I -\mathcal{P} \mathbf{n} dS = \sum_f -\mathcal{P}_f S_f \mathbf{n}_f , \quad (5.15)$$

$$\mathbf{F}_{v,d} = \oint_I 2\mu \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} dS = \sum_f \mu_f S_f [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n}(\nabla_S \cdot \mathbf{v})]_f , \quad (5.16)$$

onde as integrais de superfície devem ser avaliadas em toda malha superficial, de forma que \sum_f representa o somatório em todas as faces compondo a interface. Estas forças resistivas evoluem conforme o escoamento se desenvolve e as fases interagem.

Na Figura 5.27 apresenta-se a evolução temporal da componente na direção y das forças de arrasto sobre a fase contínua. Primeiramente, avalia-se a proporção entre a pressão e tensão viscosa na determinação da força resultante, variando o diâmetro inicial da gota. Considerando o menor diâmetro (Fig. 5.27a), tem-se que o efeito viscoso é ligeiramente superior ao arrasto por pressão e estes se tornam equivalentes após uma leve redução da fricção em $t = 2,5$ s.

Ao aumentar o diâmetro inicial da gota, a força resistiva de forma vai ganhando importância e prevalece para $D = 3,5$ mm (Fig. 5.27d). Para a faixa intermediária de diâmetros (Figs. 5.27b e 5.27c), um pico na força de pressão se manifesta, ao mesmo tempo que a força viscosa sofre um decréscimo. Com isso, a força resultante passa a oscilar, como indicado pelo perfil de aceleração (Figura 5.26).

O somatório das forças de arrasto $\mathbf{F}_{p,d} + \mathbf{F}_{v,d} = \mathbf{F}_d$ (Eqs. 5.15 e 5.16) segue o mesmo padrão exibido pela força \mathbf{F}_r dada pela soma das forças de empuxo e peso com a força resultante devido a aceleração, i.e. $\mathbf{F}_r = \mathbf{F}_b - \mathbf{F}_w + m\mathbf{a}_{CM}$. Todavia, observam-se pequenas variações entre os dois perfis, que possivelmente tem relação com os fatores de relaxação (Seção 3.2.2) usados no cálculo da aceleração. Investigações adicionais acerca do referencial não-inercial podem esclarecer a origem dessa diferença.

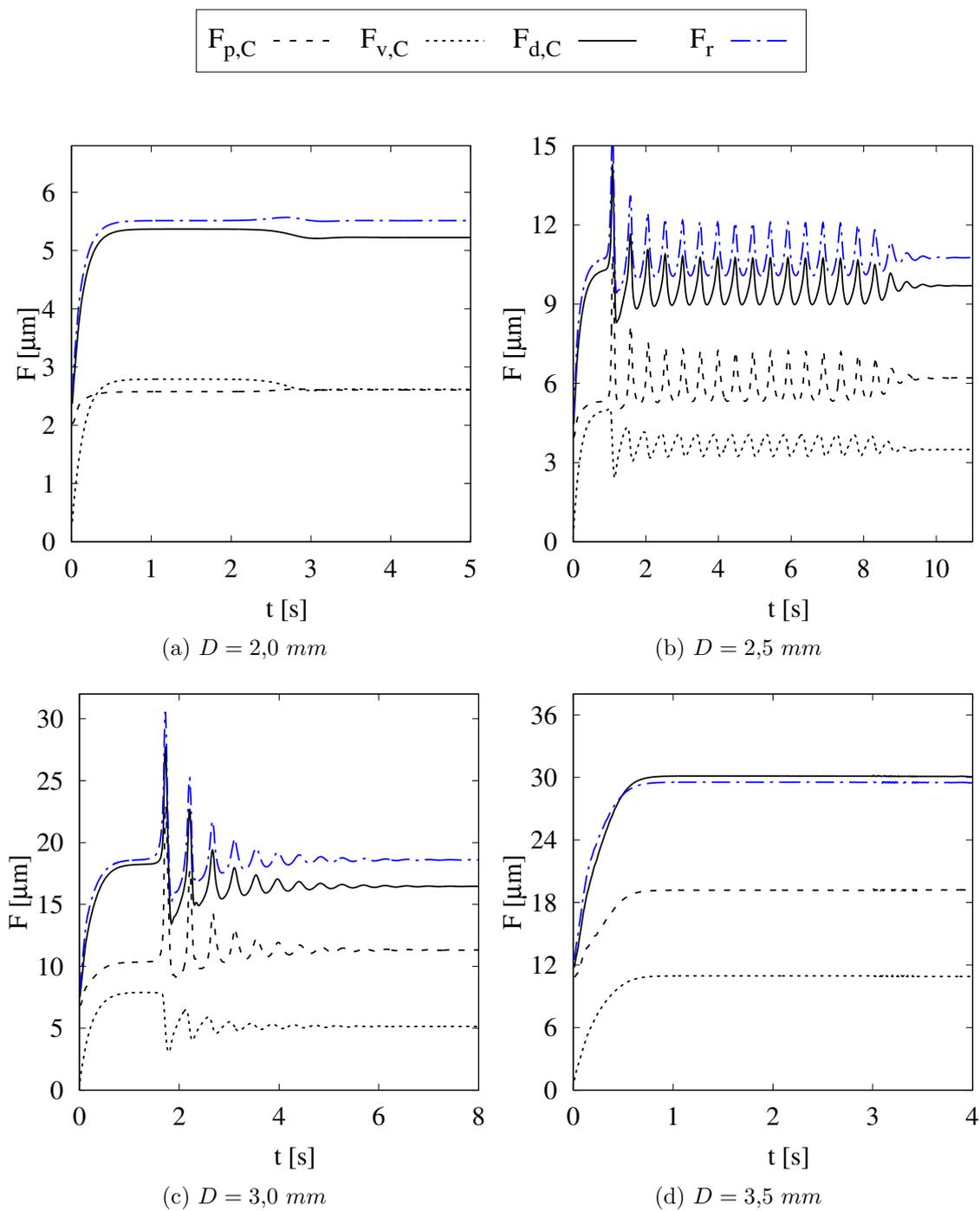


Figura 5.27: Resultados transientes das forças interfaciais, incluindo $F_r = F_b - F_w + ma_{CM}$ e o arrasto do lado contínuo com componentes de forma ($F_{p,C}$) e arrasto viscoso ($F_{v,C}$) para gotas com diâmetro inicial variando entre $D = 2,0 - 3,5 \text{ mm}$.

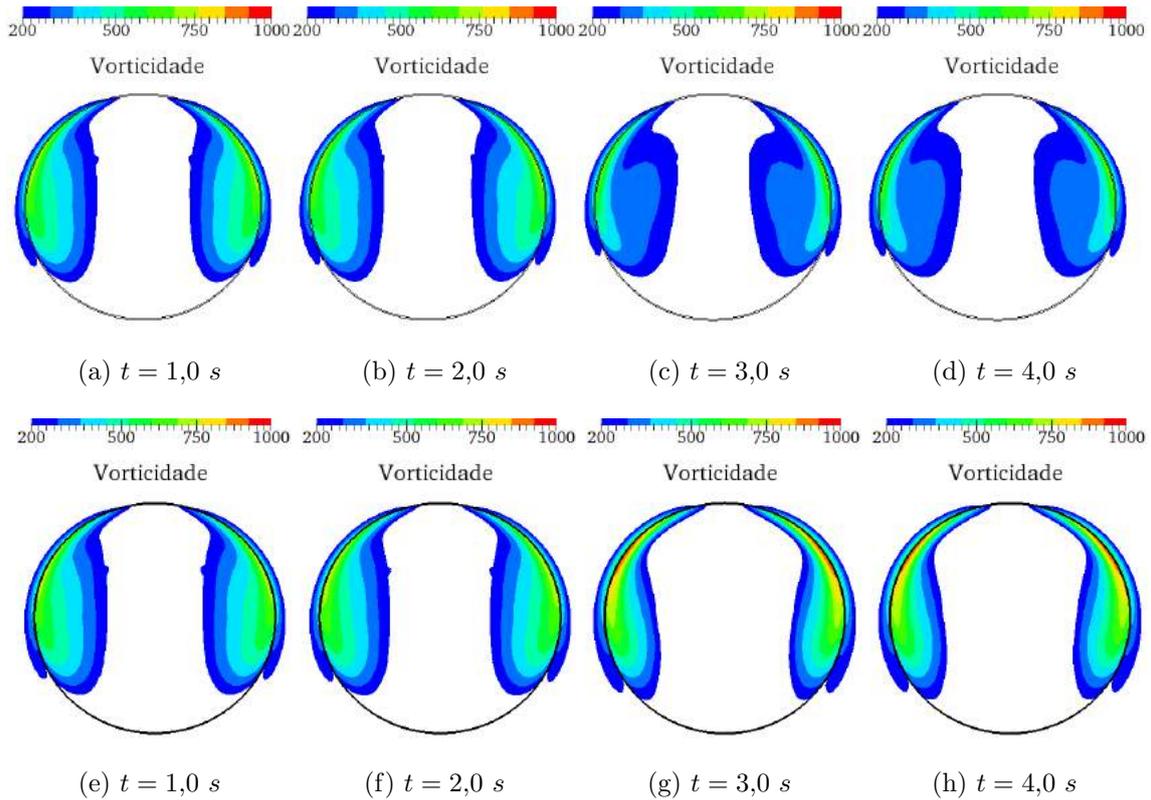


Figura 5.28: Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 2,0 \text{ mm}$ analisados no plano XY ($Z = 0$) de (a) – (d) e no plano YZ ($X = 0$) de (e) – (h).

5.2.3 Comportamento Fluidodinâmico

A seguir investigam-se as características do escoamento que promovem o comportamento observado para o formato, trajetória e forças interfaciais nos diâmetros de avaliação de $D = 2,0 - 3,5 \text{ mm}$. Em termos de números adimensionais (Tabela 5.5), esta faixa de diâmetros implica em: $1,33 \times 10^4 \leq Ar \leq 7,12 \times 10^4$, $0,15 \leq Eo \leq 0,46$, $226 \leq Re \leq 705$ e $0,58 \leq We \leq 3,22$.

Vorticidade

Nas Figuras 5.28 a 5.31 são ilustrados contornos de vorticidade para as gotas de $D = 2,0; 2,5; 3,0$ e $3,5 \text{ mm}$ em diferentes tempos. Analisam-se dois planos paralelos aos eixos x e z que cruzam o centro de massa da gota (Fig. 5.15), isto é, plano XY ($Z = 0$) e plano ZY ($X = 0$), respectivamente. Quando em movimento, o contato entre as fases acarreta em fricção viscosa ao longo de finas camadas dos dois lados da interface por causa da condição de não-deslizamento. O forte gradiente de velocidade na direção normal proporciona a geração de vorticidade, que acaba se concentrando no fluido mais leve [122] particularmente na primeira metade da gota.

Em relação a gota de $D = 2,0 \text{ mm}$, os contornos apresentados na Figura 5.28

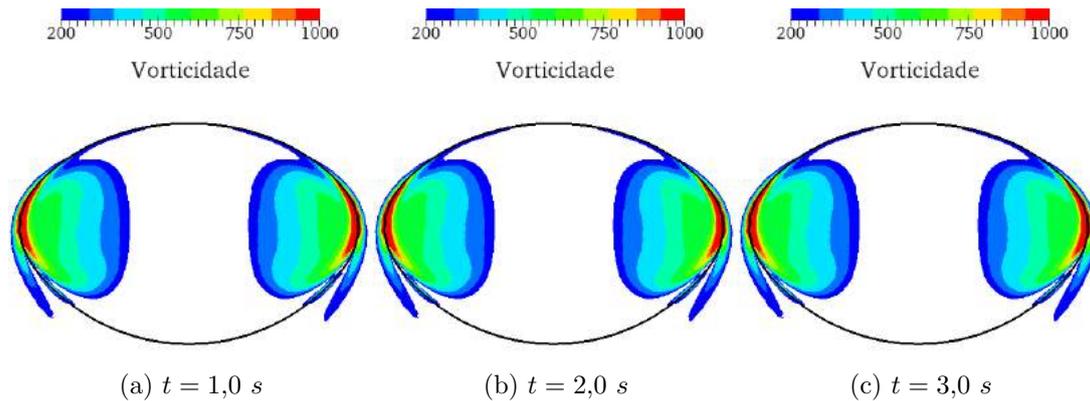


Figura 5.29: Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 3,5 \text{ mm}$.

mostram uma simetria na vorticidade ao longo da gota apenas para os tempos iniciais $t = 1,0$ e $2,0 \text{ s}$. Conforme a simulação evolui, o perfil deixa de ser uniforme nos dois planos analisados e uma distribuição preferencial de vorticidade é observada em determinadas regiões da gota para $t = 3,0$ e $4,0 \text{ s}$.

Ao se aumentar o diâmetro inicial da gota, isto é, para as gotas de $D = 2,5 \text{ mm}$ (Fig. 5.30) e $D = 3,0 \text{ mm}$ (Fig. 5.31), tem-se um acúmulo de vorticidade ainda mais pronunciado no plano ZY ($X = 0$). Este acúmulo é tal que promove o desprendimento de vórtices para o meio contínuo. Para ambos os diâmetros analisados, as gotas passam a intercalar entre períodos de concentração e descarga de vorticidade durante boa parte da simulação.

Enquanto que para a gota com $D = 3,0 \text{ mm}$ o acúmulo de vorticidade na parte superior vai se tornando cada vez menor, a gota de $D = 2,5 \text{ mm}$ concentra quantidade similar de vorticidade entre as descargas, seguindo tendência similar a observada para o decaimento da oscilação nos perfis de velocidade (Figs. 5.19d e 5.19f). Para tempos avançados de simulação, a partícula de $D = 3,0 \text{ mm}$ atinge um perfil assimétrico estacionário de vorticidade que proporciona uma velocidade constante de ascensão. Por outro lado, a gota de $D = 2,5 \text{ mm}$ adquire um novo grau de assimetria a partir de $t = 8 \text{ s}$, promovendo movimento lateral na direção z , em concordância com observações realizadas previamente para trajetória (Fig. 5.25).

Por último, a Figura 5.29 ilustra o comportamento transiente da partícula de diâmetro inicial $D = 3,5 \text{ mm}$. Observa-se um comportamento bem mais simples, onde um perfil completamente simétrico é obtido para vorticidade em tempos iniciais e se mantém praticamente inalterado até o final da simulação. A rápida deformação sofrida pela gota propicia um formato elipsoidal estável que favorece o acúmulo de tensão viscosa nas regiões de maior curvatura, ou seja, nas laterais da partícula.

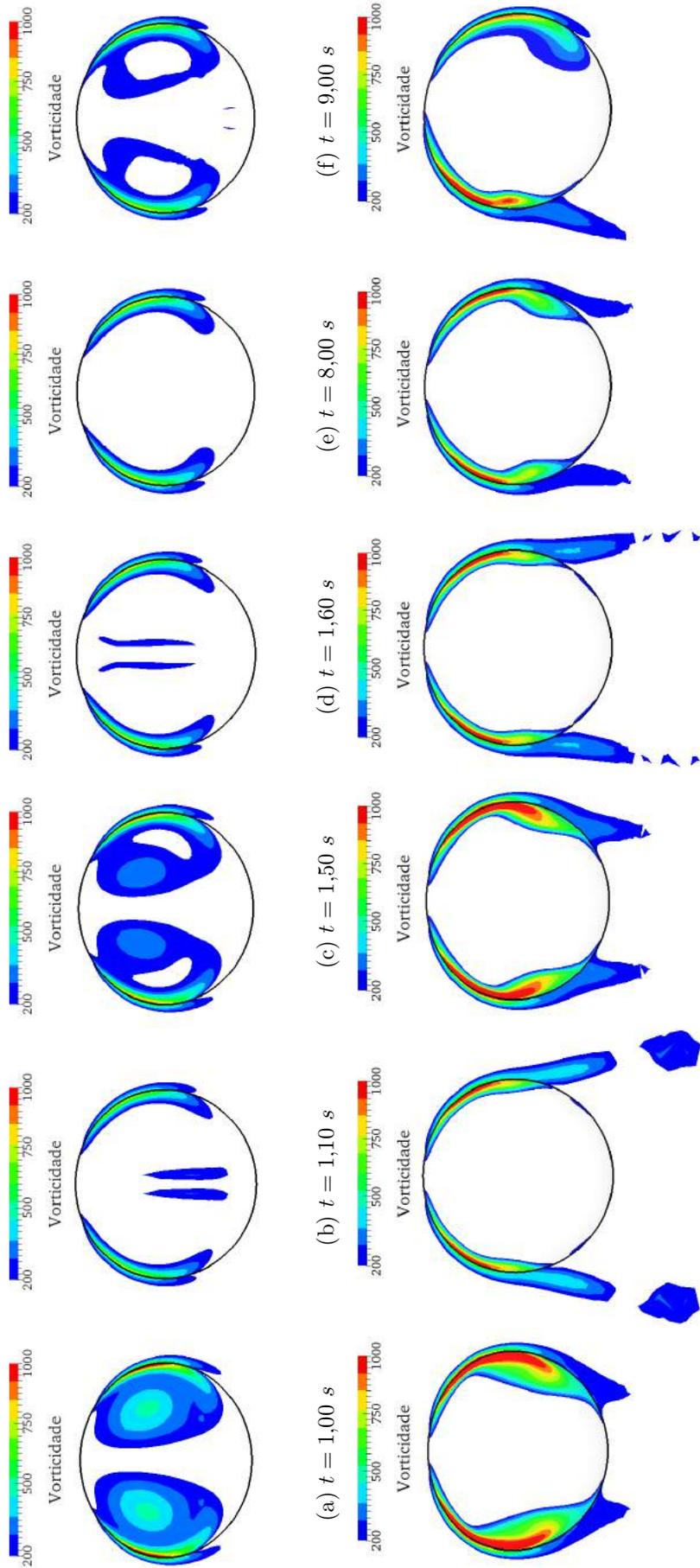


Figura 5.30: Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 2,5 \text{ mm}$ no plano XY de (a) – (f) e no plano ZY de (g) – (l).

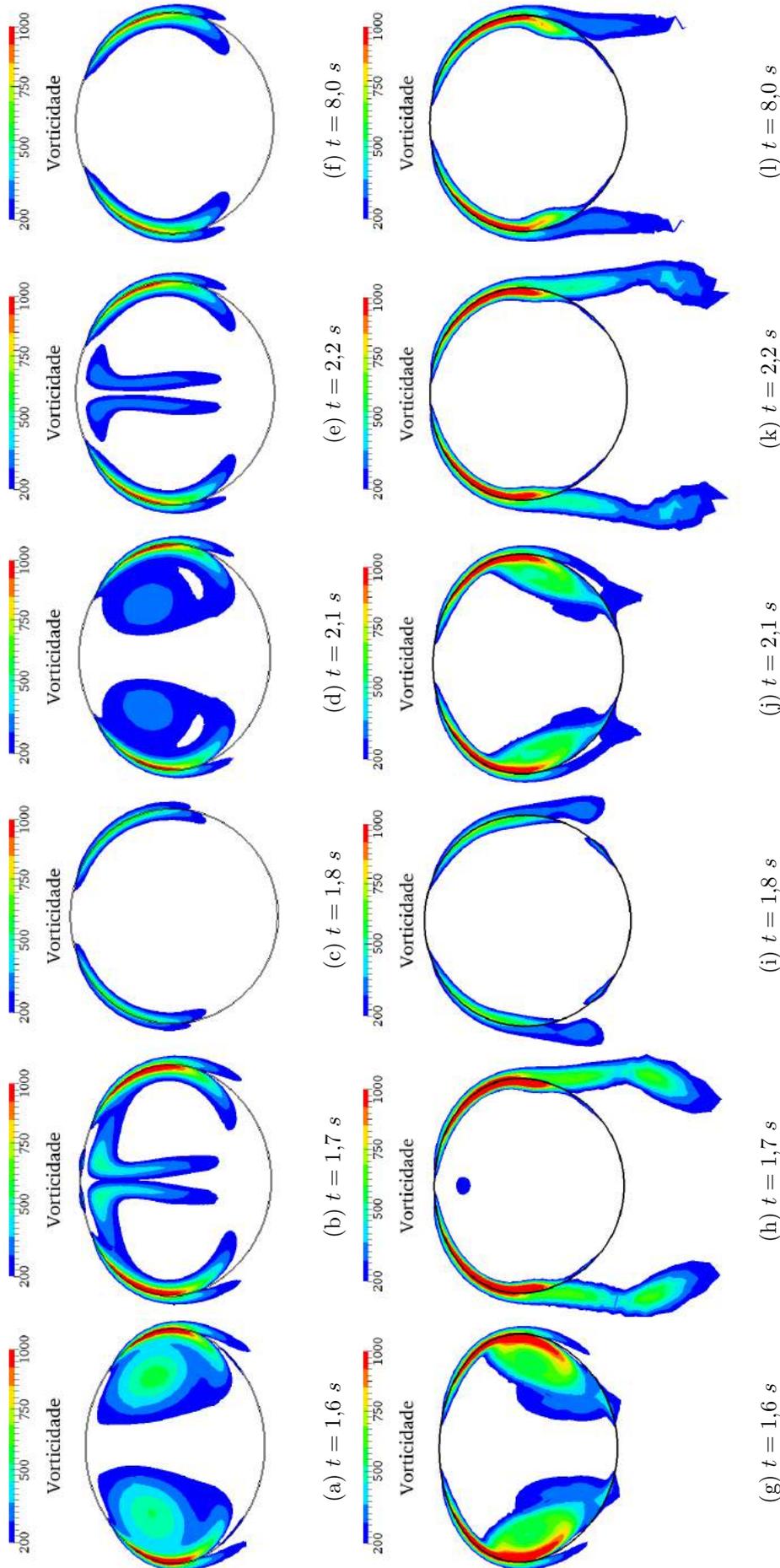


Figura 5.31: Resultados transientes de vorticidade para gota de $D = 3,0 \text{ mm}$ no plano XY de (a) – (f) e no plano ZY de (g) – (l).

Padrão de Circulação Interna

Em seguida, apresentam-se perfis transientes de velocidade e pressão no interior das gotas para tempos característicos demarcados no gráfico de velocidade de ascensão (Figuras 5.32 a 5.38). Por se tratarem de duas fases fluidas, a transferência de quantidade de movimento na interface induz uma circulação toroidal no interior da gota, o qual pode ser verificado pelo movimento circular da velocidade nas figuras.

O arrasto entre as fases durante o movimento de ascensão promove maiores velocidades nas proximidades da interface, principalmente nas regiões de maior curvatura. Conforme a circulação interna se estabelece, um vórtice em anel (*vortex ring*) simétrico é gerado no interior da gota, caracterizando uma região de baixa pressão. Seguindo o vórtice central, o fluido que passa pelo meio da partícula é acelerado, promovendo maiores velocidades também nesta localidade. Nas extremidades superior e inferior, o escoamento é retardado pelo encontro de correntes advindas de diversas direções, resultando em menores velocidades e maiores pressões.

Para tempos iniciais, verifica-se das Figuras 5.32 a 5.38 que todas as gotas seguem exatamente o padrão descrito. Particularmente, acima do intervalo oscilatório (Fig. 5.38), uma vez estabelecido o padrão de circulação interna este se mantém até o fim da simulação. Por outro lado, para o diâmetro próximo ao limite inferior do intervalo oscilatório (Figs. 5.32 e 5.33), o vórtice central sofre uma suave modificação em torno de $t \approx 2,5$ s. Com isso, surge uma assimetria no escoamento interno que pode ser visualizada na comparação entre perfis nos planos $Z = 0$ e $X = 0$.

Esta mudança no padrão de circulação interna é mais evidente para as gotas de $D = 2,5$ mm (Figs. 5.34 e 5.35) e $D = 3,0$ mm (Figs. 5.36 e 5.37), as quais apresentam oscilações. No plano XY ($Z = 0$), a zona de baixa pressão representando o anel de vórtice permanece quase centralizada na gota e se observam ligeiros aumentos nos valores de pressão. Por outro lado, no plano ZY ($X = 0$), o fluido é significativamente acelerado na região central e empurra o anel de vórtice para as laterais da gota, o que acarreta na descarga de vorticidade detectada anteriormente nas Figs. 5.30 e 5.31.

Após esta liberação de vorticidade para a fase contínua, há uma drástica redução na velocidade do fluido e a circulação no interior da gota praticamente cessa. Este comportamento é evidenciado pelos perfis de velocidade e pressão em tempos referentes aos picos mínimos de velocidade de ascensão. Em consequência desta transformação momentânea da circulação interna, tem-se uma brusca mudança na força viscosa, como observado nas Figs. 5.27b e 5.27c.

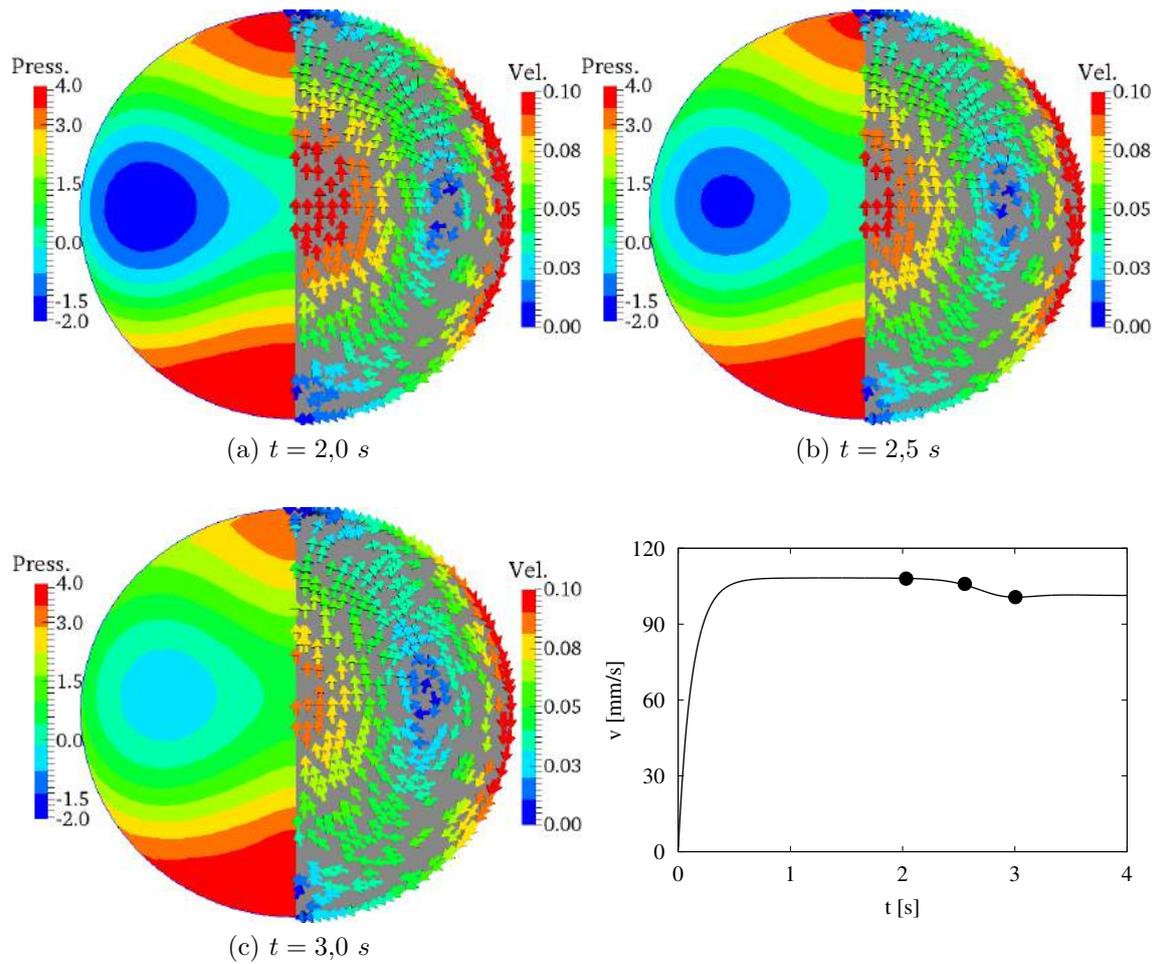


Figura 5.32: Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,0 \text{ mm}$ avaliados no plano XY ($Z = 0$).

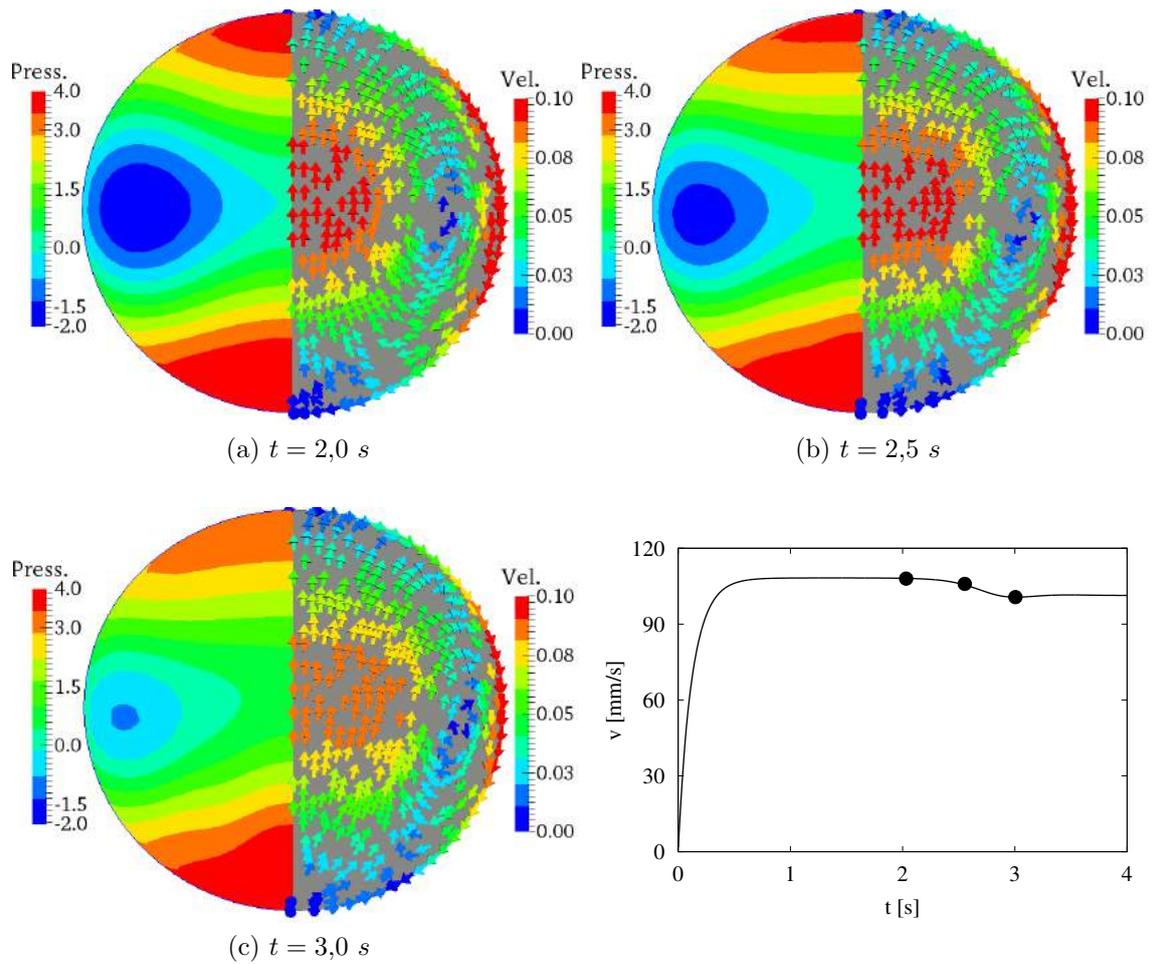


Figura 5.33: Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,0 \text{ mm}$ avaliados no plano ZY ($X = 0$).

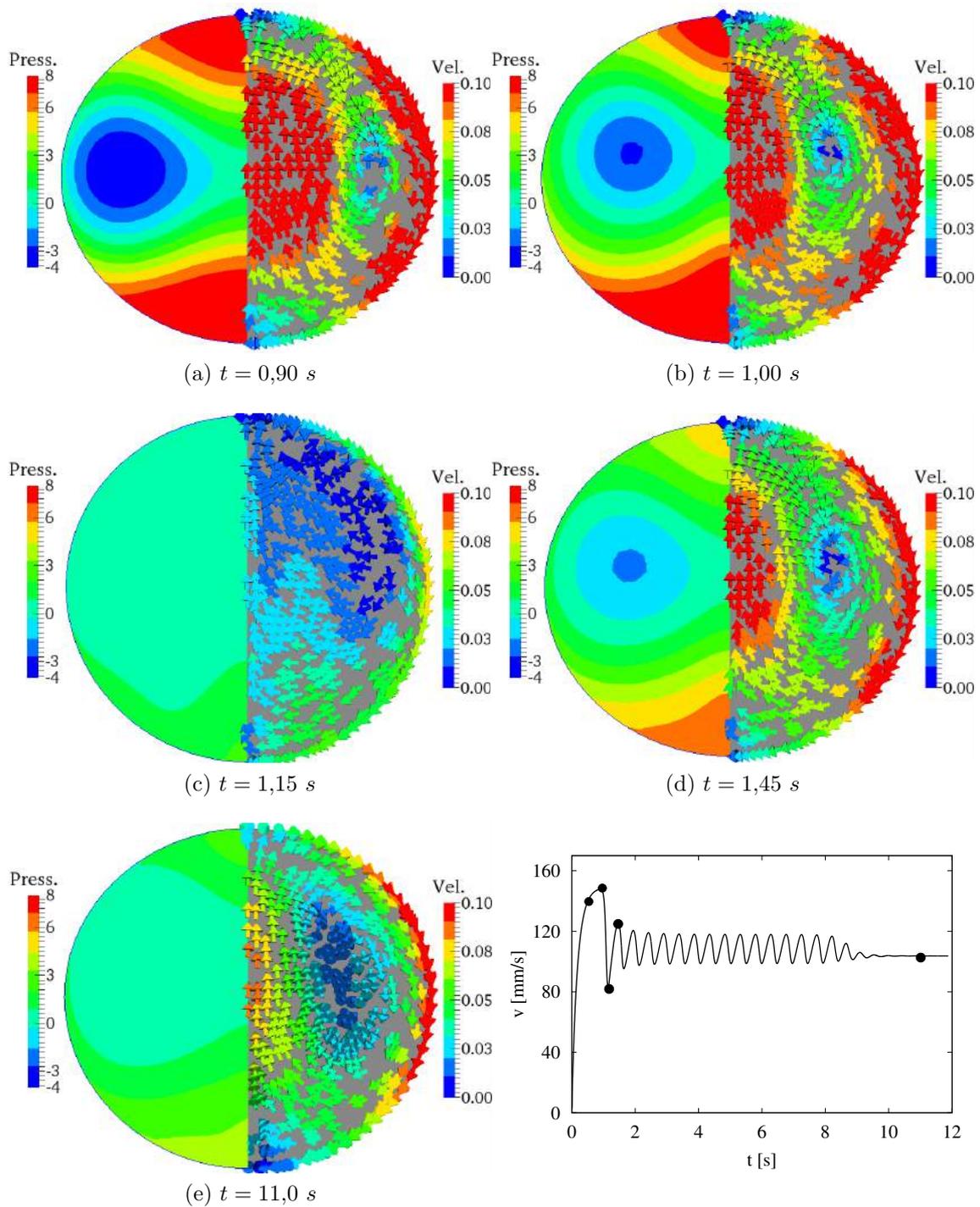


Figura 5.34: Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,5 \text{ mm}$ avaliados no plano XY ($Z = 0$).

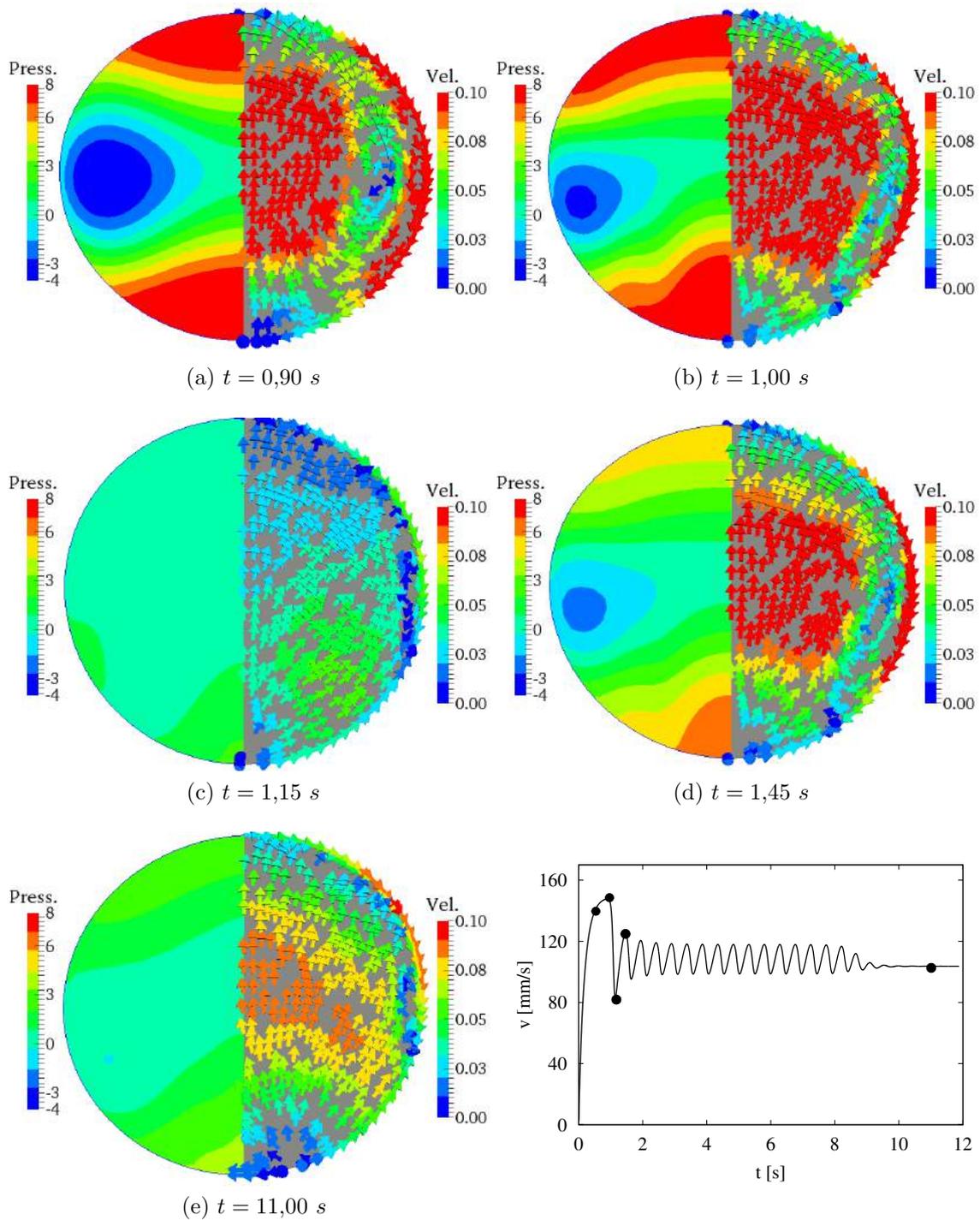


Figura 5.35: Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 2,5$ mm avaliados no plano ZY ($X = 0$).

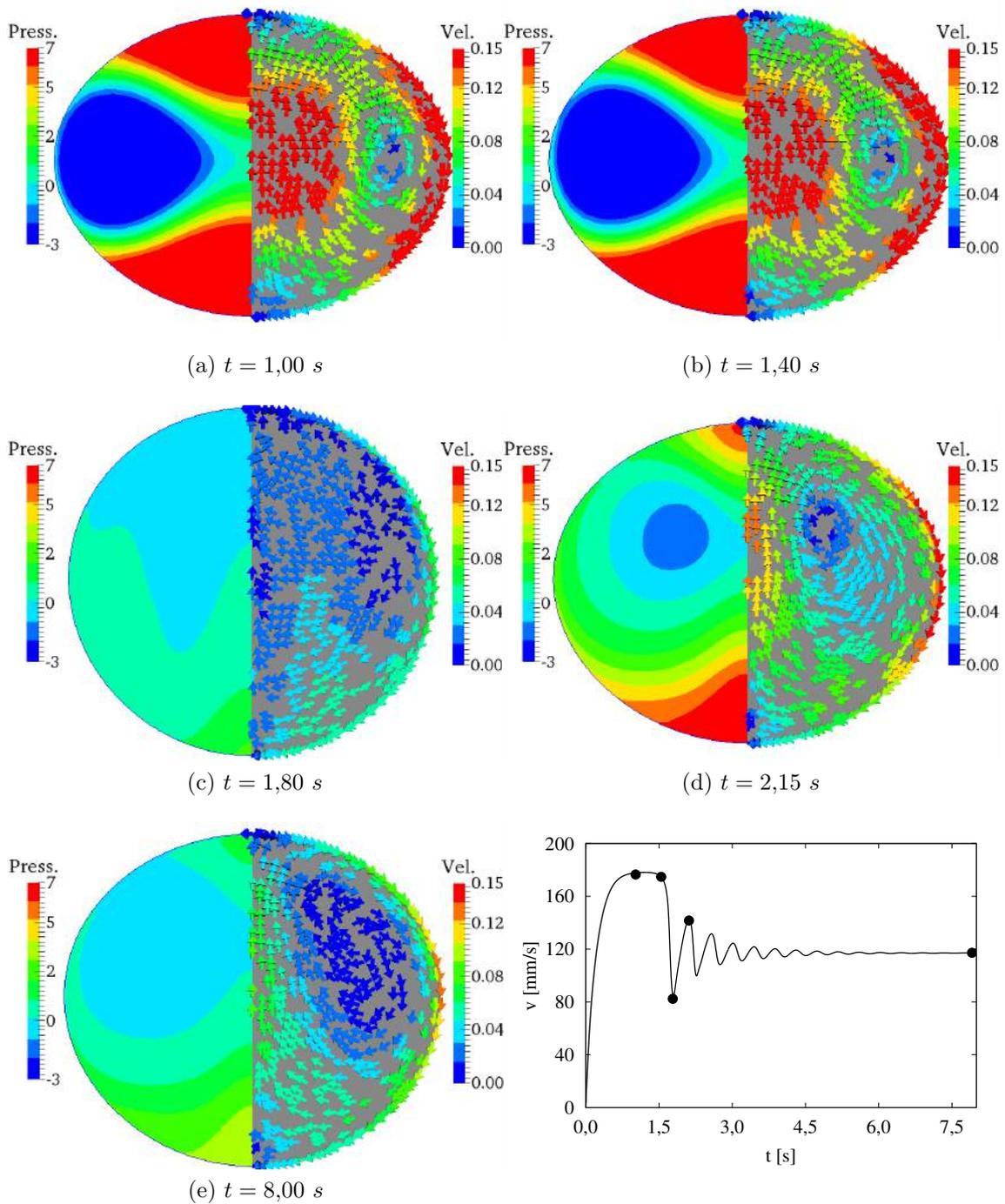


Figura 5.36: Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 3,0 \text{ mm}$ avaliados no plano XY ($Z = 0$).

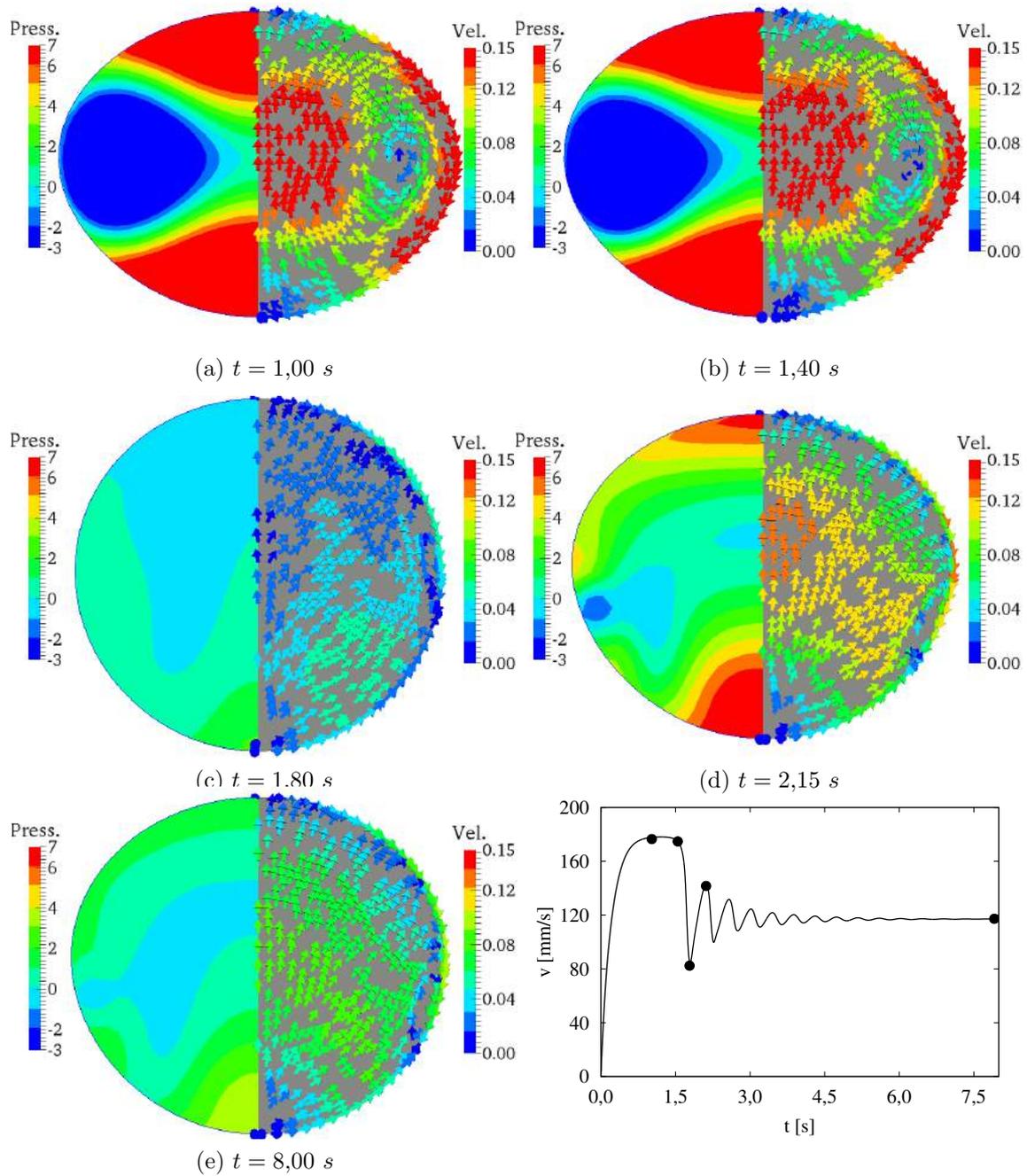
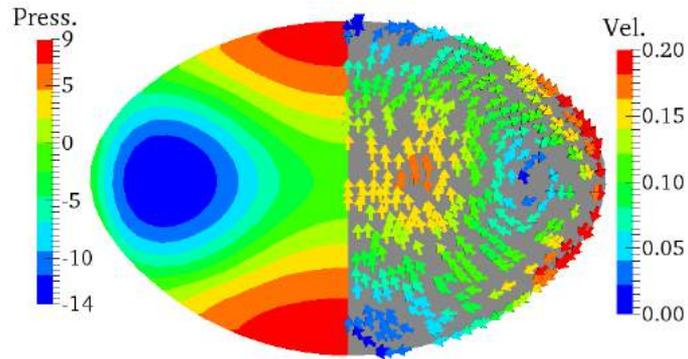
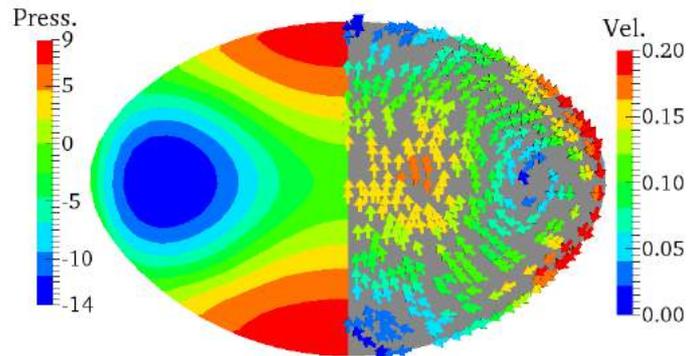


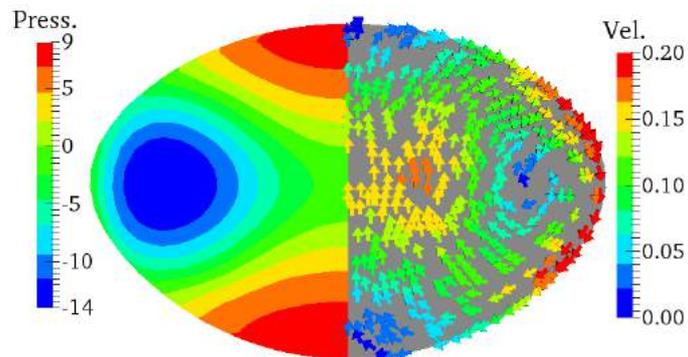
Figura 5.37: Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 3,0 \text{ mm}$ avaliados no plano ZY ($X = 0$).



(a) $t = 1,00 \text{ s}$



(b) $t = 2,00 \text{ s}$



(c) $t = 3,00 \text{ s}$

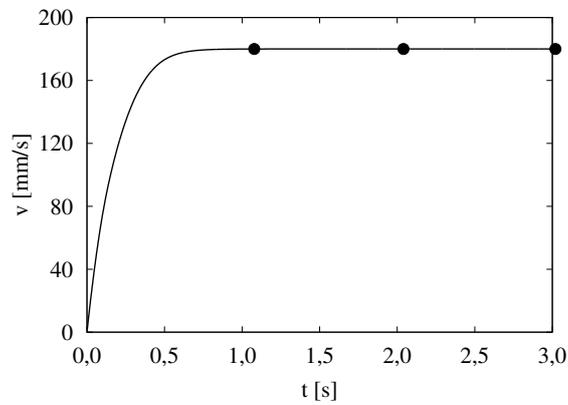


Figura 5.38: Resultados transientes de velocidade e pressão para gota com diâmetro $D = 3,5 \text{ mm}$ no plano XY ($Z = 0$).

Separação do Escoamento

Completando as análises sobre o comportamento fluidodinâmico, são avaliadas as características de separação do escoamento na traseira das gotas. Em acordo com o que já foi evidenciado, devido à completa mobilidade da interface, a circulação interna tende a retardar o desprendimento da camada limite. Tal separação do escoamento modifica a distribuição de pressão na interface, agindo no sentido de aumentar o arrasto e modificando o formato das gotas.

A Figura 5.39 exibe o campo vetorial de velocidade na vista tridimensional por cima e por debaixo da gota, isto é, nas partes frontal e traseira da partícula de $D = 2,0 \text{ mm}$. Em $t = 1,0 \text{ s}$, o escoamento está completamente aderido a interface, seguindo linhas de corrente com simetria axial. Com a evolução dos campos, verifica-se a separação na traseira da gota e o escoamento é revertido em uma pequena região central alinhada ao plano ZY ($X = 0$). Neste caso, a separação parece não ser suficiente para atingir a região onde há concentração significativa de vorticidade, que está localizada essencialmente na parte superior do corpo (Fig. 5.28).

Para as gotas ligeiramente maiores, isto é, com diâmetros $D = 2,5 \text{ mm}$ (Figura 5.40) e $D = 3,0 \text{ mm}$ (Figura 5.41), a separação do escoamento alcança regiões mais abrangentes e acarreta no desprendimento da camada limite, com conseqüente liberação de vórtices. Diante deste cenário, gera-se um forte diferencial de pressão que age no sentido contrário ao escoamento original e está associado aos picos observados para força de arrasto por pressão (Fig. 5.27).

Por último, o campo vetorial na traseira da gota de $D = 3,5 \text{ mm}$ (Fig. 5.42) corrobora com as observações apontadas anteriormente. Isto é, gotas com diâmetro superior a faixa oscilatória deformam rapidamente adquirindo um formato elipsoidal simétrico que em última instância desfavorece as instabilidades.

Enfim, as Figuras 5.43 e 5.44 ilustram as linhas de corrente referentes ao escoamento transiente na fase contínua, demonstrando o comportamento da esteira. Enquanto que as linhas de corrente contornam completamente a gota de maior diâmetro, é possível observar a separação do escoamento para gota de menor tamanho. Na faixa transicional de diâmetros, a reversão local do escoamento na traseira das gotas é mais abrangente e acarreta no desprendimento periódico de vórtices a partir da fase dispersa para fase contínua. Ao cessarem as oscilações, a gota de $D = 2,5 \text{ mm}$ adquire movimento lateral enquanto que a gota de $D = 3,0 \text{ mm}$ atinge um estado estacionário com configuração de esteira se assemelhando a tempos anteriores.

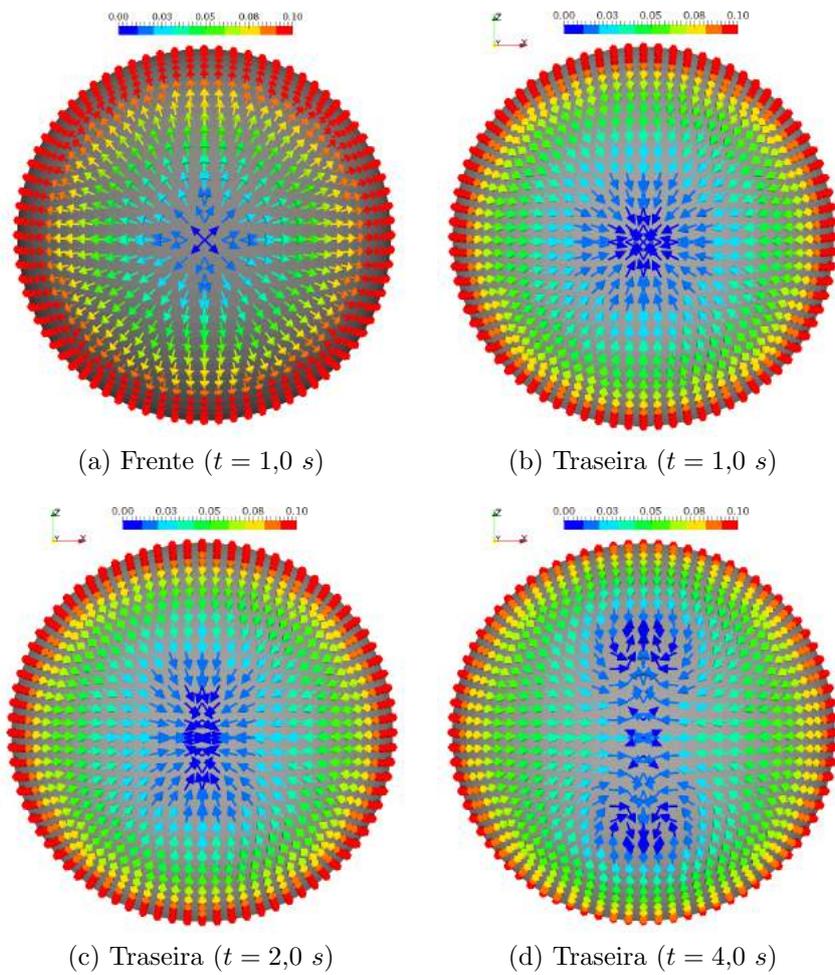


Figura 5.39: Campo de velocidade na frente ou traseira da gota com $D = 2,0 \text{ mm}$ para: (a),(b) $t = 1,0 \text{ s}$; (c) $t = 2,0 \text{ s}$ e (d) $t = 4,0 \text{ s}$.

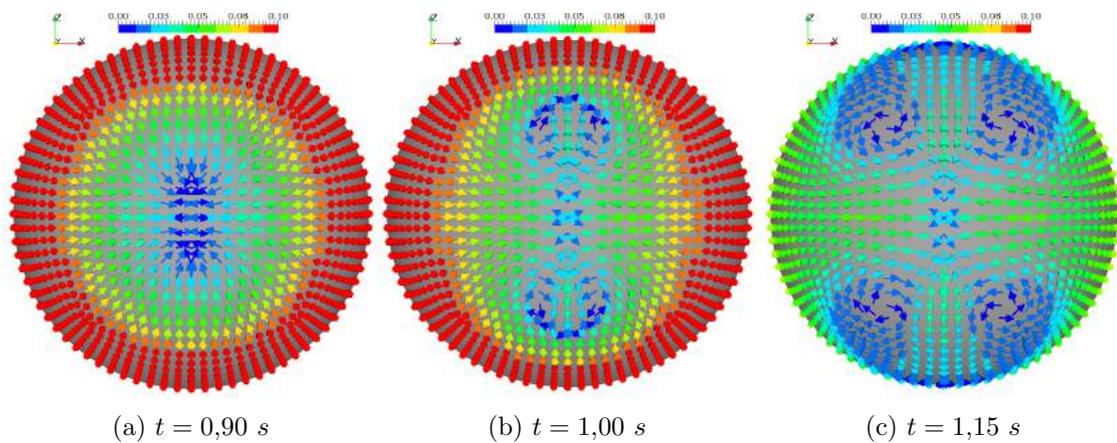


Figura 5.40: Campo de velocidade avaliado na traseira da gota com diâmetro $D = 2,5 \text{ mm}$ para diferentes tempos.

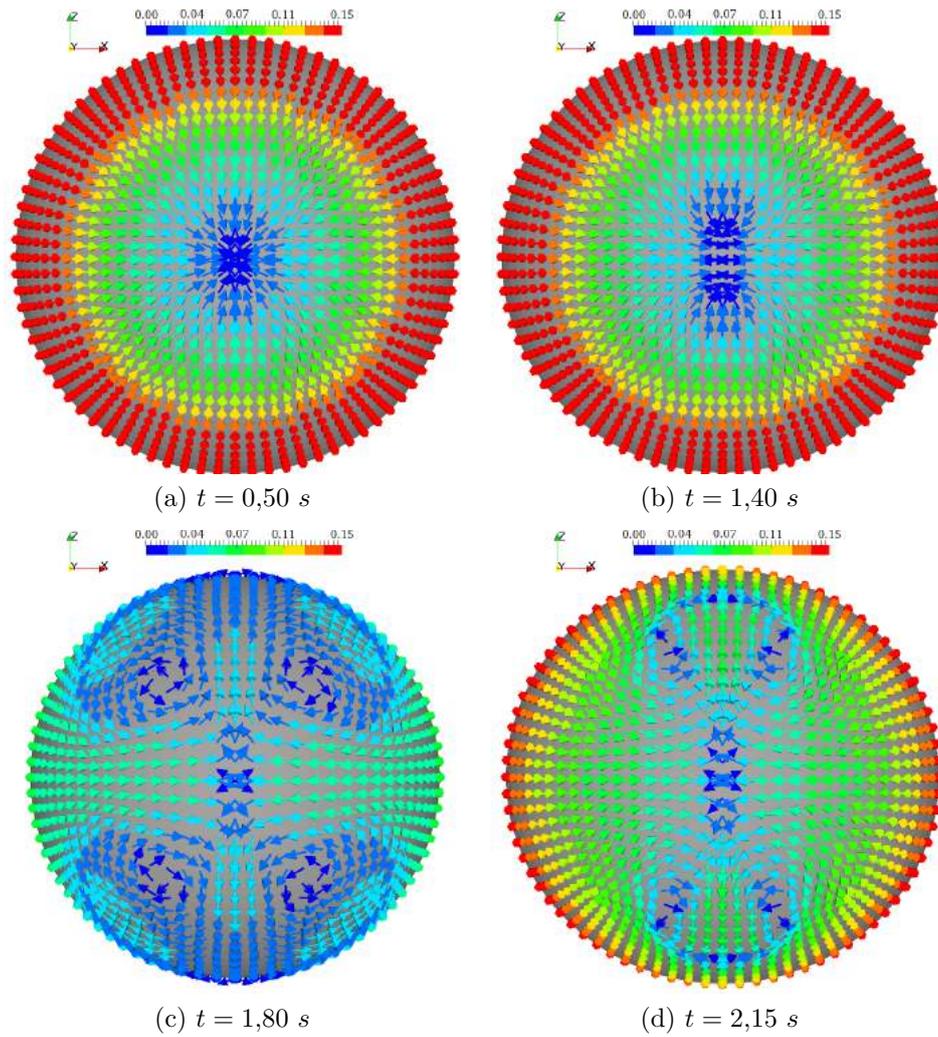


Figura 5.41: Campo de velocidade avaliado na traseira da gota com diâmetro $D = 3,0 \text{ mm}$ para diferentes tempos.

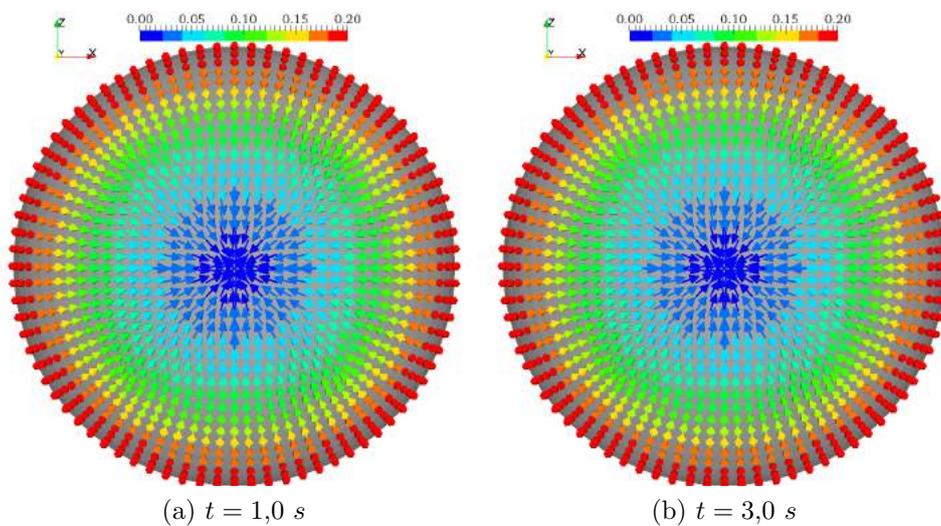


Figura 5.42: Campo de velocidade na traseira da gota com diâmetro $D = 3,5 \text{ mm}$ para diferentes tempos.

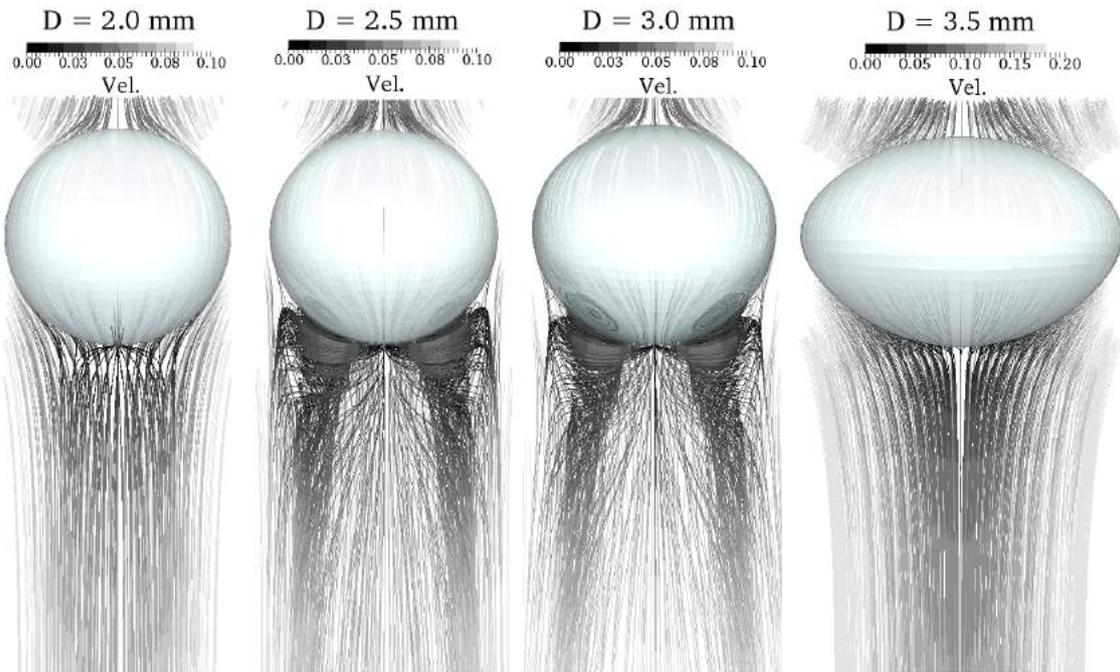


Figura 5.43: Linhas de corrente referentes ao escoamento na fase contínua para tempo intermediário ($t = 4,0$ s), momento em que oscilações ocorrem.

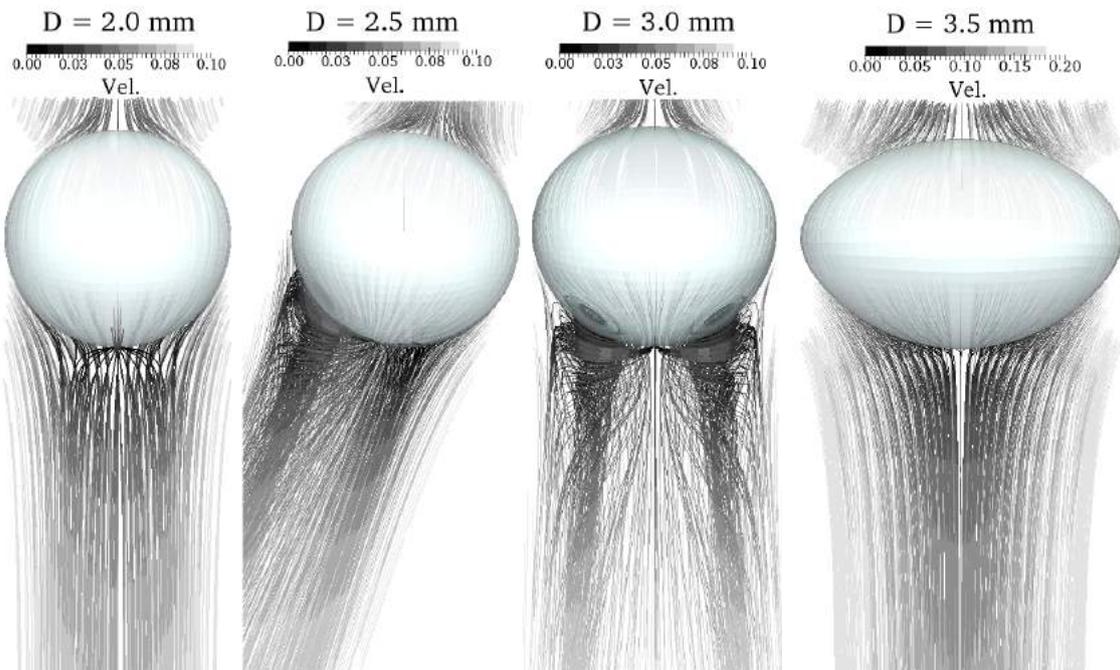


Figura 5.44: Linhas de corrente referentes ao escoamento na fase contínua ao fim das simulações, momento em que oscilações cessaram.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

O presente trabalho desenvolveu uma abordagem numérica capaz de rastrear interfaces em sistemas bifásicos com fluidos de propriedades similares. Nesta tese, um novo tratamento para o acoplamento entre as fases é contemplado com a implementação de um código numérico no *software* livre OpenFOAM. Tal desenvolvimento permite uma resolução adequada de efeitos dinâmicos em interfaces líquido-líquido.

Problemas com soluções conhecidas foram selecionados para validar a metodologia proposta. Os resultados gerados mostram boa concordância com resoluções analíticas para o movimento interfacial sob diferentes forças motrizes e o esquema numérico representa com sucesso sistemas líquido-líquido com propriedades reais, compreendendo casos limitantes de tensões interfaciais baixas, médias e altas.

Além disso, a comparação entre simulações e experimentos provou a eficácia da abordagem em desvendar comportamentos complexos, os quais são inacessíveis por meios experimentais. Particularmente a este respeito, averiguou-se a inter-relação entre diversos fenômenos sobre a determinação do comportamento oscilatório observado para gotas de tolueno entre diâmetros de $D = 2,2$ a $3,0$ mm. A interação entre fenômenos como separação do escoamento, desprendimento de vórtices e deformações no formato foi reconhecida e discutida, esclarecendo os mecanismos por trás do padrão de aceleração e desaceleração na ascensão das gotas.

Várias possibilidades, tanto de uso quanto de aprimoramento, estão abertas para o código desenvolvido neste trabalho. Uma extensão natural seria a simulação da ascensão de gotas para outras combinações de sistemas bifásicos, que incluam diferentes tensões interfaciais. Assim, generalizações com números adimensionais poderiam gerar importantes frutos.

Como desenvolvimentos futuros, será importante um aprofundamento na questão da metodologia de referencial não-inercial, visando elucidar suas imputações sobre a aceleração resultante e o balanço de forças globais. Ainda, para tornar possível

a representação de situações com deformações mais acentuadas, a metodologia de tratamento de malha deverá ser revista.

Progressos mais desafiadores incluem estudos envolvendo fluidos não-Newtonianos e a consideração de interfaces líquido-líquido sob efeito de surfactantes, cujo impacto na dinâmica de gotas não é completamente compreendido até hoje. Nesta linha promissora, conceitos de adsorção e dessorção e reologia interfacial podem ser integrados a uma estrutura numérica que possibilitaria explorar importantes fenômenos interfaciais, como o efeito de Gibbs-Marangoni. Ainda muitos desafios devem ser superados, mas a representação da interação entre duas gotas pode se tornar uma realidade.

Apêndice A

Balanço de Forças Interfacial

Para fluidos Newtonianos incompressíveis, as definições de tensor tensão \mathbf{T} e tensor taxa de deformação \mathbf{D} seguem o seguinte equacionamento:

$$\mathbf{T} = -\mathcal{P}\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}, \quad \mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T]. \quad (\text{A.1})$$

A decomposição de ambos os tensores em termos de componentes tangencial e normal pode ser realizada conforme indicado pelas Equações A.2–A.7.

$$\underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{D}}_{\text{Total}} = \frac{1}{2} [\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}]; \quad (\text{A.2})$$

$$\underbrace{\mathbf{nn} : \mathbf{D}}_{\text{Normal}} = \frac{1}{2} [\mathbf{n} \cdot (\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{v}) + \mathbf{n} \cdot (\nabla\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})] = \mathbf{nn} : \nabla\mathbf{v}; \quad (\text{A.3})$$

$$\underbrace{\mathbf{n} \cdot \mathbf{D} - \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \mathbf{D})}_{\text{Tangencial}} = \frac{1}{2} [\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}] - \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla\mathbf{v}). \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = -\mathcal{P}\mathbf{n} + 2\mu \mathbf{n} \cdot \mathbf{D} = -\mathcal{P}\mathbf{n} + \mu (\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}); \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{nn} : \mathbf{T} = -\mathcal{P} + 2\mu \mathbf{nn} : \mathbf{D} = -\mathcal{P} + 2\mu \mathbf{nn} : \nabla\mathbf{v}; \quad (\text{A.6})$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} - \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \mathbf{T}) = \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{v} + \nabla\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - 2\mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla\mathbf{v})]. \quad (\text{A.7})$$

Para as próximas etapas da dedução é interessante definir o gradiente e divergente do vetor velocidade em termos do operador superficial correspondente, como exibido nas Eqs. A.8 e A.9, onde também se considera o campo solenoidal, i.e. $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$. Adicionalmente, os resultados da aplicação do produto interno do vetor normal com o gradiente de velocidade e seu transposto são apresentados nas Eqs. A.10 e A.11.

$$\nabla\mathbf{v} = \nabla_S\mathbf{v} + \mathbf{nn} \cdot \nabla\mathbf{v}. \quad (\text{A.8})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla_S \cdot \mathbf{v} + \mathbf{nn} : \nabla\mathbf{v} \implies \mathbf{nn} : \nabla\mathbf{v} = -\nabla_S \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{A.9})$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \nabla (v_t \mathbf{t} + v_n \mathbf{n}) = \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_t + \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v}) . \quad (\text{A.10})$$

$$\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v}) . \quad (\text{A.11})$$

Substituindo as definições apresentadas acima, é possível reescrever o tensor tensão assim como suas componentes normal e tangencial de acordo com as Equações A.12–A.16. Nota-se que as Eqs. A.13–A.15 representam formas equivalentes da componente tangencial, que podem ser utilizadas indiferentemente no código implementado de acordo com a conveniência para o cálculo em questão.

$$\mathbf{nn} : \mathbf{T} = -\mathcal{P} + 2\mu \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v} = -\mathcal{P} - 2\mu \nabla_S \cdot \mathbf{v} . \quad (\text{A.12})$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} - \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \mathbf{T}) = \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - 2\mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v})] \quad (\text{A.13})$$

$$= \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v}) - 2\mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v})] \quad (\text{A.14})$$

$$= \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n}(\nabla_S \cdot \mathbf{v})] \quad (\text{A.14})$$

$$= \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_t + \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v}) + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n}(\mathbf{nn} : \nabla \mathbf{v})] \quad (\text{A.15})$$

$$= \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_t + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}] \quad (\text{A.15})$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{T} = -\mathcal{P}\mathbf{n} + \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n}(\nabla_S \cdot \mathbf{v})] \quad (\text{A.16})$$

Em seguida, resgata-se o balanço de forças interfacial e a definição da força de tensão interfacial (Eqs. 3.13 e 3.14), de forma que a condição dinâmica aplicada em uma área de controle arbitrária pode ser representada pela Equação A.17. Então, a forma do tensor tensão previamente deduzida na Eq. A.16 é aplicada para ambos os lados da interface, como demonstrado abaixo.

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{T}_A - \mathbf{T}_B) = \sigma \kappa \mathbf{n} + \nabla_S \sigma . \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} & \{-\mathcal{P}\mathbf{n} + \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n}(\nabla_S \cdot \mathbf{v})]\}_A \\ & - \{-\mathcal{P}\mathbf{n} + \mu [\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n}(\nabla_S \cdot \mathbf{v})]\}_B = \sigma \kappa \mathbf{n} + \nabla_S \sigma . \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

$$\begin{aligned} & -\mathcal{P}_A \mathbf{n} + \mathcal{P}_B \mathbf{n} + \mu_A (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_A) - \mu_B (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_B) \\ & = (\mu_B - \mu_A) [\nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n}(\nabla_S \cdot \mathbf{v})] + \sigma \kappa \mathbf{n} + \nabla_S \sigma . \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Enfim, substituindo a definição de pressão modificada (Eq. 3.7) e separando em componentes normal e tangencial, obtém-se as expressões para o balanço interfacial:

$$p_B - p_A = \sigma \kappa - 2(\mu_B - \mu_A)(\nabla_S \cdot \mathbf{v}) - (\rho_B - \rho_A)\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} , \quad (\text{A.20})$$

$$\mu_A (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_A) - \mu_B (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v}_B) = \nabla_S \sigma + (\mu_B - \mu_A) [\nabla_S \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n}(\nabla_S \cdot \mathbf{v})] . \quad (\text{A.21})$$

Apêndice B

Condição de Salto para Velocidade

A formulação interfacial empregada no termo difusivo é baseada em uma propriedade difusiva efetiva, que permite a inclusão das condições de salto de forma similar em ambos os lados da interface. Simultaneamente, são consideradas contribuições implícitas a partir dos valores nodais das duas fases.

Para o termo difusivo de velocidade, utiliza-se a componente tangencial do balanço de forças interfacial (Eq. 3.16) como condição de salto. Uma versão equivalente desta restrição interfacial é dada pela Eq. B.1, onde Δ_v representa o salto definido pela Eq. 4.40. Além disso τ_A e τ_B se referem ao produto da viscosidade pela componente normal do gradiente de velocidade nos lados A e B , sendo discretizados conforme a Equação B.2.

$$\mu_A(\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v})_{Af} - \mu_B(\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v})_{Bf} = \Delta_v \implies \tau_A - \tau_B = \Delta_v. \quad (\text{B.1})$$

$$\tau_A = \mu_A \left(\frac{\mathbf{v}_{Af} - \mathbf{v}_{AP}}{|\mathbf{d}_{Af}|} \right), \quad \tau_B = \mu_B \left(\frac{\mathbf{v}_{BP} - \mathbf{v}_{Bf}}{|\mathbf{d}_{Bf}|} \right). \quad (\text{B.2})$$

Essas equações podem ser reescritas na forma da Eq. B.3, que assegura a continuidade na velocidade interfacial, i.e. $\mathbf{v}_{Af} = \mathbf{v}_{Bf}$. Em seguida, ambos os lados da B.3 são divididos pela distância total entre os centroides das células, dando origem a Eq. B.4. As variáveis ω_{Af} e ω_{Bf} representam as distâncias relativas, que foram definidas anteriormente na Eq. 4.37.

$$\underbrace{\mathbf{v}_{Af} - \mathbf{v}_{Bf}}_{=0} + \mathbf{v}_{BP} - \mathbf{v}_{AP} = \frac{\tau_B |\mathbf{d}_{Bf}|}{\mu_B} + \frac{\tau_A |\mathbf{d}_{Af}|}{\mu_A}. \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{\mathbf{v}_{BP} - \mathbf{v}_{AP}}{|\mathbf{d}_{AB}|} = \underbrace{\frac{|\mathbf{d}_{Bf}|}{|\mathbf{d}_{AB}|}}_{\omega_{Af}} \frac{\tau_B}{\mu_B} + \underbrace{\frac{|\mathbf{d}_{Af}|}{|\mathbf{d}_{AB}|}}_{\omega_{Bf}} \frac{\tau_A}{\mu_A}. \quad (\text{B.4})$$

A relação descrita na Eq. B.1 é substituída na Eq. B.4 com intuito de formular

novas expressões para τ_A and τ_B que incorporem o salto interfacial Δ_v assim como contribuições implícitas de ambas as fases. Essas expressões novas são descritas pelas Eqs. B.5 e B.6, as quais contemplam valores dos vizinhos fictícios, previamente definidos por $\mathbf{v}_{AN} = \mathbf{v}_{BP}$ e $\mathbf{v}_{BN} = \mathbf{v}_{AP}$, e a resultante μ_{eff} como parâmetro de difusividade efetiva.

$$\tau_A = \mu_{eff} \left(\frac{\mathbf{v}_{AN} - \mathbf{v}_{AP}}{|\mathbf{d}_{AB}|} + \Delta_v \frac{\omega_{Af}}{\mu_B} \right), \quad (\text{B.5})$$

$$\tau_B = \mu_{eff} \left(\frac{\mathbf{v}_{BP} - \mathbf{v}_{BN}}{|\mathbf{d}_{AB}|} - \Delta_v \frac{\omega_{Bf}}{\mu_A} \right), \quad (\text{B.6})$$

sendo

$$\mu_{eff} = \frac{1}{\frac{\omega_{Af}}{\mu_B} + \frac{\omega_{Bf}}{\mu_A}}. \quad (\text{B.7})$$

Apêndice C

Condição de Salto para Pressão

A formulação para o termo difusivo de pressão é realizada de forma similar a descrita para velocidade. Uma vez que não há restrição física que relacione diretamente o gradiente de pressão em ambos os lados da interface, derivamos uma aproximação para o fluxo normal de pressão a partir da condição cinemática (Eq. 3.11).

O princípio da continuidade para a velocidade normal é descrito na Eq. C.1. As velocidades \mathbf{v}_{Af} e \mathbf{v}_{Bf} são substituídas pela Eq. 4.16 que expressa a velocidade na face em termos do sistema linear discretizado, resultando na Eq. C.2.

$$\mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{Af} = \mathbf{n}_f \cdot \mathbf{v}_{Bf} , \quad (\text{C.1})$$

$$\mathbf{n}_f \cdot \left[\left(\frac{\mathbf{H}}{a_P} \right) - \left(\frac{1}{a_P} \right) \nabla p \right]_{Af} = \mathbf{n}_f \cdot \left[\left(\frac{\mathbf{H}}{a_P} \right) - \left(\frac{1}{a_P} \right) \nabla p \right]_{Bf} . \quad (\text{C.2})$$

Partindo da Eq. C.2, busca-se uma formulação que represente o termo difusivo interfacial através de um coeficiente difusivo efetivo, de forma que se propicia a dedução de expressões com contribuições implícitas de ambas as fases. Similarmente a derivação da condição de velocidade, as variáveis Υ_A e Υ_B são introduzidas para representar o produto entre o coeficiente difusivo, i.e. $(1/a_P)_f$, e a componente normal do gradiente de pressão, como segue:

$$\Upsilon_A - \Upsilon_B = \Delta_{p_2} = \mathbf{n}_f \cdot \left(\frac{\mathbf{H}}{a_P} \right)_{Af} - \mathbf{n}_f \cdot \left(\frac{\mathbf{H}}{a_P} \right)_{Bf} , \quad (\text{C.3})$$

$$\Upsilon_A = \left(\frac{1}{a_P} \right)_{Af} \frac{p_{Af} - p_{AP}}{|\mathbf{d}_{Af}|} , \quad \Upsilon_B = \left(\frac{1}{a_P} \right)_{Bf} \frac{p_{Bf} - p_{BP}}{|\mathbf{d}_{Bf}|} . \quad (\text{C.4})$$

A Equação C.3 define Δ_{p_2} como o salto interfacial relacionado ao termo difusivo de pressão. Na Eq. C.4, a componente normal do gradiente de pressão nos lados A e B é aproximada pela diferença entre valores centrados na face e no volume ponderados pelas distâncias $|\mathbf{d}_{Af}|$ e $|\mathbf{d}_{Bf}|$, respectivamente. As equações para Υ_A

e Υ_B podem ser manipuladas visando gerar a Eq. C.5, que também inclui o salto associado com a componente normal do balanço interfacial de forças Δ_{p_1} (Eq. C.6).

$$p_{Af} - p_{Bf} + p_{BP} - p_{AP} = |\mathbf{d}_{Af}|(a_P)_{Af}\Upsilon_A + |\mathbf{d}_{Bf}|(a_P)_{Bf}\Upsilon_B ; \quad (\text{C.5})$$

$$p_{Af} - p_{Bf} = -\Delta_{p_1} = -\sigma\kappa + 2(\mu_B - \mu_A)\nabla_S \cdot \mathbf{v} + (\rho_B - \rho_A)\mathbf{g} \cdot \mathbf{r} . \quad (\text{C.6})$$

A divisão de ambos os lados da Eq. C.5 pela distância total $|\mathbf{d}_{AB}|$ resulta na Eq. C.7, em que ω_{Af} e ω_{Bf} representam as distâncias relativas apresentadas na Eq. 4.37. Adicionalmente, a substituição do valor nodal vizinho p_{AN} é realizada de acordo com a Eq. 4.46.

$$\frac{\overbrace{p_{BP} - \Delta_{p_1} - p_{AP}}^{p_{AN}}}{|\mathbf{d}_{AB}|} = \omega_{Bf}(a_P)_{Af}\Upsilon_A + \omega_{Af}(a_P)_{Bf}\Upsilon_B . \quad (\text{C.7})$$

A seguir, a Eq. C.3 é usada para isolar Υ_A ou Υ_B no lado esquerdo da Eq. C.7. Tal procedimento gera as Eqs. C.8 e C.9, onde uma expressão para o coeficiente difusivo efetivo $(1/a_P)_{eff}$ surge naturalmente. Essas novas expressões para Υ_A e Υ_B englobam o salto interfacial Δ_{p_2} e contribuições implícitas de ambas as fases.

$$\Upsilon_A = \frac{\overbrace{1}^{(1/a_P)_{eff}}}{\omega_{Bf}(a_P)_{Af} + \omega_{Af}(a_P)_{Bf}} \left(\frac{p_{AN} - p_{AP}}{|\mathbf{d}_{AB}|} + \Delta_{p_2}\omega_{Af}(a_P)_{Bf} \right), \quad (\text{C.8})$$

$$\Upsilon_B = \left(\frac{1}{a_P} \right)_{eff} \left(\frac{p_{BP} - p_{BN}}{|\mathbf{d}_{AB}|} - \Delta_{p_2}\omega_{Bf}(a_P)_{Af} \right) . \quad (\text{C.9})$$

Após a resolução da equação de pressão (Eq. 4.17), os valores centrais nas faces são recalculados de acordo com as condições de salto. Com intuito de derivar uma expressão para esta atualização, resgata-se a condição cinemática (Eqs. C.3 e C.4):

$$\left(\frac{1}{a_P} \right)_{Af} \frac{p_{Af} - p_{AP}}{|\mathbf{d}_{Af}|} - \left(\frac{1}{a_P} \right)_{Bf} \frac{p_{BP} - \overbrace{p_{Bf}}^{p_{Af} + \Delta_{p_1}}}{|\mathbf{d}_{Bf}|} = \Delta_{p_2} . \quad (\text{C.10})$$

Na Equação C.10, a componente normal do balanço de forças interfacial (Eq. 3.15) também é considerada ao avaliar p_{Bf} como p_{Af} e o salto Δ_{p_1} (Eq. C.6). Por fim, a Eq. 4.46 é aplicada para recuperar a definição da pressão no vizinho p_{AN} e a equação resultante adquire a seguinte forma:

$$p_{Af} = \frac{\Delta_{p_2} + p_{AP} \frac{1}{|\mathbf{d}_{Af}|(a_P)_{Af}} + p_{AN} \frac{1}{|\mathbf{d}_{Bf}|(a_P)_{Bf}}}{\frac{1}{|\mathbf{d}_{Af}|(a_P)_{Af}} + \frac{1}{|\mathbf{d}_{Bf}|(a_P)_{Bf}}} . \quad (\text{C.11})$$

Referências Bibliográficas

- [1] 2009. “OpenFOAM Users Guide - Version 1.6” . .
- [2] ABADIE, T., AUBIN, J., LEGENDRE, D., 2015, “On the combined effects of surface tension force calculation and interface advection on spurious currents within Volume of Fluid and Level Set frameworks”, *Journal of Computational Physics*, v. 297, pp. 611–636.
- [3] ANDERSON, J. D., 1995, *Computational Fluid Dynamics - The Basics with Applications*. New York, McGraw-Hill.
- [4] ANDERSON, J. D., 2005, “Ludwig Prandtl’s Boundary Layer”, *Physics Today*, v. 58, n. 12, pp. 42–48.
- [5] ANJOS, G., BORHANI, N., MANGIAVACCHI, N., et al., 2014, “A 3D moving mesh Finite Element Method for two-phase flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 270, pp. 366–377.
- [6] AULISA, E., MANSERVISI, S., SCARDOVELLI, R., 2006, “A novel representation of the surface tension force for two-phase flow with reduced spurious currents”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 195, pp. 6239–6257.
- [7] BALCÁZAR, N., LEHMKUHL, O., JOFRE, L., et al., 2016, “A coupled volume-of-fluid/level-set method for simulation of two-phase flows on unstructured meshes”, *Computers & Fluids*, v. 124, pp. 12–29.
- [8] BASTING, C., KUZMIN, D., 2014, “Optimal control for mass conservative level set methods”, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 270, pp. 343–352.
- [9] BASTING, S., WEISMANN, M., 2013, “A hybrid level set-front tracking finite element approach for fluid-structure interaction and two-phase flow applications”, *Journal of Computational Physics*, v. 255, pp. 228–244.
- [10] BATCHELOR, G. K., 1967, *An Introduction to Fluid Dynamics*. -, Cambridge University Press.

- [11] BÄUMLER, K., WEGENER, M., PASCHEDAG, A. R., et al., 2011, “Drop rise velocities and fluid dynamic behavior in standard test systems for liquid/liquid extraction - experimental and numerical investigations”, *Chemical Engineering Science*, v. 66, pp. 426–439.
- [12] BÄUMLER, K., 2014, *Simulation of single drops with variable interfacial tension*. Ph.d. thesis, Erlangen-Nuremberg.
- [13] BEAUDOIN, M., JASAK, H., 2008, “Development of a Generalized Grid Interface for Turbomachinery simulations with OpenFOAM”. In: *Open Source CFD International Conference*.
- [14] BERG, J., 1982, “Interfacial hydrodynamics: an overview”, *Canadian Metallurgical Quarterly*, v. 21, n. 2, pp. 121–136.
- [15] BERTAKIS, E., 2013, *Interfaces in fluid dynamic simulations of single droplets in liquid-liquid systems*. Ph.d. thesis, Aachen University.
- [16] BERTAKIS, E., GROB, S., GRANDE, J., et al., 2010, “Validated simulation of droplet sedimentation with finite-element and level-set methods”, *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 6, pp. 2037–2051.
- [17] BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. N., 2007, *Transport phenomena*. 2nd ed. New York, NY, John Wiley & Sons, Inc.
- [18] BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B., ZEMACH, C., 1992, “A continuum method for modeling surface tension”, *Journal of Computational Physics*, v. 100, pp. 335–354.
- [19] BRENNEN, C. E., 2005, *Fundamentals of multiphase flow*. 1st ed. Pasadena, California, Cambridge University Press.
- [20] BUTT, H.-J., GRAF, K., KAPPL, M., 2006, *Physics and chemistry of interfaces*. 1st ed. Weinheim, Germany, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- [21] CHAN, D. Y. C., KLASEBOER, E., MANICA, R., 2011, “Film drainage and coalescence between deformable drops and bubbles”, *Soft Matter*, v. 7, n. 6, pp. 2235.
- [22] CHESTERS, A. K., 1991, “The modelling of coalescence processes in fluid-liquid dispersions: a review of current understanding”, *Transactions of the Institution of Chemical Engineers/Engineers*, v. 60, pp. 259–270.

- [23] CHURAEV, N. V., 2003, “Derjaguin’s disjoining pressure in the colloid science and surface phenomena”, *Advances in Colloid and Interface Science*, v. 104.
- [24] CLIFT, R., GRACE, J. R., WEBER, M. E., 1978, *Bubbles, drops, and particles*. 1st ed. New York, Academic Press.
- [25] COPPUS, J. H. C., 1977, *The structure of the wake behind spherical cap bubbles and its relation to the mass transfer mechanism*. Ph.d. thesis, Technische Universiteit Eindhoven.
- [26] CRISTINI, V., BLAWZDZIEWICZ, J., LOEWENBERG, M., 2001, “An Adaptive Mesh Algorithm for Evolving Surfaces: Simulations of Drop Breakup and Coalescence”, *Journal of Computational Physics*, v. 168, n. 2 (apr), pp. 445–463.
- [27] DAI, M., SCHMIDT, D. P., 2005, “Numerical simulation of head-on droplet collision: Effect of viscosity on maximum deformation”, *Physics of Fluids*, v. 17, n. 4.
- [28] DAI, M., SCHMIDT, D. P., 2005, “Adaptive tetrahedral meshing in free-surface flow”, *Journal of Computational Physics*, v. 208, n. 1, pp. 228–252.
- [29] DAI, M., WANG, H., PEROT, J. B., et al., 2002, “Direct Interface Tracking of Droplet Deformation”, *Atomization and Sprays*, v. 12, n. 5-6, pp. 721–736.
- [30] DAI, Z., FORNASIERO, D., RALSTON, J., 1999, “Particle-Bubble Attachment in Mineral Flotation”, *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 217, pp. 70–76.
- [31] DARRIGOL, O., TURNER, J. S., 2006, *Worlds of flow: A history of hydrodynamics from the bernoullis to prandtl*. Oxford, Oxford University Press.
- [32] DE VRIES, A. W. G., 2001, *Path and wake of a Rising Bubble*. Ph.d. thesis, Universiteit Twente.
- [33] DEMIRDZIC, I., PERIC, M., 1988, “Space Conservation Law in Finite Volume Calculations of Fluid Flow”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 8, pp. 1037–1050.
- [34] DONEA, J., HUERTA, A., PONTHOT, J.-P., et al., 1999, “Arbitrary Lagrangian - Eulerian Methods”. In: *Encyclopedia of Computational Mechanics*, John Wiley & Sons, cap. 14, pp. 1–25.

- [35] EDGE, R. M., GRANT, C. D., 1971, “The terminal velocity and frequency of oscillation of drops in pure systems”, *Chemical Engineering Science*, v. 26, n. 7, pp. 1001–1012.
- [36] EDWARDS, D. A., BRENNER, H., WASAN, D. T., 1991, *Interfacial Transport Process and Rheology*. Boston, Butterworth-Heinemann.
- [37] EMERSON, Z. I., 2007, *Particle and bubble interactions in flotation systems*. Ph.d. thesis, Auburn University.
- [38] ENGBERG, R. F., KENIG, E. Y., 2014, “Numerical simulation of rising droplets in liquid-liquid systems: A comparison of continuous and sharp interfacial force models”, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 50, pp. 16–26.
- [39] ENGBERG, R. F., KENIG, E. Y., 2015, “An investigation of the influence of initial deformation on fluid dynamics of toluene droplets in water”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 76, pp. 144–157.
- [40] ENGBERG, R. F., WEGENER, M., KENIG, E. Y., 2014, “The impact of Marangoni convection on fluid dynamics and mass transfer at deformable single rising droplets – A numerical study”, *Chemical Engineering Science*, v. 116 (sep), pp. 208–222.
- [41] ENGBERG, R. F., WEGENER, M., KENIG, E. Y., 2014, “The influence of Marangoni convection on fluid dynamics of oscillating single rising droplets”, *Chemical Engineering Science*, v. 117 (sep), pp. 114–124.
- [42] ERN, P., FABRE, D., MAGNAUDET, J., 2012, “Wake-Induced Oscillatory Paths of Bodies Freely Rising or Falling in Fluids”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 44, pp. 97–121.
- [43] FAVERO, J. L., 2014, *Simulação de Escoamentos Multifásicos Polidispersos Multivariados*. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio de Janeiro.
- [44] FERZIGER, J. H., PERIC, M., 2003, *Computational methods for fluid dynamics*. 3rd ed. Berlin, Springer.
- [45] FOWLER, J. N., SAITO, T., GAO, R., et al., 2012, “Impact of diblock copolymers on droplet coalescence, emulsification, and aggregation in immiscible homopolymer blends”, *Langmuir*, v. 28, pp. 2347–2356.
- [46] FRANSES, E. I., 2014, “Phases, interfaces, dispersions, and the first three principles of thermodynamics”. In: *Thermodynamics with Chemical Engineering Applications*, Cambridge University Press, cap. 3.

- [47] FULLER, G. G., VERMANT, J., 2012, “Complex fluid-fluid interfaces: rheology and structure”, *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, v. 3, pp. 519–43.
- [48] GANESAN, S., TOBISKA, L., 2012, “Arbitrary Lagrangian-Eulerian finite-element method for computation of two-phase flows with soluble surfactants”, *Journal of Computational Physics*, v. 231, pp. 3685–3702.
- [49] GERLACH, D., TOMAR, G., BISWAS, G., et al., 2006, “Comparison of volume-of-fluid methods for surface tension-dominant two-phase flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 49, pp. 740–754.
- [50] GIBBS, J. W., 1928, *The collected works of JW Gibbs, vol. 1.* -, -.
- [51] GRACE, H. J., WAIREGI, T., NGUYEN, T. H., 1976, “Shapes and velocities of single drops and bubbles moving freely through immiscible liquids”, *Trans Instn Chem Engrs*, v. 54, pp. 167–173.
- [52] GUEYFFIER, D., LI, J., NADIM, A., et al., 1999, “Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 152, n. 2 (jul), pp. 423–456.
- [53] GUO, Z., FLETCHER, D. F., HAYNES, B. S., 2015, “Implementation of a height function method to alleviate spurious currents in CFD modelling of annular flow in microchannels”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 39, pp. 4665–4686.
- [54] HADAMARD, J. S., 1911, “Mouvement permanent lent d’une sphere liquide et visqueuse dans un liquide visqueux”, *CR Acad. Sci.*, v. 152, pp. 1735–1738.
- [55] HARVIE, D. J. E., DAVIDSON, M. R., RUDMAN, M., 2006, “An analysis of parasitic current generation in Volume of Fluid simulations”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 30, pp. 1056–1066.
- [56] HIRT, C. W., NICHOLS, B. D., 1981, “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries”, *Journal of Computational Physics*, v. 39, n. 1 (jan), pp. 201–225.
- [57] HU, Y.-F., LV, W.-J., ZHAO, S., et al., 2015, “Effect of surfactant SDS on DMSO transport across water/hexane interface by molecular dynamics simulation”, *Chemical Engineering Science*, v. 134, pp. 813–822.

- [58] IZBASSAROV, D., MURADOGLU, M., 2015, “A front-tracking method for computational modeling of viscoelastic two-phase flow systems”, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 223, pp. 122–140.
- [59] JANSSEN, P. J. A., ANDERSON, P. D., 2011, “Modeling Film Drainage and Coalescence of Drops in a Viscous Fluid”, *Macromolecular Materials and Engineering*, v. 296, n. 3-4 (mar), pp. 238–248.
- [60] JASAK, H., 1996, *Error analysis and estimation for the finite volume method with applications to fluid flows*. Ph.d. thesis, Imperial College.
- [61] JASAK, H., 2009, “OpenFOAM : Open source CFD in research and industrial use”. In: *World Congress of Chemical Engineering*.
- [62] JASAK, H., TUKOVIĆ, Ž., 2006, “Automatic mesh motion for the unstructured Finite Volume Method”. In: *Transactions of Famena*.
- [63] JASAK, H., WELLER, H. G., GOSMAN, A. D., 1999, “High Resolution NVD Differencing Scheme for Arbitrarily Unstructured Meshes”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 31, pp. 431–449.
- [64] JASAK, H., JEMCOV, A., TUKOVIC, Z., 2007, “OpenFOAM : A C ++ Library for Complex Physics Simulations”, *International Workshop on Coupled Methods in Numerical Dynamics*, v. m, n. November, pp. 1–20.
- [65] JESUS, W. C., ROMA, A. M., PIVELLO, M. R., et al., 2015, “A 3D front-tracking approach for simulation of a two-phase fluid with insoluble surfactant”, *Journal of Computational Physics*, v. 281, pp. 403–420.
- [66] KAVEHPOUR, H. P., 2015, “Coalescence of Drops”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 47, n. 1, pp. 245–268.
- [67] KLEE, A. J., TREYBAL, R. E., 1956, “Rate of Rise or Fall of Liquid Drops”, *AIChE Journal*, v. 2, n. 4, pp. 444–447.
- [68] KRETZSCHMAR, G., MILLER, R., 1991, “Dynamic properties of adsorption layers of amphiphilic substances at fluid interfaces”, *Advances in Colloid and Interface Science*, v. 36, pp. 65–124.
- [69] KRÜGER, T., FRIJTERS, S., GÜNTHER, F., et al., 2013, “Numerical simulations of complex fluid-fluid interface dynamics”, *European Physical Journal: Special Topics*, v. 222, n. 1, pp. 177–198.
- [70] LAMB, H., 1895, “Hydrodynamics”, .

- [71] LANGEVIN, D., 2000, “Influence of interfacial rheology on foam and emulsion properties”, *Advances in Colloid and Interface Science*, v. 88, n. 1-2, pp. 209–22.
- [72] LEAL, L. G., 2007, *Advanced Transport Phenomena*. 1st ed. Cambridge, Cambridge University Press.
- [73] LERVÅG, K. Y., MÜLLER, B., MUNKEJORD, S. T., 2013, “Calculation of the interface curvature and normal vector with the level-set method”, *Computers & Fluids*, v. 84 (sep), pp. 218–230.
- [74] LING, K., LI, Z.-H., SUN, D.-L., et al., 2015, “A three-dimensional volume of fluid/level set (VOSET) method for incompressible two-phase flow”, *Computers & Fluids*, v. 118, pp. 293–304.
- [75] LOTH, E., 2009, *Computational Fluid Dynamics of Bubbles, Drops and Particles*. -, -.
- [76] LOTH, E., 2010, *Particles, Drops and Bubbles: Fluid Dynamics and Numerical Methods*. -, -.
- [77] LUO, K., SHAO, C., YANG, Y., et al., 2015, “A mass conserving level set method for detailed numerical simulation of liquid atomization”, *Journal of Computational Physics*, v. 298, pp. 495–519.
- [78] MAGNAUDET, J., EAMES, I., 2000, “The motion of high-Reynolds-number bubbles in inhomogeneous flows”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 32, pp. 659–708.
- [79] MANICA, R., KLASEBOER, E., CHAN, D. Y., 2016, “The hydrodynamics of bubble rise and impact with solid surfaces”, *Advances in Colloid and Interface Science*, v. 235, pp. 214–232.
- [80] MARIĆ, T., MARSCHALL, H., BOTHE, D., 2015, “lentFoam - A hybrid Level Set/Front Tracking method on unstructured meshes”, *Computers & Fluids*, v. 113, pp. 20–31.
- [81] MARSCHALL, H., BODEN, S., LEHRENFELD, C., et al., 2014, “Validation of Interface Capturing and Tracking techniques with different surface tension treatments against a Taylor bubble benchmark problem”, *Computers & Fluids*, v. 102, pp. 336–352.
- [82] MENON, S., 2011, *A numerical study of droplet formation and behavior using interface tracking methods*. Ph.d. thesis, University of Massachusetts.

- [83] MENON, S., SCHMIDT, D. P., 2009, *Adaptive Tetrahedral Remeshing for Multiphase Flow Simulations in OpenFOAM*. Relatório técnico, Massachusetts Amherst.
- [84] MENON, S., SCHMIDT, D. P., 2011, “Conservative interpolation on unstructured polyhedral meshes: An extension of the supermesh approach to cell-centered finite-volume variables”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, (oct).
- [85] MICHAELIDES, E. E., 2006, *Particles, bubbles & drops*. Danvers, World Scientific.
- [86] MILLER, C. A., SCRIVEN, L. E., 1968, “The oscillations of a fluid droplet immersed in another fluid”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 33, pp. 417–435.
- [87] MUZAFERIJA, S., PERIC, M., 2007, “Computation of Free-Surface Flows Using the Finite-Volume Method and Moving Grids”, *Numerical Heat and Transfer*, v. 32, n. 4.
- [88] MYERS, D., 1999, *Surfaces, Interfaces, and Colloids*. 2nd ed. New York, NY, John Wiley & Sons.
- [89] OSHER, S., FEDKIW, R. P., 2001, “Level set methods: an overview and some recent results”, *Journal of Computational Physics*, pp. 1–65.
- [90] PARSEGHIAN, V. A., 2006, *Van der Waals forces: a handbook for biologists, chemists, engineers, and physicists*. New York, Cambridge University Press.
- [91] PIVELLO, M. R., VILLAR, M. M., SERFATY, R., et al., 2014, “A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 58, pp. 72–82.
- [92] POPINET, S., 2018, “Numerical Models of Surface Tension”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 50, n. 1.
- [93] POZRIKIDIS, C., 2001, *Fluid Dynamics - Theory, Computation and Numerical Simulation*. San Diego, Kluwer Academic Publishers.
- [94] PRANDTL, L., 1904, “Über Flüssigkeitsbewegung bei sehr kleiner Reibung”. In: *Verhandlungen des dritten internationalen Mathematiker-Kongresses in Heidelberg*, pp. 484–491, -.

- [95] PRESS, W. H., TEUKOLSKI, S. A., VETTERLING, W. T., et al., 2007, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press.
- [96] PROSPERETTI, A., 1980, “Normal-mode analysis for the oscillations of a viscous liquid drop in an immiscible liquid”, *Journal de Mecanique*, v. 19, pp. 149–182.
- [97] PROSPERETTI, A., 1981, “Motion of two superimposed viscous fluids”, *Physics of Fluids*, v. 24, pp. 1217–1223.
- [98] PROSPERETTI, A., TRYGGVASON, G., 2007, *Computational methods for multiphase flow*. 1st ed. -, Cambridge University Press.
- [99] QIN, T., TUKOVIĆ, Ž., GRIGORIEV, R. O., 2014, “Buoyancy-thermocapillary convection of volatile fluids under atmospheric conditions”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 75, pp. 284–301.
- [100] QIN, T., TUKOVIĆ, Ž., GRIGORIEV, R. O., 2015, “Buoyancy-thermocapillary convection of volatile fluids under their vapors”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 80, pp. 38–49.
- [101] QUAN, S., 2011, “Simulations of multiphase flows with multiple length scales using moving mesh interface tracking with adaptive meshing”, *Journal of Computational Physics*, v. 230, pp. 5430–5448.
- [102] QUAN, S., SCHMIDT, D. P., 2006, “Direct numerical study of a liquid droplet impulsively accelerated by gaseous flow”, *Physics of Fluids*, v. 18.
- [103] QUAN, S., SCHMIDT, D. P., 2007, “A moving mesh interface tracking method for 3D incompressible two-phase flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 221, pp. 761–780.
- [104] QUAN, S., LOU, J., SCHMIDT, D. P., 2009, “Modeling merging and breakup in the moving mesh interface tracking method for multiphase flow simulations”, *Journal of Computational Physics*, v. 228, pp. 2660–2675.
- [105] RENARDY, Y. Y., RENARDY, M., 2002, “PROST: A Parabolic Reconstruction of Surface Tension for the Volume-of-Fluid Method”, *Journal of Computational Physics*, v. 183, n. 2 (dec), pp. 400–421.
- [106] RUSCHE, H., 2003, *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. Ph.d. thesis, University of London.

- [107] RYBCZYNSKI, W., 1911, “Über die fortschreitende Bewegung einer flüssigen Kugel in einem zähen Medium”, *Bull. Acad. Sci. Cracovie*, pp. 40–46.
- [108] SABONI, A., ALEXANDROVA, S., 2002, “Interdrop coalescence with mass transfer: comparison of the approximate drainage models with numerical results”, *Chemical Engineering Science*, v. 88, pp. 127–139.
- [109] SADHAL, S. S., AYYASWAMY, P. S., CHUNG, J. N., 2006, *Transport Phenomena with Drops and Bubbles*.
- [110] SANCHEZ-REYES, J., ARCHER, L. A., 2003, “Interfacial slip violations in polymer solutions: Role of microscale surface roughness”, *Langmuir*, v. 19, n. 8, pp. 3304–3312.
- [111] SCHÄFER, M., 2006, *Computational engineering: introduction to numerical methods*. Darmstadt, Springer.
- [112] SHARDT, O., DERKSEN, J. J., MITRA, S. K., 2013, “Simulations of droplet coalescence in simple shear flow.” *Langmuir*, v. 29, n. 21 (may), pp. 6201–12.
- [113] SLATTERY, J. C., SAGIS, L. M. C., OH, E.-S., 2007, *Interfacial transport phenomena*. 2nd ed. New York, NY, Springer.
- [114] SOLANS, C., IZQUIERDO, P., NOLLA, J., et al., 2005, “Nano-emulsions”, *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, v. 10, pp. 102–110.
- [115] STOKES, G. G., 1851, “On the effect of the internal friction of fluids on the motion of pendulums”, *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, v. IX.
- [116] TANEDA, S., 1956, “Experimental Investigation of the Wake behind a Sphere at Low Reynolds Numbers”, *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 11, n. 10, pp. 1104–1108.
- [117] TANI, I., 1977, “History of Boundary Layer Theory”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 9, n. 1, pp. 87–111.
- [118] TAYLOR, G. I., 1934, “The formation of emulsions in definable fields of flow”, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 146, pp. 501–523.
- [119] THORSEN, G., STORDALEN, R., TERJESEN, S., 1968, “On the terminal velocity of circulating and oscillating liquid drops”, *Chemical Engineering Science*, v. 23, n. 5, pp. 413–426.

- [120] TOMIYAMA, A., CELATA, G. P., HOSOKAWA, S., et al., 2002, “Terminal velocity of single bubbles in surface tension force dominant regime”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 28, n. 9, pp. 1497–1519.
- [121] TOSUN, I., 2002, *Modelling of transport phenomena*. 1st ed. Ankara, Turkey, Elsevier B.V.
- [122] TRIPATHI, M. K., SAHU, K. C., GOVINDARAJAN, R., 2014, “Why a falling drop does not in general behave like a rising bubble.” *Scientific reports*, v. 4 (jan), pp. 4771.
- [123] TRYGGVASON, G., BUNNER, B., ESMAEELI, A., et al., 2001, “A Front-Tracking Method for the Computations of Multiphase Flow”, *Journal of Computational Physics*, v. 169, pp. 708–759.
- [124] TUKOVIĆ, Ž., 2005, *Finite volume method on domains of varying shape (in Croatian)*. Ph.d. thesis, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb.
- [125] TUKOVIĆ, Ž., JASAK, H., 2008, “Simulation of free-rising bubble with soluble surfactant using moving mesh finite volume/area method”. In: *Proceedings of the 6th International Conference on CFD in Oil & Gas, Metallurgical and Process Industries*, n. June, pp. 1–11.
- [126] TUKOVIĆ, Ž., JASAK, H., 2012, “A moving mesh finite volume interface tracking method for surface tension dominated interfacial fluid flow”, *Computers & Fluids*, v. 55, pp. 70–84.
- [127] UCHIYAMA, T., 2001, “ALE finite element method for gas-liquid two-phase flow including moving boundary based on an incompressible two-fluid model”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 205, pp. 69–82.
- [128] UNVERDI, S. O., TRYGGVASON, G., 1992, “A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows”, *Journal of Computational Physics*, v. 100.
- [129] VAN PUYVELDE, P., MOLDENAERS, P., 2005, “Rheology and morphology development in immiscible polymer blends”, *Rheology Reviews*, pp. 101–145.
- [130] VANNOZZI, C., 2012, “Coalescence of surfactant covered drops in extensional flows: Effects of the interfacial diffusivity”, *Physics of Fluids*, v. 24, n. 8.

- [131] VILLONE, M. M., HULSEN, M. A., ANDERSON, P. D., et al., 2014, “Simulations of deformable systems in fluids under shear flow using an arbitrary Lagrangian Eulerian technique”, *Computers & Fluids*, v. 90, pp. 88–100.
- [132] WEGENER, M., PASCHEDAG, A. R., 2011, “Mass transfer enhancement at deformable droplets due to Marangoni convection”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 37, n. 1, pp. 76–83.
- [133] WEGENER, M., PASCHEDAG, A. R., 2012, “The effect of soluble anionic surfactants on rise velocity and mass transfer at single droplets in systems with Marangoni instabilities”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 55, n. 5-6, pp. 1561–1573.
- [134] WEGENER, M., GRUNIG, J., STUBER, J., et al., 2007, “Transient rise velocity and mass transfer of a single drop with interfacial instabilities - experimental investigations”, *Chemical Engineering Science*, v. 62, pp. 2967–2978.
- [135] WEGENER, M., EPPINGER, T., BÄUMLER, K., et al., 2009, “Transient rise velocity and mass transfer of a single drop with interfacial instabilities- Numerical investigations”, *Chemical Engineering Science*, v. 64, n. 23, pp. 4835–4845.
- [136] WEGENER, M., FEVRE, M., PASCHEDAG, A. R., et al., 2009, “Impact of Marangoni instabilities on the fluid dynamic behaviour of organic droplets”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 52, n. 11-12, pp. 2543–2551.
- [137] WEGENER, M., KRAUME, M., PASCHEDAG, A. R., 2009, “Influence of Marangoni convection on mass transfer at non-spherical droplets”, *Chemical Engineering Transactions*, v. 17, pp. 525–530.
- [138] WEGENER, M., PASCHEDAG, A. R., KRAUME, M., 2009, “Mass transfer enhancement through Marangoni instabilities during single drop formation”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 52, n. 11-12, pp. 2673–2677.
- [139] WEGENER, M., KRAUME, M., PASCHEDAG, A. R., 2010, “Terminal and transient drop rise velocity of single toluene droplets in water”, *AIChE Journal*, v. 56, n. 1, pp. 2–10.
- [140] WEGENER, M., PAUL, N., KRAUME, M., 2014, “Fluid dynamics and mass transfer at single droplets in liquid/liquid systems”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 71, pp. 475–495.

- [141] WHITE, F. M., 2005, *Fluid Mechanics*. 4th ed. Berlin, Springer-Verlag.
- [142] WIEDEMAIR, W., TUKOVIĆ, Ž., JASAK, H., et al., 2012, “On ultrasound-induced microbubble oscillation in a capillary blood vessel and its implications for the blood-brain barrier”, *Physics in Medicine and Biology*, v. 57.
- [143] WIEDEMAIR, W., TUKOVIĆ, Ž., JASAK, H., et al., 2014, “Modeling the interaction of microbubbles: Effects of proximity, confinement, and excitation amplitude”, *Physics of Fluids*, v. 26.
- [144] WINNIKOW, S., CHAO, B. T., 1966, “Droplet motion in purified systems”, *Physics of Fluids*, v. 9, n. 50, pp. 50–61.
- [145] WÖRNER, M., 2003. “A compact introduction to the numerical modeling of multiphase flows” . .
- [146] WÖRNER, M., 2012, “Numerical modeling of multiphase flows in microfluidics and micro process engineering: a review of methods and applications”, *Microfluidics and Nanofluidics*, v. 12, n. 6, pp. 841–886.
- [147] WU, M., GHARIB, M., 2002, “Experimental studies on the shape and path of small air bubbles rising in clean water”, *Physics of Fluids*, v. 14, n. 7, pp. 49–52.
- [148] YAGLOM, A. M., 2012, *Hydrodynamic instability and transition to turbulence*. 1st ed. New York, Springer.
- [149] YANG, B., PROSPERETTI, A., 2006, “A second-order boundary-fitted projection method for free-surface flow computations”, *Journal of Computational Physics*, v. 213, pp. 574–590.
- [150] YOON, Y., BORRELL, M., PARK, C. C., et al., 2005, “Viscosity ratio effects on the coalescence of two equal-sized drops in a two-dimensional linear flow”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 525, pp. 355–379.
- [151] YOON, Y., HSU, A. S., LEAL, L. G., 2007, “Experimental investigation of the effects of copolymer surfactants on flow-induced coalescence of drops”, *Physics of Fluids*, v. 19.
- [152] ZAPRYANOV, Z., TABAKOVA, S., 1999, *Dynamics of Bubble, Drops and Rigid Particles*. 1st ed. Sofia, Springer-Verlag.