

MARIANA FERNANDES DOS SANTOS VILLELA

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE ESCOAMENTOS
BIFÁSICOS USANDO A METODOLOGIA
IMERSPEC COMBINADA COM OS MÉTODOS
VOF E FRONT-TRACKING**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA
2015

MARIANA FERNANDES DOS SANTOS VILLELA

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE ESCOAMENTOS
BIFÁSICOS USANDO A METODOLOGIA IMERSPEC
COMBINADA COM OS MÉTODOS VOF E
FRONT-TRACKING**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para a obtenção do título de **DOUTORA EM ENGENHARIA MECÂNICA**.

Área de concentração: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Co-orientador: Prof. Dr. Felipe Pamplona Mariano

Uberlândia - MG

2015

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

V735m Villela, Mariana Fernandes dos Santos, 1985-
2015 Modelagem matemática de escoamentos bifásicos usando a
metodologia IMERSPEC combinada com os Métodos VOF e Front-
Tracking / Mariana Fernandes dos Santos Villela. - 2015.
144 p. : il.

Orientador: Aristeu da Silveira Neto.
Coorientador: Felipe Pamplona Mariano.
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Uberlândia, Programa
de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.
Inclui bibliografia.

1. Engenharia mecânica - Teses. 2. Escoamento bifásico - Teses. 3.
Fourier, Transformações de - Teses. I. Silveira Neto, Aristeu da, 1955-
II. Mariano, Felipe Pamplona, 1981- III. Universidade Federal de
Uberlândia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. IV.
Título.

CDU: 621

*"Dedico este trabalho a minha mãe
Maristela, aos meus irmãos Sarah e
Rodrigo e ao meu marido Ismael."*

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer, primeiramente, ao meu orientador e amigo Professor Aristeu da Silveira Neto, agradeço pela paciência, carinho, ensinamentos e conselhos profissionais e pessoais transmitidos a mim ao longo dessa jornada. Deixo aqui meu sincero sentimento de gratidão.

Ao meu co-orientador e amigo Felipe Pamplona Mariano, pelas inestimáveis ideias e ajudas desde o início dos estudos sobre os métodos espectrais.

Ao Dr. Ricardo Serfaty, da PETROBRÁS, agradeço pelas sugestões e contribuições transmitidas ao longo deste trabalho, no contexto de uma longa e profícua cooperação científica.

Agradeço à minha família, em especial, a minha mãe Maristela e meus irmãos, Sarah e Rodrigo, por serem meu porto seguro devido ao carinho, respeito e amor incondicional que foram transmitidos a mim ao longo de minha vida. Ao meu padrasto Reginaldo Nassar Ferreira, pelo incentivo e por ser um exemplo profissional, o qual terei sempre como referência.

Agradeço de forma especial e não menos importante, ao meu marido Ismael por todo amor e por compreender meus momentos de ausência.

Aos meus familiares, principalmente, minha vó Maria Cândida e meu tio Marcelo, por todo carinho e acreditarem em mim.

Aos meus amigos do MFLab, de uma maneira ou de outra, foram indispensáveis para a realização deste trabalho. Em especial a pesquisadora Dra. Millena M. Villar pelas inestimáveis ajudas que foram de extrema importância para a realização deste trabalho. Agradeço também ao grupo espectral, em especial aos meus amigos Denise e Renato, pela colaboração durante a realização deste trabalho.

Ao CNPQ e à PETROBRAS por financiar meus estudos durante este período do curso de doutorado e à FEMEC e coordenação de pós graduação pelo suporte e infra-estrutura.

A Deus por me acompanhar nesta jornada, sempre me dando serenidade para discernir entre o certo e o errado, e me dando forças para seguir o caminho do bem.

VILLELA, M. F. S., **Modelagem de escoamentos bifásicos usando a metodologia IMERSPEC combinada com os métodos VOF e Front-tracking**. 2015. 166 f. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

No presente trabalho propõe-se a extensão da metodologia IMERSPEC para resolver problemas de escoamentos bifásicos. Esta metodologia é baseada no acoplamento do método pseudoespectral de Fourier (MPEF) com o método da fronteira-imersa (MFI). As principais características desta metodologia são a alta taxa de convergência numérica e a alta acurácia aliadas a um baixo custo computacional devido ao algoritmo denominado *Fast Fourier Transform* (FFT) e, além disso, na resolução das equações de Navier-Stokes não é necessário resolver o sistema linear proveniente do acoplamento pressão-velocidade. Para tratar escoamentos bifásicos com geometria móvel e deformável, dois métodos foram acoplados à metodologia IMERSPEC: *Front-Tracking* (FT) e *Volume of fluid* (VOF). O método FT trabalha com dois domínios, sendo um euleriano, onde se resolvem as equações para o fluido e o outro, móvel, lagrangiano, utilizado para as interfaces entre dois fluidos. Para este método, ambos os domínios são acoplados pelo processo de interpolação e distribuição do campo de força lagrangiano e não apresentam restrição quanto ao movimento da malha lagrangiana sobre o domínio euleriano e quanto à deformação da mesma. As principais desvantagens do método *Front-Tracking* estão na possível perda de massa e na necessidade de implementar modelos para fragmentação e coalescência. O método VOF define a superfície através de frações de volume, o que permite fragmentação e coalescência de bolhas não requerendo modelos específicos. Entretanto apresenta instabilidades numéricas no cálculo da curvatura. Os resultados obtidos através da avaliação das correntes espúrias, conservação de massa e análise através de experimentação numérica de ascensão de bolhas mostram que a metodologia IMERSPEC-FT pode ser considerada validada, enquanto que a metodologia IMERSPEC-VOF apresentou resultados promissores para regime de bolha cilíndrica.

Palavras Chave: escoamentos bifásicos, método pseudoespectral de Fourier, método *Front-Tracking*, método *Volume of Fluid*.

VILLELA, M. F. S., **Two-phase flow modeling by combining IMERSPEC methodology with the VOF and Front-tracking methods.** 2015. 166 f. Doctor Thesis, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

ABSTRACT

The present work proposes to extend the IMERSPEC methodology to solve two-phase flows. This methodology based on the coupling of Fourier pseudospectral method (FPSM) and immersed boundary method (IBM). The main features of the FPSM are the high rate of numerical convergence, high numerical accuracy combined with high computational efficiency because it uses the Fast Fourier Transform algorithm, and beside that, in order to solve the Navier-Stokes equations, solving linear system for pressure-velocity coupling is not necessary. To deal with two-phase flows with moving and deformable geometry, two methods were coupled the IMERSPEC methodology: the Front-Tracking method (FT) and Volume of Fluid method (VOF). The FT method works with two domains, the Eulerian, where the equations for the fluid are evaluated and the Lagrangian for modeling the interfaces. In the FT, both domains are coupled by using interpolation and distribution process, with no restriction on the movement and deformation of the dispersed phase of the Lagrangian mesh over Eulerian domain. The disadvantages of the FT method are a possible mass loss and the need of a fragmentation and coalescence bubble model. The VOF method defines the surface by the volume fractions which allows the fragmentation and coalescence of bubbles without the requirement of implementing a specific model, however it may present numerical instabilities. The results obtained by evaluating the spurious currents, mass conservation and analysis through numerical experimentation of bubbles rise show that IMERSPEC-FT can be considered validated and promising, while the IMERSPEC-VOF presents promising results for cylindrical bubble regime.

Keywords: two-phase-flows, Fourier pseudospectral method, Front-Tracking method, Volume of Fluid Method.

LISTA DE FIGURAS

1.1	Classificação dos escoamentos gás-líquido em um tubo vertical. Adaptado de Yeoh and Tu (2010).	p. 2
1.2	Escoamentos bifásicos apresentando as diferentes formas que as bolhas podem assumir (BHAGA; WEBER, 1981): (a) esférica; (b) elipsoidal; (c) calota-esférica e (d) <i>skirted</i> .	p. 3
1.3	Simulações numéricas utilizando a metodologia IMERSPEC: (a) queda de uma partícula em um domínio bidimensional e não-periódico (MARIANO, 2011); (b) escoamento de um jato em desenvolvimento espacial tridimensional (MOREIRA, 2011).	p. 5
1.4	Métodos para representação da interface móvel e deformável (HYMAN, 1984): (a) Método VOF; (b) Método FT.	p. 7
3.1	Linhas de corrente ao redor de uma interface circular, onde $\rho(\phi)$ e $\mu(\phi)$ são a massa específica e viscosidade variáveis, respectivamente, na interface estendida. ρ_c e μ_c são a massa específica e a viscosidade da fase contínua, ρ_d e μ_d é a massa específica e viscosidade da fase dispersa, respectivamente, e $I(\phi)$ é a função indicadora.	p. 22
3.2	Representação esquemática dos domínios lagrangiano (Γ_{MFI}) e euleriano (Ω_{MFI}) (MARIANO, 2011).	p. 23
3.3	Representação dos domínios euleriano $\Omega_{FM} = \Omega_0 \cup \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$ e lagrangiano $\Gamma_{FM} = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ para três corpos imersos de geometria arbitrária.	p. 25
3.4	Função distribuição do tipo Gaussiana (LAI; PESKIN, 2000).	p. 26
3.5	Parâmetro s para uma interface Γ_{FM} representada por uma curva fechada.	p. 27

3.6	Interface separando duas regiões construídas por frações volumétricas (Método VOF) (SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999), sendo a fase 1 denominada dispersa e a fase 2, contínua.	p. 29
3.7	Resumo da modelagem matemática para escoamentos bifásicos.	p. 31
3.8	Definição do plano π (SILVEIRA NETO, 2002).	p. 34
3.9	Projeção dos termos fonte, advectivo, difusivo e do termo gravitacional sobre o plano π	p. 36
4.1	Comparação entre a resolução da TDF e da FFT (MARIANO, 2007).	p. 40
4.2	Exemplo de fenômeno de Gibbs em uma função do tipo onda quadrada (NAVARRA; STERN; MIYAKODA, 1994).	p. 44
4.3	Representação esquemática da malha euleriana e da malha lagrangiana nas simulações realizadas com o método FT.	p. 47
4.4	Representação esquemática da malha lagrangiana, sobre os nós de colocação eulerianos.	p. 48
4.5	Representação esquemática da redefinição de malha lagrangiana: (a) remoção de ponto e (b) inserção de ponto.	p. 51
4.6	Representação da curva S sobre a malha de discretização do domínio.	p. 53
4.7	Representação esquemática da submalha.	p. 53
4.8	Representação da célula para a reconstrução da interface no método VOF-PLIC.	p. 55
4.9	Representação esquemática da malha para o cálculo da normal.	p. 56
4.10	Advecção lagrangiana da interface. Fonte: (SILVEIRA NETO et al., 2010).	p. 56
5.1	Variação das propriedades físicas com 128×128 nós de colocação em $t = 5$ [s]: (a) ρ ; (b) μ	p. 64
5.2	Campos em $t = 0$ [s] com 256×256 nós de colocação: (a) velocidade u ; (b) pressão p	p. 65
5.3	Propriedades físicas em $t = 0$ [s] com 256×256 nós de colocação: (a) viscosidade μ ; (b) massa específica ρ	p. 66
5.4	Representação esquemática do teste de cisalhamento da interface lagrangiana.	p. 68

5.5	Evolução temporal do campo da função indicadora: (a) e (b) em $t = 0,00$ [s]; (c) e (d) em $t = 0,02$ [s]; (e) e (f) $t = 0,10$ [s].	p. 69
5.6	Comparação de uma interface: (a) com redefinição da malha Lagrangiana em $t = 0,10$ [s]; (b) sem redefinição da malha lagrangiana em $t = 0,10$ [s]. .	p. 70
5.7	Média de Δs_i e Δs ao longo do tempo.	p. 71
5.8	Representação gráfica da função coloração: (a) de uma circunferência e (b) de uma elipse.	p. 72
5.9	Erro relativo da função coloração: (a) de uma circunferência e (b) de uma elipse.	p. 72
5.10	Trajetória em sentido horário do disco de Zalesak.	p. 74
5.11	Configuração do teste de Zalesak em: (a) $t = 0$ e (b) $t = 0,25$	p. 75
5.12	Perfil horizontal do campo da função indicadora e da função coloração em $t = 0$ [s] e $y = 0,75$ [m]: I (função indicadora para FT) e fc (função coloração). p.	76
5.13	Evolução temporal do campo da função indicadora e do campo da função coloração: (a) FT e (b) VOF em $t = 0,0$ [s]; (c) FT e (d) VOF em $t = 1,5$ [s]; (e) FT e (f) VOF em $t = 4,0$ [s]; (g) FT e (h) VOF em $t = 6,5$ [s]; (i) FT e (j) VOF em $t = 8,0$ [s].	p. 77
5.14	Distribuição dos pontos lagrangianos sobre a interface em $t = 4$ [s] (a) com regularização e (b) sem regularização; método FT.	p. 78
5.15	Erro da norma L_2 para o cálculo da curvatura para diferentes métodos. . .	p. 80
5.16	Comparativo para o cálculo da curvatura entre os métodos CELESTE e o aproximação por polinômios de Lagrange de quarta ordem.	p. 80
5.17	Representação gráfica do $ u _{max}$ ao longo do tempo com $\rho_1/\rho_2 = 1,0$ e $\mu_1/\mu_2 = 1,0$, utilizando: (a) filtro Lanczos e (b) filtro exponencial.	p. 85
5.18	Diagrama de Clift, Grace and Weber (1978).	p. 89
5.19	Domínio de cálculo	p. 90
5.20	Evolução temporal da ascensão da bolha para diferentes domínios, teste A_2 : (a) $D_1 = [0,0;2,0] \times [0,0;6,0]$; (b) $D_2 = [0,0;4,0] \times [0,0;12,0]$; (c) $D_3 =$ $[0,0;6,0] \times [0,0;18,0]$ e (d) $D_4 = [0,0;8,0] \times [0,0;24,0]$	p. 91

5.21	Evolução temporal do número de Reynolds do teste A_2 para os domínio D_1 , D_2 , D_3 e D_4	p. 92
5.22	Evolução temporal da ascensão da bolha para diferentes domínios, teste A_7 : (a) $D_5 = [0,0;0,1] \times [0,0;0,3]$; (b) $D_6 = [0,0;0,15] \times [0,0;0,45]$; (c) $D_7 = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$; (d) $D_8 = [0,0;0,3] \times [0,0;0,9]$ e (e) $D_9 = [0,0;0,4] \times [0,0;1,2]$	p. 94
5.23	Evolução temporal da forma da bolha para diferentes domínios, teste A_7 : (a) $D_5 = [0,0;0,1] \times [0,0;0,3]$; (b) $D_6 = [0,0;0,15] \times [0,0;0,45]$; (c) $D_7 = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$; (d) $D_8 = [0,0;0,3] \times [0,0;0,9]$ e (e) $D_9 = [0,0;0,4] \times [0,0;1,2]$	p. 95
5.24	Evolução temporal do número de Reynolds, teste A_7 , para os domínio D_5 , D_6 , D_7 , D_8 e D_9	p. 96
5.25	Evolução temporal da forma da bolha para diferentes números de nós de colocação, teste A_7 : (a) 128×256 ; (b) 256×512 ; (c) 512×1024 e (d) 1024×2048	p. 97
5.26	Evolução temporal do número de Reynolds, teste A_7 , para diferentes quantidades de nós de colocação.	p. 98
5.27	Análise do tempo de processamento com o refinamento dos nós de colocação para o teste A_7	p. 99
5.28	Evolução temporal da forma da bolha sobre linhas de correntes, teste A_7 : (a) $t^* = 7,27$; (b) $t^* = 10,90$; (c) $t^* = 14,55$ e (d) $t^* = 18,18$	p. 100
5.29	Trajetória da bolha em regime <i>wobbling</i> (ELLINGSEN; RISSO, 2001). . . .	p. 104
5.30	Vizualização do domínio de cálculo e da deformação da bolha ascendente ao longo do tempo do presente trabalho para o teste C_1 : (a) $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ (b) $D = [0,0;0,312] \times [0,0;1,872]$	p. 105
5.31	Deformação da bolha ascendente ao longo do tempo, teste C_1 : (a) Villar (2007), (b) presente trabalho - $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ e (c) presente trabalho - $D = [0,0;0,312] \times [0,0;1,872]$	p. 106
5.32	Evolução do Reynolds ao longo do tempo para $Eu = 5,09$ e $M = 5,10 \times 10^{-10}$ obtido no trabalho de Villar (2007) e no presente trabalho, teste C_1	p. 107

5.33	Campo de vorticidade do teste C_1 em: (a) $t^* = 17,63$; (b) $t^* = 24,90$; (c) $t^* = 32,36$; (d) $t^* = 39,63$; (e) $t^* = 47,27$; (f) $t^* = 54,54$	p. 108
5.34	Dados experimentais de Liu, Zheng and Zhang (2005) da forma da bolha em regime <i>wobbling</i> , teste C_1	p. 109
5.35	Campo da função indicadora. Resultados da simulação numérica do presente trabalho da forma da bolha em regime <i>wobbling</i> , teste C_1	p. 110
5.36	Evolução do número de Reynolds ao longo do tempo na simulação numérica do caso teste C_2 utilizando o filtro <i>Lanczos</i>	p. 111
5.37	Evolução do número de Reynolds ao longo do tempo na simulação numérica do caso teste C_2 utilizando o filtro exponencial.	p. 112
5.38	Evolução da perda de área ao longo do tempo na simulação numérica utilizando o filtro <i>Lanczos</i> , teste C_2	p. 113
5.39	Evolução da perda de área ao longo do tempo na simulação numérica utilizando o filtro exponencial, teste C_2	p. 114
5.40	Salto de pressão ao longo de x utilizando o filtro <i>Lanczos</i> , teste C_2	p. 114
5.41	Salto de pressão ao longo de x utilizando o filtro exponencial, teste C_2	p. 115
5.42	Evolução temporal do número de Reynolds do teste A_1	p. 117
5.43	Representação gráfica da forma da bolha para o teste A_1	p. 118
5.44	Perfil do campo de pressão traçado no centro da interface para o teste A_1 utilizando a metodologia IMERSPEC-VOF em $t^* = 0,0$ e $t^* = 36,36$	p. 119
5.45	Evolução temporal do número de Reynolds do teste A_1	p. 120
5.46	Perfil do campo de pressão traçado no centro da interface para o teste A_1 utilizando a metodologia IMERSPEC-VOF e IMERSPEC-FT em $t^* = 36,36$	p. 121
A.1	Campo da função indicadora do teste A_{A6} em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 2,18$; (c) $t^* = 4,36$; (d) $t^* = 6,72$; (e) $t^* = 8,90$; (f) $t^* = 11,27$; (g) $t^* = 13,81$; (h) $t^* = 15,00$	p. 142
A.2	Campo de vorticidade do teste A_{A6} em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 2,18$; (c) $t^* = 4,36$; (d) $t^* = 6,72$; (e) $t^* = 8,90$; (f) $t^* = 11,27$; (g) $t^* = 13,81$; (h) $t^* = 15,00$	p. 143

- A.3 Campo da função indicadora para o teste $C1$, em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 1,86$;
 (c) $t^* = 3,73$; (d) $t^* = 5,60$; (e) $t^* = 7,46$; (f) $t^* = 10,07$; (g) $t^* = 11,94$; (h)
 $t^* = 14,92$ p. 144
- A.4 Campo da função indicadora para o teste $C1$, em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 1,86$;
 (c) $t^* = 3,73$; (d) $t^* = 5,60$; (e) $t^* = 7,46$; (f) $t^* = 10,07$; (g) $t^* = 11,94$; (h)
 $t^* = 14,92$ p. 145

LISTA DE TABELAS

4.1	Coeficientes dos esquema RK46 (ALLAMPALLI et al., 2009).	p. 44
5.1	Norma L_2 para u , v e p com ρ e μ variáveis em $t = 5[s]$ e $c = 0, 1$	p. 66
5.2	Norma L_2 para u , v e p com ρ e μ variáveis em $t = 5[s]$ utilizando 128×128 nós de colocação e variando a constante c	p. 67
5.3	Erro da norma L_1 do presente trabalho e de Gueyffier et al. (1999).	p. 73
5.4	Cálculo do erro geométrico.	p. 74
5.5	Perda de massa das metodologias IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF.	p. 78
5.6	Magnitude da corrente espúrias (Ca) para uma malha fixa 32×32 para diferentes La	p. 82
5.7	Magnitude das correntes espúrias Ca para $La = 12.000$ e a malha variável.	p. 82
5.8	Magnitude das correntes espúrias Ca para diferentes razões de propriedades físicas.	p. 83
5.9	Erro relativo do salto de pressão para diferentes razões de propriedades físicas.	p. 84
5.10	Cálculo do $ u _{max}$ e $E(\Delta p)_n$ para diferentes razões de massa específica.	p. 85
5.11	Cálculo do $ u _{max}$ para diferentes razões de massa específica.	p. 86
5.12	Cálculo da magnitude da velocidade máxima ($ u _{max}$) e erro do salto de pressão ($E(\Delta p)_{max}$) em $t = 0 [s]$	p. 86
5.13	Cálculo da magnitude da velocidade máxima ($ u _{max}$) e erro do salto de pressão ($E(\Delta p)_{max}$) em $t = 50\Delta t [s]$	p. 87

5.14	Comparação da forma da bolha em regime permanente e do número de Reynolds observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007) com os resultados obtidos no presente trabalho para $\lambda = 2,0$	p. 103
5.15	Comparação da forma da bolha em regime estacionário e do número de Reynolds observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) com os resultados obtidos no presente trabalho para $\lambda = 10,0$	p. 104
5.16	Comparação da forma da bolha em regime estacionário e do número de Reynolds observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007) com os resultados obtidos no presente trabalho, teste C_1	p. 109
5.17	Comparação do número de Reynolds observados no experimento de Bhaga and Weber (1981) e nas simulações numéricas do presente trabalho para os filtros <i>Lanczos</i> e exponencial, teste C_2	p. 112
5.18	Comparação do número de Reynolds terminal observados no experimento de Bhaga and Weber (1981) e nas simulações numéricas do presente trabalho, teste C_2 , para os filtros <i>Lanczos</i> e exponencial.	p. 115
5.19	Comparação da forma da bolha em regime estacionário e do número de Reynolds observados no experimento de Bhaga and Weber (1981) e na simulação numérica de Hua and Lou (2007) com os resultados obtidos no presente trabalho, teste C_3	p. 116
5.20	Comparação do número de Reynolds em regime estacionário observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007) com os resultados obtidos nas metodologias IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF, teste A_1	p. 120
A.1	Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste A_1	p. 136
A.2	Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho A_2 , A_3 e A_4	p. 137

A.3	Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho A_5 , A_6 e A_7	p. 138
A.4	Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para os testes B_1 e B_2	p. 139
A.5	Condição de entrada para a simulação numérica da bolha <i>wobbling</i> em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_1	p. 139
A.6	Condição de entrada para simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_2	p. 140
A.7	Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_3	p. 140
A.8	Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_4	p. 141

LISTA DE SÍMBOLOS

Siglas

<i>AUX</i>	-	variável auxiliar do Runge-Kutta
<i>CSF</i>	-	“Continuum Surface Force”
<i>CFD</i>	-	“Computational Fluid Dynamics”
<i>DF</i>	-	“Direct Forcing”, Modelo da imposição direta da força
<i>DFT</i>	-	“Direct Fourier Transform”, transformada discreta de Fourier
<i>DNS</i>	-	“Direct Numerical Simulation”, simulação numérica direta
<i>EDP</i>	-	Equação Diferencial Parcial
<i>FEMEC</i>	-	Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia
<i>FFT</i>	-	“Fast Fourier Transform”, transformada rápida de Fourier
<i>FT</i>	-	“Front-Tracking method”, Método Front-tracking
<i>GRAV</i>	-	termo gravitacional das equações de Navier-Stokes
<i>IMERSPEC</i>	-	Método da Fronteira Imersa acoplada com o método pseudo-espectral de Fourier
<i>MFI</i>	-	Método da Fronteira Imersa (Immersed Boundary Method - IBM)
<i>MFLab</i>	-	Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia
<i>MPEF</i>	-	Método Pseudo-Espectral de Fourier
<i>PLIC</i>	-	“Piecewise Linear Interface Calculation”
<i>tnl</i>	-	termo não linear das equações de Navier-Stokes
<i>UFU</i>	-	Universidade Federal de Uberlândia
<i>visc</i>	-	termo viscoso (difusivo) das equações de Navier-Stokes
<i>VOF</i>	-	“Volume of Fluid method”

Operadores

∂	-	derivada parcial
\int	-	integral
<i>max</i>	-	máximo valor
<i>min</i>	-	mínimo valor
Σ	-	somatória
\wp	-	projeção
$*$	-	produto de convolução

Subscritos

i	- índice da notação tensorial
j	- índice da notação tensorial
∞	- infinito
1	- fase 1
2	- fase 2
c	- fase contínua
d	- fase dispersa

Sobrescritos

e	- variável analítica
ce	- célula computacional
it	- iteração atual
t	- variável no tempo atual
\wedge	- variável no espaço espectral de Fourier
$*$	- variável temporária
FM	- fronteira móvel e deformável
fe	- fluido-estática
fd	- fluido-dinâmica
n	- posição do vetor

Letras gregas

α	- razão de volume ou variável auxiliar do Runge-Kutta
β	- constante qualquer ou variável auxiliar do Runge-Kutta
δ	- função delta de Dirac
Δt	- discretização do tempo em [s]
Δs	- discretização do comprimento do domínio lagrangiano em [m]
Δx	- discretização do comprimento do domínio na direção x em [m]
Δy	- discretização do comprimento do domínio na direção y em [m]
η	- normal unitária
Γ	- domínio lagrangiano
ι	- número imaginário, $\iota = \sqrt{-1}$
κ	- curvatura
μ	- viscosidade dinâmica do fluido em [Ns/m ²]
π	- plano de divergência nula, ou número real constante $\pi = 3,14159265359$
ρ	- massa específica do fluido em [kg/m ³]
ϕ	- função qualquer
Ω	- domínio euleriano
ω	- função filtro
σ	- tensão interfacial
τ	- tangente unitária

Letras latinas

A	- área
c	- constante
D	- núcleo de Dirac
\vec{f}	- campo de força euleriano em $[N/m^3]$
\vec{f}^c	- função coloração
\vec{F}	- campo de força lagrangiano em $[N/m^3]$
g	- campo de aceleração gravitacional
h	- espaçamento entre dois pontos de colocação eulerianos
H	- função “Heaviside”
I	- função indicadora
\vec{k}	- vetor número de onda em $[m^{-1}]$
L	- comprimento do domínio em $[m]$ ou norma do erro
N	- número total de pontos eulerianos
N_L	- número total de pontos lagrangianos
Np	- número de iterações
N_x	- número de pontos de colocação na direção x
N_y	- número de pontos de colocação na direção y
N_z	- número de pontos de colocação na direção z
p	- campo de pressão euleriano em $[N/m^2]$
P	- campo de pressão lagrangiano em $[N/m^2]$
q	- ordem de convergência numérica
r	- distância adimensionalizada entre um ponto lagrangiano até um ponto de colocação euleriano
s	- superfície lagrangiana
Re	- número de Reynolds
RHS	- variáveis que estão do lado direito de uma equação diferencial parcial
St	- número de Strouhal
t	- tempo em $[s]$
T	- campo de tensão de uma fibra elástica em $[Nm]$
\vec{u}	- velocidade euleriana em $[m/s]$
\vec{U}	- velocidade lagrangiana em $[m/s]$
\vec{x}	- vetor posição de um ponto euleriano $[m]$
\vec{X}	- vetor posição de um ponto lagrangiano $[m]$
W	- função peso utilizada nos processos de distribuição e interpolação

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	p. 1
1.1	Escoamentos bifásicos	p. 1
1.2	Metodologia IMERSPEC	p. 4
1.3	Organização do trabalho	p. 7
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	p. 9
2.1	Escoamentos bifásicos	p. 9
2.2	Método Espectral de Fourier	p. 16
3	MODELAGEM MATEMÁTICA	p. 20
3.1	Modelagem matemática diferencial	p. 20
3.2	Modelagem matemática para imposição da condição de contorno	p. 22
3.3	Modelagem matemática para representação da interface móvel	p. 24
3.3.1	Método front-tracking	p. 24
3.3.2	Método <i>Volume of Fluid</i>	p. 28
3.4	Resumo da modelagem matemática para escoamentos bifásicos	p. 30
3.5	Modelagem matemática para o método espectral de Fourier	p. 30
3.5.1	Transformadas de Fourier	p. 32
3.5.2	Propriedades da Transformada de Fourier	p. 32
3.5.3	Transformação das equações de Navier-Stokes para o espaço espec- tral de Fourier	p. 33
4	MÉTODO NUMÉRICO	p. 39
4.1	DFT e FFT	p. 39

4.2	Tratamento do termo não-linear	p. 41
4.3	Discretização temporal das equações de Navier-Stokes	p. 43
4.4	Processo de filtragem	p. 44
4.5	Estabilidade Numérica	p. 45
4.6	Método Front-Tracking (FT)	p. 46
4.6.1	Cálculo das propriedades físicas	p. 46
4.6.2	Discretização das equações pertencentes ao domínio lagrangiano . .	p. 47
4.6.3	Discretização da força lagrangiana	p. 48
4.6.4	Discretização do avanço da interface	p. 50
4.6.5	Resdistribuição dos pontos lagrangianos	p. 50
4.7	Método VOF	p. 52
4.7.1	Inicialização da Função Coloração	p. 52
4.7.2	Método VOF-PLIC	p. 54
4.7.3	Cálculo da força de interface	p. 57
4.7.4	Cálculo da curvatura	p. 58
4.8	Algoritmo da metodologia IMERSPEC	p. 59
4.8.1	Metodologia IMERSPEC - FT	p. 59
4.8.2	Metodologia IMERSPEC - VOF	p. 60
5	RESULTADOS	p. 62
5.1	Verificação do código computacional bidimensional IMERSPEC com varia- ção de propriedades físicas	p. 62
5.2	Testes de regularização da malha lagrangiana	p. 67
5.3	Verificação da inicialização da função coloração	p. 70
5.4	Verificação do cálculo da normal	p. 71
5.5	Teste de conservação de massa	p. 73
5.5.1	Disco de Zalesak	p. 73
5.5.2	Vortex-Flow	p. 75
5.6	Curvatura	p. 79
5.7	Correntes espúrias	p. 79

5.7.1	Metodologia IMERSPEC-FT	p. 81
5.7.2	Metodologia IMERSPEC-VOF	p. 83
5.8	Ascensão de bolhas	p. 87
5.8.1	IMERSPEC-FT	p. 88
5.8.2	Análise qualitativa e quantitativa para vários regime de movimenta- ção da bolha	p. 101
5.8.3	IMERSPEC-VOF: Regime cilíndrico	p. 116
5.9	Comparação entre metodologias para a bolha em regime cilíndrico: IMERSPEC- FT x IMERSPEC-VOF	p. 118
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	p. 122
6.1	Conclusões	p. 122
6.2	Trabalhos futuros	p. 125
	Referências Bibliográficas	p. 127
	Apêndice A – Informações numéricas complementares	p. 136
A.1	Condição de entrada e figuras complementares das simulações numéricas .	p. 136

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

1.1 Escoamentos bifásicos

No contexto da mecânica dos fluidos, escoamentos multifásicos podem ser definidos como escoamentos de fluidos com duas ou mais fases, com separação entre as fases a uma escala acima do nível molecular (YEOH; TU, 2010). Os escoamentos multifásicos tem um papel significativo em uma vasta área da geofísica e em processos industriais. Entre eles, destacam-se os reatores químicos, condensadores, evaporadores, leitos fluidizados, sistemas de refrigeração, destiladores, transporte de misturas de fluidos, extração de petróleo.

Na presente tese, restringem-se os estudos aos escoamentos bifásicos, que são aqueles que apresentam duas fases ou componentes escoando simultaneamente, em diversas formas: escoamento gás-sólido, líquido-sólido, gás-líquido, líquido-líquido e gás-gás.

Os escoamentos gás-sólido estão relacionados com o movimento de partículas sólidas suspensas na fase gasosa. Dependendo da quantidade de partículas, tais escoamentos podem ser caracterizados como sendo diluídos ou densos. Quando a quantidade de partículas é relativamente pequena, a influência do escoamento de gás tem efeito dominante, e quando a quantidade de partículas é alta, as interações partícula-partícula influenciam de forma significativa no movimento das fases.

Os escoamentos líquido-sólido consistem no transporte de partículas sólidas por um líquido. Também conhecidos como escoamentos líquido-partículas, eles podem ser caracte-

rizados como escoamentos dispersos, no qual a fase líquida representa a fase contínua. A grande preocupação existente neste tipo de escoamento é a sedimentação das partículas sólidas dentro da fase líquida, que é fortemente determinada pelo tamanho das partículas da fase dispersa e as condições de escoamento da fase contínua (YEOH; TU, 2010).

Os escoamentos gás-líquido, objeto de estudo da presente tese, podem assumir diversas configurações. Dois exemplos que podem ser classificados como escoamentos dispersos são: movimento de bolhas de gás através da fase líquida e movimento das gotículas líquidas em um gás. No primeiro exemplo o líquido é tomado como a fase contínua e as bolhas são a fase dispersa. No segundo exemplo, o gás é a fase contínua e as gotículas líquidas são consideradas a fase dispersa (YEOH; TU, 2010).

As bolhas e gotas se deformam livremente dentro da fase contínua e podem assumir diferentes formas como esférica, elíptica e calota esférica. Além dos escoamentos dispersos, os escoamentos bifásicos também apresentam outras estruturas interfaciais, chamados escoamentos separados, misturas e escoamentos transicionais. As várias configurações dos escoamentos gás-líquido em um tubo vertical são ilustradas na Fig. 1.1 (YEOH; TU, 2010).

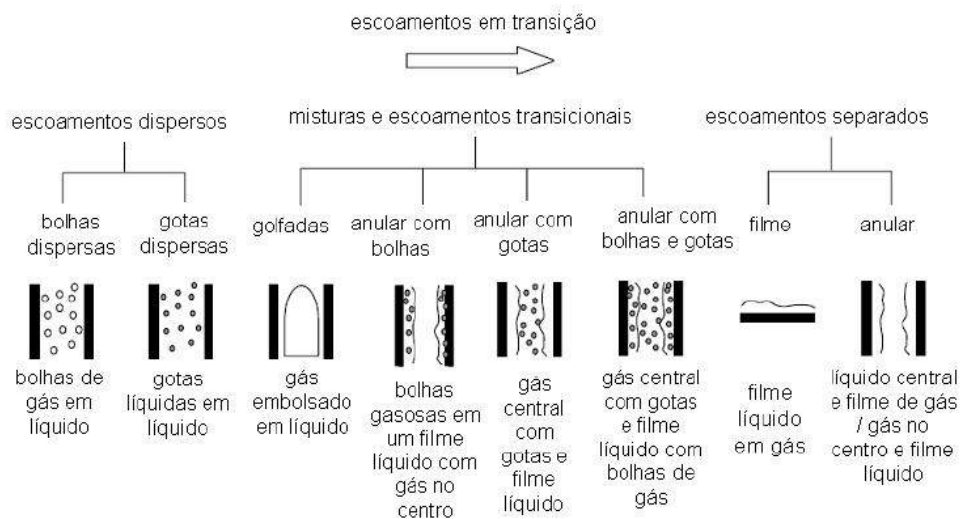


Figura 1.1: Classificação dos escoamentos gás-líquido em um tubo vertical. Adaptado de Yeoh and Tu (2010).

Bolhas e gotas são denominadas esféricas se a tensão interfacial ou forças viscosas são mais importantes que as forças inerciais. A Fig. 1.2 (a) ilustra uma bolha esférica. Bolhas em escoamentos com moderados números de Reynolds podem assumir tanto a configuração

elipsoidal, vide Fig. 1.2 (b), quanto a configuração calota-esférica, vide Figs. 1.2 (c) e (d). A forma de uma bolha em regime elipsoidal pode diferenciar consideravelmente de um elipsóide, apresentando uma assimetria em seu formato. Além disso, bolhas e gotas elipsoidais comumente submetem-se a dilatações periódicas, que caracterizam um caso complexo de regime de bolhas ou gotas, denominado regime *Wobbling*.

O termo calota-esférica advém do fato de grandes bolhas ou gotas apresentarem a geometria de uma calota, com bases lisas ou recortadas. Esta configuração também pode apresentar finas ondulações, as quais são referidas como “saías”, denominado do inglês regime *skirted*, vide Fig. 1.2 (d) (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978).

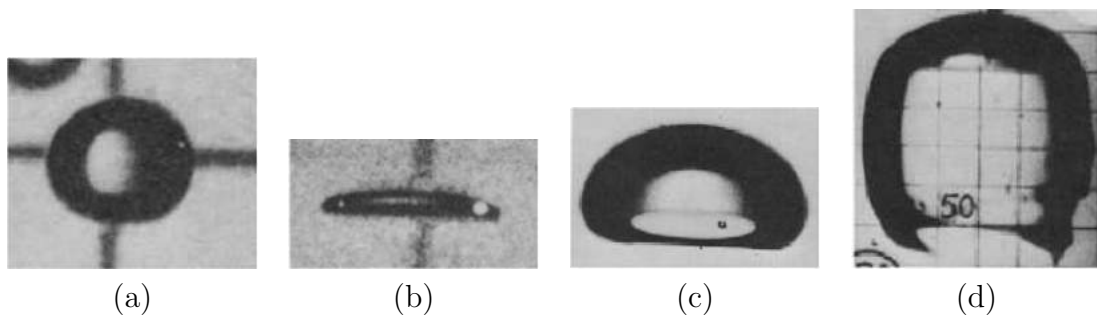


Figura 1.2: Escoamentos bifásicos apresentando as diferentes formas que as bolhas podem assumir (BHAGA; WEBER, 1981): (a) esférica; (b) elipsoidal; (c) calota-esférica e (d) *skirted*.

Todas essas diferentes configurações estimulam as pesquisas em escoamentos de bolhas, onde observa-se a necessidade de compreender a dinâmica da formação das bolhas para escoamentos em diferentes números de Reynolds. Ou seja, entender como uma bolha se movimenta no escoamento e como a fase contínua é afetada pela fase dispersa.

O entendimento da fluidodinâmica do movimento de uma bolha esférica tem experimentado progressos em três linhas de pesquisa. Primeiramente, importantes contribuições analíticas, baseadas na teoria de escoamentos invíscitos, para o cálculo da taxa local de cisalhamento e taxa de rotação, assim como para valores associados ao coeficiente de arrasto em muitas situações assintóticas (MAGNAUDET; EAMES, 2000). A segunda importante contribuição é o aperfeiçoamento das técnicas experimentais, o que torna possível controlar o grau de contaminação dos líquidos usados nos experimentos. Além disso, as câmeras foto-

gráficas e filmadoras de alta velocidade, técnicas de processamento de imagens e o avanço da tecnologia digital tornaram-se poderosas ferramentas para acompanhamento do movimento de uma bolha, assim como a análise de sua forma geométrica. Estes desenvolvimentos tem permitido rejeitar ou confirmar hipóteses e teses, e, comparar com resultados teóricos, sendo útil para checá-los com convicção.

Finalmente, o desenvolvimento de modernos computadores e ferramentas numéricas tem permitido a simulação numérica de casos complexos da dinâmica de escoamentos bifásicos, o que tornou a experimentação numérica uma ferramenta para o entendimento da física de problemas complexos.

Para simular numericamente escoamentos bifásicos são necessários métodos numéricos que permitam atingir alta acurácia ¹ a fim de aproximar os resultados numéricos dos detalhes físicos inerentes ao escoamento.

Para atingir alta acurácia podem ser utilizadas metodologias de baixa ordem de convergência aliada com um grande refinamento de malha, o que eleva, consideravelmente, o custo computacional ². Outra forma é utilizar métodos de alta ordem que possuem alta taxa de convergência ³ numérica, as quais demandam elevado custo computacional devido ao tamanho de estêncil de discretização. Dessa maneira, busca-se métodos que tenham acurácia e eficiência computacional. Diante disso, na presente tese propõe-se a extensão da metodologia IMERSPEC ((MARIANO, 2011)) para resolver problemas de escoamentos bifásicos.

1.2 Metodologia IMERSPEC

A metodologia IMERSPEC é a fusão do método pseudoespectral de Fourier com o método da fronteira-imersa. Esta metodologia foi desenvolvida no Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia (MFLab) por Mariano (2007) e validada para resolver problemas bidimensionais de escoamentos com propriedades físicas constantes, incompressíveis e isotérmicos, vide Fig. 1.3 (a). Moreira (2011) estendeu a metodologia para

¹O termo acurácia é usado na presente tese de doutorado como a diferença entre a solução numérica e a solução real.

²Custo computacional são relativos ao tempo de processamento do CPU e a quantidade de memória RAM utilizadas.

³Taxa de convergência é quão rápido os erros entre a solução real e a numérica decrescem com o refinamento da malha.

modelos tridimensionais e aplicou à problemas de escoamentos de jatos em desenvolvimento espacial turbulento, vide Fig. 1.3 (b). Kinoshita (2015) ampliou a aplicação da metodologia IMERSPEC em problemas bidimensionais com efeitos térmicos, propondo novas formulações para a imposição de condições de contorno de primeira espécie (Dirichlet), segunda espécie (Neumann) e terceira espécie (Robin). Sendo assim, o objetivo da presente tese de doutorado é a extensão da metodologia IMERSPEC para a simulação numérica de escoamentos bifásicos dispersos, incompressíveis, isotérmicos, com variações de propriedades físicas e com a presença de uma interface fina, móvel e deformável.

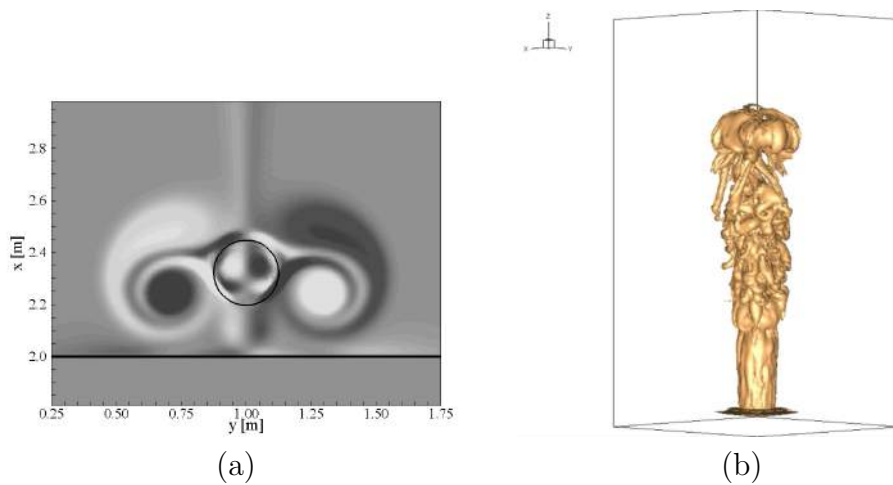


Figura 1.3: Simulações numéricas utilizando a metodologia IMERSPEC: (a) queda de uma partícula em um domínio bidimensional e não-periódico (MARIANO, 2011); (b) escoamento de um jato em desenvolvimento espacial tridimensional (MOREIRA, 2011).

Para a discretização do modelo matemático da fase contínua utilizou-se o método pseudo-espectral de Fourier. Este método tem como característica a alta taxa de convergência numérica e possui alta acurácia aliada com um baixo custo computacional quando comparado com outras metodologias de alta taxa de convergência, devido ao uso do algoritmo Transformada Rápida de Fourier (FFT *Fast Fourier Transform*). Além disso, a utilização do método da projeção espectral que tem por objetivo a simplificação do acoplamento pressão-velocidade de escoamentos incompressíveis nas equações de Navier-Stokes, eliminando o gradiente de pressão. Dessa forma substitui-se um algoritmo de solução do sistema linear por um produto vetor-matriz (CANUTO et al., 2007).

Como limitações de utilização do método pseudo-espectral de Fourier podem-se citar:

condições de contorno não-periódicas e o fenômeno de Gibbs (CANUTO et al., 2007). A dificuldade de aplicação do método em problemas com condições de contorno não-periódicas foi superada com o trabalho de Mariano (2007) que acoplou o método pseudoespectral de Fourier ao método da fronteira-imersa, surgindo a metodologia IMERSPEC. O fenômeno de Gibbs se relaciona ao comportamento oscilatório, característico da série de Fourier truncada ou da série de Fourier discreta de uma função descontínua, e para suavizar tais oscilações são utilizados filtros numéricos (CANUTO et al., 2006).

Para a representação da interface móvel e deformável é necessária a implementação de modelos apropriados. Duas classes de métodos podem ser listadas: método euleriano e método lagrangiano. Um exemplo de ambas as classes citadas são *Volume of Fluid Method* (VOF) e *Front-tracking method* (FT), respectivamente. O método VOF define a superfície através de uma fração de volume de cada material ocupado por cada célula computacional, onde esta fração varia de 1 (corresponde às células cheias) a 0 (corresponde às células vazias) e a interface é definida nas células com frações de volumes, vide Fig. 1.4 (a). A fração de volume é atualizada de acordo com as equações apropriadas de advecção. Assim a cada passo de tempo a posição da interface é construída a partir da transferência de volume de uma célula para outra. Quando há colisão, frações de volumes são adicionadas e a interseção das interfaces é contabilizada durante a reconstrução (HYMAN, 1984).

O método *Front-tracking* constrói a interface a partir de uma malha não-estruturada, a qual se move sob uma malha estacionária (UNVERDI; TRYGGVASON, 1992). Generalizando, este método se baseia em resolver a dinâmica do escoamento em uma malha fixa e estacionária, domínio euleriano, e o domínio lagrangiano é dado por um conjunto de pontos, os quais são partículas livres, que, logicamente conectadas, referem-se à interface, a qual é móvel e deformável, vide Fig. 1.4(b). Estas partículas contêm informações geométricas sobre esta interface, como volume, área, curvatura e os vetores normal e tangente e o seu acompanhamento é feito de maneira lagrangiana (STENE, 2010).

Retomando, o objetivo da presente tese de doutorado é a extensão da metodologia IMERSPEC a problemas de ascensão de bolhas em regime disperso. Para isso, é necessária a implementação de modelos de representação de interface. Na presente tese, os métodos FT e VOF foram escolhidos para serem acoplados à metodologia IMERSPEC. Resultados

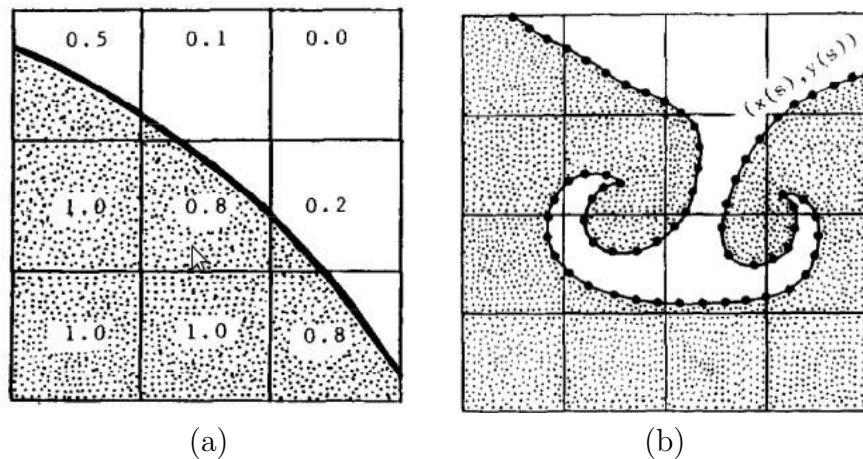


Figura 1.4: Métodos para representação da interface móvel e deformável (HYMAN, 1984): (a) Método VOF; (b) Método FT.

de comparação de ambos os métodos são apresentados. Após a verificação do código, foi realizado a sua validação através da simulação de ascensão de bolhas. Assim, objetivou-se: contribuir com o desenvolvimento de uma nova metodologia matemática e computacional, buscando-se, ao mesmo tempo, eficiência computacional, acurácia, estabilidade numérica e facilidade de implementação e paralelização.

1.3 Organização do trabalho

A presente tese está dividida em seis capítulos, sendo que no Capítulo 1 apresentam-se as motivações que levaram ao desenvolvimento do presente trabalho. No Capítulo 2 é apresentado um levantamento bibliográfico referente aos temas relevantes para o desenvolvimento da presente tese. No capítulo 3 tem-se a modelagem matemática referente ao problema de estudo e do método VOF, FT e espectral de Fourier. Os métodos numéricos são descritos no Capítulo 4, assim como as discretizações das equações utilizadas na solução numérica das equações. No Capítulo 5 encontram-se os resultados obtidos. Inicia-se este capítulo com a verificação do código IMERSPEC para variações de propriedades físicas. Em seguida, apresentam-se as verificações das implementações realizadas referentes aos métodos de representação da interface: FT e VOF. São apresentadas, também, as validações de ambos métodos comparados com o diagrama de Clift, Grace and Weber (1978) para escoamentos

bifásicos considerando uma única bolha. Por fim, no Capítulo 6 apresentam-se as conclusões e perspectivas de continuação da pesquisa.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo é apresentada a revisão bibliográfica do estado da arte dos escoamentos bifásicos e dos métodos para representação da interface: *Front-Tracking* e *Volume-of-fluid*. Na sequência é feita uma revisão sobre os métodos espectrais.

2.1 Escoamentos bifásicos

Bolhas subindo sob a influência da força gravitacional combinada à força de empuxo é um dos fenômenos mais comuns de escoamentos bifásicos gás-líquido. Compreender a interação dinâmica entre as fases é importante para aplicações industriais, tais como coluna de reatores gás-líquido (BOWER-AMAYA; LEE, 2010).

Os estudos experimentais de ascensão de bolhas de gases em um fluido estático se iniciaram na década de 50, com os trabalhos de Datta, Napier and Newitt (1950), Peebles and Garber (1953), Davidson and Schüller (1960), Ramakrishnan, Kumar and Kuloor (1969) e Khurana and Kumar (1969). Uma revisão conhecida sobre o movimento das bolhas e gotas em um escoamento uniforme e estável é dada por Harper (1972). Alguns anos depois, o trabalho de Clift, Grace and Weber (1978) objetivou unificar o tratamento da movimentação de partículas sólidas, gotas líquidas e bolhas gasosas em suas respectivas fases contínuas. Referente à ascensão de bolhas em um líquido, Clift, Grace and Weber (1978) contribuíram com dados experimentais, os quais contem a forma geométrica de bolhas em escoamentos em regime permanente. Mais tarde, um estudo abrangente foi apresentado por Bhaga and

Weber (1981), introduzindo dados experimentais e correlações entre a velocidade de subida da bolha e a sua forma geométrica.

A ascensão de bolhas em um fluido viscoso sobre a influência das forças gravitacional e de empuxo podem ser agrupadas em três diferentes regimes: esférica, elipsoidal e calota-esférica (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978; BOWER-AMAYA; LEE, 2010).

- Regime esférico é dominado pela tensão interfacial e forças viscosa. O tamanho original da bolha é pequeno e, normalmente, menor que $1,3 \text{ mm}$. A forma da bolha permanece esférica, ou próxima de esférica. Para este último caso, a bolha aproxima da forma elipsoidal, onde a proporção do raio menor para o raio maior é menor que 10%. Neste regime, a velocidade terminal é proporcional ao tamanho da bolha (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978).
- Regime elipsoidal é dominado pela tensão interfacial. O tamanho da bolha é intermediário, tipicamente de $1,3$ até $6,0 \text{ mm}$. A forma geométrica final da bolha é usualmente achatada nos polos e, geralmente não há simetria. Frequentemente, bolhas e gotas elipsoidais são submetidas a dilatações periódicas ou a movimentos oscilatórios randômicos (*wobbling*), os quais tornam a caracterização de sua geometria particularmente difícil.
- Regime calota esférica são governados pela força de inércia. O tamanho da bolha para este regime é grande, maiores que $6,0 \text{ mm}$. Neste regime, a velocidade terminal da bolha é proporcional ao seu tamanho. Esta configuração pode apresentar finas ondulações, as quais são referidas como “saías”, denominado regime *skirted*.

Estudos de escoamentos de bolhas tem sido realizados utilizando-se vários métodos numéricos (TRYGGVASON et al., 2006). O mais antigo e popular método para simular os escoamentos multifásicos são os métodos de captura da interface (*Front-capturing method*), onde os mais conhecidos são *marker-and-cell* (MAC) e *Volume of Fluid* (VOF). O método MAC caracteriza-se por um marcador de partículas usado para identificar cada fluido e o transporte deste método é feito de maneira lagrangiana (TRYGGVASON et al., 2001). Um esquema de reconstrução da interface mais acurado pode ser feito usando a densidade de partículas contidas nas células circundantes, porém para evitar difusão da interface é necessário ter um número moderado de marcadores (HYMAN, 1984).

O método VOF define a superfície através de uma fração de volume de cada material ocupado por cada célula computacional, onde esta fração varia de 1 (correspondente a célula cheia) a 0 (correspondente a célula vazia) e a interface varia entre valores de 0 a 1 (Fig. 1.4 (a)). A fração de volume é atualizada de acordo com as equações apropriadas de advecção. Assim, a cada passo de tempo a posição da interface é construída a partir da transferência de volume de uma célula para outra. Quando há colisão, frações de volumes são adicionadas e a interseção das interfaces são contabilizadas durante a reconstrução e este procedimento é realizado a cada passo no tempo (HYMAN, 1984).

Além dos métodos citados anteriormente, pertencentes a classe de captura da interface, tem-se também o *constrained interpolation profile* (CIP) desenvolvido por Yabe, Xiao and Utsumi (2001), o método campo de fase de Jacqmin (1999) dentre outros.

Uma outra classe de método é o método Lagrangiano, o qual resolve as equações para o fluido em um domínio denominado euleriano. Para representar a interface utiliza-se um domínio Lagrangiano (PIVELLO, 2012). Como exemplo desta classe de método, temos o método *Front-tracking*, onde a interface é construída a partir de uma malha não-estruturada, a qual move-se sob uma malha estacionária (BRERETON; KOROTNEY, 1991). Generalizando, este método se baseia em resolver a dinâmica do escoamento em uma malha fixa e estacionária, domínio euleriano. E o domínio lagrangiano é dado por um conjunto de pontos, os quais são partículas livres, que logicamente conectadas, referem-se à interface, a qual é móvel e deformável. Estas partículas contêm informações geométricas da interface como volume, área, curvatura e os vetores normal e tangente e o acompanhamento desta interface é feito de maneira lagrangiana (STENE, 2010).

Método Front-tracking

O método *Front-tracking* foi introduzido por Richtmyer and Morton em 1960 e a primeira implementação foi realizada por Glimm e outros pesquisadores em 1980 (STENE, 2010). Desde então, vários estudos tem sido feitos para evolução do método. Atualmente, diversas técnicas do método *Front-tracking* tem sido desenvolvidas.

Peskin (1972) iniciou o desenvolvimento de uma nova técnica do método *Front-tracking*, denominada método da fronteira imersa, para simular escoamentos em válvulas cardíacas, onde o escoamento é resolvido em uma malha cartesiana e as válvulas cardíacas são repre-

sentadas por um conjunto de partículas que possuem um campo de força virtual, porém, o autor limitou-se a escoamentos incompressíveis e monofásicos. Além deste trabalho pioneiro, tal autor possui outras publicações, com aprimoramento do método, como Peskin (1977), Peskin (2002).

Seguindo a mesma ideia proposta por Peskin (1972), em que a interface é representada por um conjunto de partículas que possuem uma força virtual, Unverdi and Tryggvason (1992) desenvolveram uma nova abordagem do método *Front-tracking* (STENE, 2010). Porém, diferentemente de Peskin, Tryggvason e coautores aplicaram este método a simulações bidimensionais e tridimensionais a problemas multifásicos (ESMAEELI; TRYGGVASON, 1999; TRYGGVASON et al., 2001; BUNNER; TRYGGVASON, 2002; ESMAEELI; TRYGGVASON, 2005; TRYGGVASON et al., 2006; MURADOGLU; TRYGGVASON, 2008).

O método *Front-tracking*, desenvolvido por Unverdi and Tryggvason (1992), pode ser compreendido como um método híbrido *Front-tracking/ Front-capturing*, pois existe uma malha estacionária regular para solução do movimento dos fluidos e uma malha não-estruturada para representar a interface que se move sobre a malha estacionária. Contudo, ao contrário do método *Front-tracking*, onde cada fase é tratada separadamente, aqui todas as fases são tratadas juntas por um conjunto de equações que descrevem o movimento do fluido, característica do método *Front-capturing*. Além disso, este método híbrido caracteriza-se pela presença de uma função indicadora que permite atualizar as propriedades do fluido a medida que a interface se desloca.

Esmaeeli and Tryggvason (1996) simulam, em um domínio bidimensional com condição de contorno periódica e centenas de bolhas, mostrando as interações entre elas. Esmaeeli and Tryggvason (1998), Esmaeeli and Tryggvason (1999) simularam, em domínios bidimensional e tridimensional com condições de contorno periódicas, o movimento de várias bolhas para baixos e moderados números de Reynolds.

Em Bunner and Tryggvason (2003) encontra-se a simulação numérica direta tridimensional de 27 bolhas deformando em um domínio com condições de contorno periódicas. As bolhas possuíam a forma geométrica elipsoidal e foram observaram resultados interessantes de interações entre elas. Os resultados das bolhas elipsoidais são comparados com os resultados das bolhas esféricas, que se mantiveram uniformemente distribuídas, enquanto as

elipsoidais se comportaram da mesma forma por algum tempo, porém posteriormente elas se acumularam em linhas verticais. Outro estudo em que se examinam os efeitos de deformações das bolhas é no trabalho de Tryggvason et al. (2006) que discorrem sobre resultados a altos números de Reynolds, onde se observa o regime *wobbling* (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978).

Além desses trabalhos, Taeibi-Rahni, Loth and Tryggvason (1994) simularam escoamentos de camada de cisalhamento livre com bolhas utilizando o método de diferenças finitas acoplado com o método *Front-tracking/ Front-capturing*, e, Esmaeeli and Tryggvason (1996), com o mesmo método, simularam a solidificação dendrítica de substância pura.

Villar (2007) utilizou o método *Front-tracking* acoplado com o método das diferenças centradas com malhas de bloco estruturada refinadas localmente, que se adaptam dinamicamente para recobrir as regiões de interesse do escoamento. Esta metodologia, denominada AMR2D, foi aplicada para solução de problemas bidimensionais de ascensão de bolhas. Resultados de instabilidades de Rayleigh-Taylor, bolhas em ascensão e de queda de gotas utilizando esta metodologia encontram-se em Ceniceros et al. (2010).

Miranda (2010) utilizou a metodologia AMR2D para estudar o efeito de surfactantes insolúveis em escoamentos interfaciais. Pivello et al. (2014) estendeu a metodologia proposta por Villar (2007) para terceira dimensão e aplicou a problemas de ascensão de bolhas com alta e variadas razões de propriedades físicas em vários regimes, incluindo o regime *wobbling* e comparou com o experimento de Bhaga and Weber (1981) e com as simulações numéricas de Hua and Lou (2007) demonstrando a eficiência da metodologia proposta.

Villela (2011) iniciou os estudos do acoplamento do método pseudoespectral de Fourier com o método *Front-tracking* com o intuito de resolver problemas de escoamentos bifásicos. Neste contexto, com o intuito de continuar os estudos iniciados por esse autor encontra-se o presente trabalho.

Método Volume of fluid

O método VOF (*Volume of fluid method*) (HIRT; NICHOLS, 1981; YOUNGS, 1982; RUDMAN, 1997; RIDER; KOTHE, 1998; SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999) utiliza a função coloração $f_c(x, y, t)$ para indicar a quantidade fracional de fluido presente em uma determi-

nada posição (x, y) no tempo t . O avanço de f_c é dado pela Eq. 2.1:

$$\frac{\partial f_c}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla f_c) = 0. \quad (2.1)$$

Esta equação da advecção da função coloração é resolvida, usualmente, utilizando esquemas específicos de advecção, como advecção geométrica, técnica pseudo-Lagrangiana, com o intuito de minimizar difusões numéricas. Além disso, dados geométricos da interface precisam ser avaliados para o cálculo da força de interface e são obtidos através do gradiente da função coloração. De modo geral, duas importantes classes do método VOF podem ser distinguidas para a representação da interface: *simple line interface calculation* (SLIC) e *piecewise linear interface calculation* (PLIC).

Trabalhos mais antigos, geralmente, utilizam o algoritmo SLIC e *donnor-acceptor* como observado nos trabalhos de Noh and Woodward (1976) e Hirt and Nichols (1981). As ideias das técnicas mais modernas de VOF-PLIC são iniciadas por Youngs (1982). A acurácia e capacidade dos algoritmos VOF-PLIC excede em muito os algoritmos proposto antigamente (RUDMAN, 1997). Uma das grandes vantagens do método VOF é não precisar redistribuir os pontos da interface quando esta sofre estiramentos devido ao escoamento, e, além disso, não necessita de modelo para representar a coalescência e fragmentação das interfaces imersas.

As principais dificuldades destes métodos são calcular a tensão superficial, o que inclui o cálculo da curvatura da interface, e realizar a manutenção da interface entre os diferentes fluidos. Recentes desenvolvimentos incluem técnicas para calcular a tensão superficial (BRACKBILL; KOTHE; ZEMACH, 1992). Para melhorar a acurácia da interface tem-se o método *surface marker and micro cell* desenvolvido por Chen et al. (1997), que faz uso de subcélulas e, além disso, o uso da função *level set* para capturar a interface implicitamente (SUSSMAN et al., 1999).

Gueyffier et al. (1999) utilizou o método VOF-PLIC para advecção da interface e, para resolver as equações para o fluido, foi utilizado o método dos volumes finitos em uma malha cúbica regular. Resultados da formação de gotas e ascensão de bolhas foram apresentados. Renardy and Renardy (2002) utilizou o método VOF-PLIC, porém propôs um algoritmo eficiente para o cálculo da tensão superficial na eliminação das correntes espúrias denominado PROST (*Parabolic Reconstruction of Surface Tension*). Comparou-se com outros métodos,

como CSF (*continuum surface force*), e demonstrou melhores resultados.

Sussman (2003) utilizou a fusão dos métodos *level-set* e VOF, denominando esta metodologia CLSVOF, a qual validou-a em problemas de ascensão de bolhas e, por fim no problema do colapso de bolhas de vapor. Tal metodologia apresentou segunda ordem de convergência. Outras metodologias foram sendo proposta para a utilização do método VOF. Pilliod Jr. and Puckett (2004) também apresentaram um novo algoritmo de reconstrução da interface de segunda ordem de convergência.

Devido à dificuldade de calcular a curvatura diretamente da função VOF decorrente das instabilidades numéricas, na literatura, de modo geral, utiliza-se funções suaves no cálculo desta variável (CUMMINS; FRANCOIS; KOTHE, 2004). Cummins, Francois and Kothe (2004) realizaram comparação entre os métodos para o cálculo da curvatura demonstrando segunda ordem de convergência para os métodos da função altura e *exact distance function* (DF).

Sint Annaland, Deen and Kuipers (2005) fizeram uso do método VOF-PLIC e do modelo, para o cálculo da força de interface, CSF desenvolvido por Brackbill, Kothe and Zemach (1992). Além disso, aplicou esta metodologia a problemas tridimensionais de ascensão de bolhas com altas razões de propriedades físicas. Francois et al. (2009) utilizaram a mesma combinação de métodos que Sint Annaland, Deen and Kuipers (2005) e, além disso, propuseram um novo algoritmo de balanço de força para redução das correntes espúrias. Para validação deste novo algoritmo utilizaram o teste da bolha estática em um domínio bidimensional e tridimensional.

Com a finalidade de descrever as vantagens, desvantagens e limitações dos modelos propostos para a representação e advecção da interface através do método VOF, Gopala and Wachem (2008) contribuíram comparando quatro modelos para o método VOF: *flux-corrected transport* (FCT) (BORIS; BOOK, 1973), *Lagrangian piecewise linear interface construction* (L-PLIC) (WACHEN; SHOUTEN, 2002), *Compressive interface capturing scheme for arbitrary meshes* (CICSAM) (UBBINK, 1997) e *inter-gamma scheme* (JASAK; WELLER, 2002). Para avaliar a advecção, testes como *shearing-flow* e disco de Zalesak (ZALESAK, 1979) foram realizados. Por fim, resultados para instabilidades de Rayleigh-Taylor foram apresentados.

Outros autores contribuíram com novos métodos para VOF tais como Aulisa et al. (2007), o qual reconstrói a interface com o método dos mínimos quadrados. Popinet (2009) combinou o método VOF com malha refinada localmente para solução de problemas bifásicos. Por fim, Denner et al. (2014) comparou o método VOF-PLIC com o cálculo da função altura para a curvatura com os métodos VOF-CELESTE (*curvature evaluation with least-squares fit of Taylor expansion*) e MCLS (*mass-conserving level-set method*). Para isso, testes como correntes espúrias e ascensão de bolhas foram realizados para mostrar vantagens e desvantagens de cada método. Lisita (2015) aplicou o método VOF combinado com refinamento de malha adaptativa estruturada na aplicação de problemas de contato triplo, fluido-fluido-sólido.

Neste contexto, no presente trabalho acoplou-se a metodologia IMERSPEC ao método VOF-PLIC, na busca de métodos com alta acurácia na solução de problemas bifásicos.

2.2 Método Espectral de Fourier

Define-se que metodologia de alta ordem possui ordem de convergência numérica maior ou igual a dois (FERZIGER; PERIĆ, 1996). Os métodos de alta ordem costumam ter elevado custo computacional quando comparados com métodos de baixa ordem, porém atingem uma maior acurácia com o mesmo refinamento de malha. São muito utilizados em problemas de aeroacústica, simulação numérica direta (DNS) e simulação de grandes escalas (LES) (UZUN, 2003).

Dentre as metodologias de alta ordem, as principais são diferenças finitas e volumes finitos de alta ordem, nas quais as derivadas são discretizadas com longos estênceis; diferenças finitas, volumes finitos compactos (NAGARAJAN; LELE; FERZIGER, 2003) e métodos espectrais (BOYD, 2000; CANUTO et al., 2006; TREFETHEN, 2001). Além disso, existem os métodos híbridos, os quais utilizam os métodos espectrais para calcular as derivadas em direções onde se tem condições de contorno periódicas e métodos de alta ordem nas direções não-periódicas (DA SILVA, 2001).

Os métodos espectrais são caracterizados pela expansão da solução em termos de séries truncadas de funções de aproximação globais das variáveis independentes (BOYD, 2000). Como exemplo tem-se as séries de Fourier (GOTTLIEB; ORSZAG, 1977), séries de

polinômios de Legendre e séries de polinômios de Chebyshev (BOTELLA, 1997).

A utilização dos métodos espectrais na dinâmica dos fluidos computacional surgiu em meados de 1970 com o desenvolvimento dos métodos transformados, o qual realizam transformações entre os espaços físicos e espaços espectrais, com os trabalhos de Gottlieb and Orszag (1977) e Orszag (1980).

Morchoisne (1982) desenvolveu um método utilizando o método espectral para estudar escoamentos incompressíveis em geometrias bidimensionais e tridimensionais simples. Patera (1984) desenvolveu o método dos elementos espectrais e o testou com polinômios de Chebyshev para equações de advecção-difusão unidimensionais. Aplicou-o na simulação de escoamentos laminares bidimensionais sobre um canal com degrau.

Outros autores contribuíram na utilização dos métodos espectrais aplicados a CFD, tais como Deville and Mund (1985), que usaram pré-condicionamento baseado no método dos elementos finitos para resolver equações diferenciais parciais elípticas de segunda ordem de convergência pela técnica pseudoespectral de Chebyshev. Henderson and Karniadakis (1995) apresentaram um método dos elementos espectrais Legendre-Fourier para estudar escoamentos turbulentos incompressíveis em geometrias complexas.

O método espectral de Fourier, especificamente, o qual tem como expansão as séries de Fourier, utiliza as transformadas de Fourier e suas propriedades no intuito de algebrizar as equações diferenciais parciais (DE FIGUEIREDO, 2000). Com base nisso e no uso do algoritmo *Fast Fourier Transform* (FFT), desenvolvido por Cooley and Tukey (1965), calcula-se de forma eficiente, ou seja, com baixo custo computacional, a transformada de Fourier. Além disso, este método apresenta alta acurácia e alta convergência numérica (TREFETHEN, 2001; BOYD, 2000).

Silveira Neto (2002) e Pope (2000) utilizaram os métodos espectrais de Fourier para solução das equações de Navier-Stokes aplicados a problemas monofásicos. Para desacoplar a pressão da velocidade, os autores propõem o método da projeção, eliminando a necessidade de se resolver a equação de Poisson para a pressão. Esse procedimento equivale a substituir a solução de um sistema linear por um produto vetor-matriz que, em termos numéricos, tem um custo computacional mais baixo. Em termos físicos, ambos têm a mesma função, que é de garantir que os campos de velocidades satisfaçam a equação da continuidade.

Esta metodologia, no entanto, em presença de descontinuidades, é influenciada pelo fenômeno de Gibbs (CANUTO et al., 1987) que é caracterizado pelo aparecimento de oscilações nas soluções numéricas (CANUTO et al., 2007), e, para contornar as limitações dadas por ele, Kopriva (1986) apud Canuto et al. (2006) e Navarra, Stern and Miyakoda (1994) propuseram a utilização do processo de filtragem. Ambos os autores estudaram a influência dos filtros na convergência numérica da solução e concluíram que há um aumento significativo na ordem de convergência com este procedimento. Porém, o uso do filtro faz com que a acurácia do método espectral de Fourier diminua.

Uma outra limitação do método espectral de Fourier está nas condições de contorno (CANUTO et al., 2007), as quais devem ser periódicas para que o método possa ser aplicado. Afim de estender a metodologia espectral de Fourier a problemas com condições de contorno não-periódicas, Mariano (2007) propôs acoplar, ao método espectral de Fourier, o método da fronteira imersa (DE LIMA E SILVA; SILVEIRA NETO; DAMASCENO, 2003). Para validar esta nova metodologia, a qual denomina-se IMERSPEC, o autor aplicou a problemas como cavidade com tampa deslizante e escoamentos sobre um prisma quadrado (MARIANO et al., 2010). Moreira (2010) utiliza esta metodologia aplicada a escoamentos cisalhantes livres tridimensionais não periódicos na direção axial.

Em problemas de escoamentos bifásicos, os quais possuem altas descontinuidades, há poucas aplicações do método espectral de Fourier a este tipo de problema. Porém, alguns autores como Liu and Shen (2003) usam o modelo de campo de fase para resolver problemas de mistura de dois fluidos incompressíveis, e, para aproximação numérica deste modelo o autor utiliza o método espectral de Fourier semi-discreto com condições de contorno periódicas.

Feng et al. (2006), diante da busca de algoritmos numéricos para simulação em grande escala de microestruturas tridimensionais, apresentam progresso ao utilizar malha adaptativa móvel no espaço físico para representar as microestruturas e, ao mesmo tempo, uma malha fixa uniforme para a utilização do método espectral de Fourier semi-implícito. Esta abordagem não só proporciona um tratamento mais acurado nas interfaces, as quais exigem maior resolução, mas também retém a eficiência numérica do método espectral de Fourier semi-implícito.

Shen and Wang (2009) desenvolveram um método de malha móvel espectral para o

modelo campo de fase para escoamentos bifásicos com condições de contorno não-periódicas. O método espectral utilizado foi o de Fourier semi-implícito. Os resultados numéricos apresentados demonstram a acurácia e eficiência computacional do método de malha móvel espectral.

Ansari and Ghiasi (2011) utilizaram o método pseudoespectral de Fourier e o método dos volumes finitos para a solução de escoamentos bifásicos. Uma análise comparativa entre os métodos foi feita, o que mostrou que o erro numérico e tempo de CPU do método pseudoespectral de Fourier diminui em relação ao método dos volumes finitos.

CAPÍTULO III

MODELAGEM MATEMÁTICA

Neste capítulo apresenta-se a formulação matemática para escoamentos incompressíveis, isotérmicos e com a presença de dois fluidos newtonianos imiscíveis com propriedades físicas distintas. Esta formulação é fundamentada na mecânica do contínuo, onde o modelo matemático é expresso pelas equações do balanço de massa e da quantidade de movimento linear. Primeiramente, apresenta-se a modelagem diferencial para problemas de escoamentos bifásicos. Após isso, a representação do domínio utilizada na metodologia IMERSPEC para condições de contorno não-periódicas (MARIANO, 2007). Em seguida, procede-se com a modelagem matemática dos métodos utilizados para a representação de uma interface móvel e deformável. Por fim, será apresentada a modelagem matemática no espaço espectral de Fourier.

3.1 Modelagem matemática diferencial

A modelagem matemática diferencial é apresentada na forma indicial, como descrito por White (1991), para escoamentos compressíveis, isotérmicos e com propriedades físicas variáveis, Eqs. (3.1) e (3.2):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_l)}{\partial x_l} = 0, \quad (3.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_l}{\partial t} + \frac{\partial u_l u_k}{\partial x_k} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_l} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right] + \rho g_l + f_l^{MFI} + f_l^{FM}, \quad (3.2)$$

onde ρ e μ são, respectivamente, a massa específica e o coeficiente de viscosidade dinâmica dos fluidos; u_l é a componente l do vetor velocidade; p é o campo de pressão; f_l^{MFI} é a componente l do vetor campo de força externa que atua sobre uma partícula de fluido para imposição da condição de contorno não-periódica; f_l^{FM} é a componente l do vetor campo de força externa que atua sobre uma partícula de fluido para representação da interface móvel e deformável; g_l é a componente l do vetor aceleração gravitacional e x_l , com $l = 1, 2$, para problemas bidimensionais, são as coordenadas espaciais e t é o tempo.

Uma hipótese simplificadora ocorre na modelagem matemática proposta nas Eqs. 3.1 e 3.2 ao resolver problemas de escoamentos bifásicos. As propriedades físicas ρ e μ são consideradas constantes em cada fase, sofrendo variações apenas sobre a interface. Para que isso seja possível, admite-se que a massa específica e a viscosidade permanecem constantes sobre uma linha de corrente, vide Fig. 3.1. Dessa maneira, como o escoamento é incompressível, tem-se:

$$\frac{\partial u_l}{\partial x_l} = 0, \quad (3.3)$$

e para que seja verdadeira a Eq. (3.1), tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_l \frac{\partial \rho}{\partial x_l} = 0. \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} + u_l \frac{\partial \mu}{\partial x_l} = 0. \quad (3.5)$$

Essa consideração não é válida apenas sobre a interface, pois as linhas de corrente que cruzam esta região experimentam variação da massa específica e viscosidade. Assim, nessa região a interface acaba se difundindo e se estendendo por alguns volumes discretos com espessura da ordem de discretização da malha, Δx , fazendo com que a continuidade não seja garantida na interface. Como observado por Villar (2007), esta variação de massa é da ordem da espessura da interface estendida.

Além disso, ao utilizar condição de contorno periódica, exigência do método espectral de Fourier discreto, deve-se decompor o gradiente de pressão das equações de Navie-Stokes em fluido-estática ($\vec{\nabla} p_{fe}$) e fluido-dinâmica ($\vec{\nabla} p_{fd}$). Unverdi and Tryggvason (1992) definem

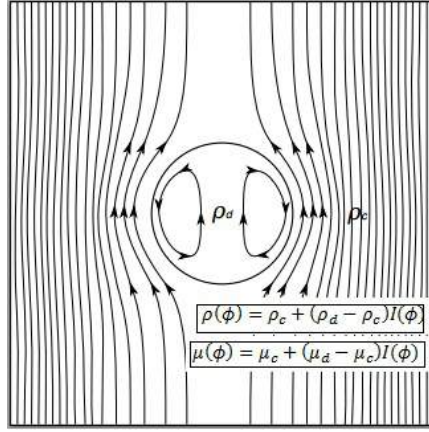


Figura 3.1: Linhas de corrente ao redor de uma interface circular, onde $\rho(\phi)$ e $\mu(\phi)$ são a massa específica e viscosidade variáveis, respectivamente, na interface estendida. ρ_c e μ_c são a massa específica e a viscosidade da fase contínua, ρ_d e μ_d é a massa específica e viscosidade da fase dispersa, respectivamente, e $I(\phi)$ é a função indicadora.

o gradiente da pressão fluido-estática a partir da fração volumétrica entre as fases contínua e dispersa (Eq. 3.6), assim:

$$\rho_0 = (1 - \alpha)\rho_c + \alpha\rho_d, \quad (3.6)$$

sendo α a razão entre o volume da fase dispersa pelo volume da fase contínua. Este tratamento, através de uma massa específica média, permite modelar aproximadamente o efeito do empuxo em uma partícula de fluido qualquer.

3.2 Modelagem matemática para imposição da condição de contorno

O método da fronteira imersa (MFI) é utilizado para imposição da condição de contorno não periódica nas equações de Navier-Stokes. Mariano (2007) acoplou ao método pseudoespectral de Fourier o método da fronteira imersa, denominando essa junção de metodologia IMERSPEC. O objetivo é simular problemas não-periódicos usando o método espectral de Fourier, o qual necessita de periodicidade nas fronteiras para obter convergência. Detalhes do método MFI podem ser encontrado em Wang et al. (2009), Mariano (2011).

O MFI trabalha simultaneamente com dois domínios de cálculo. Um, denominado euleriano, definido por $\Omega_{MFI} = \Omega_{MFI}^1 \cup \Omega_{MFI}^2$ na Fig. 3.2, o qual é cartesiano e fixo, onde são resolvidas as equações para o fluido (Eqs. 3.1 e 3.2) e o outro é denominado lagrangiano,

definido por Γ_{MFI} na Fig. 3.2, o qual representa a interface imersa no escoamento. No presente trabalho, onde a proposta do uso do MFI é impor condição de contorno não periódica nas equações de Navier-Stokes, a interface imersa é um domínio retangular em que a malha lagrangiana coincide com pontos da malha euleriana.

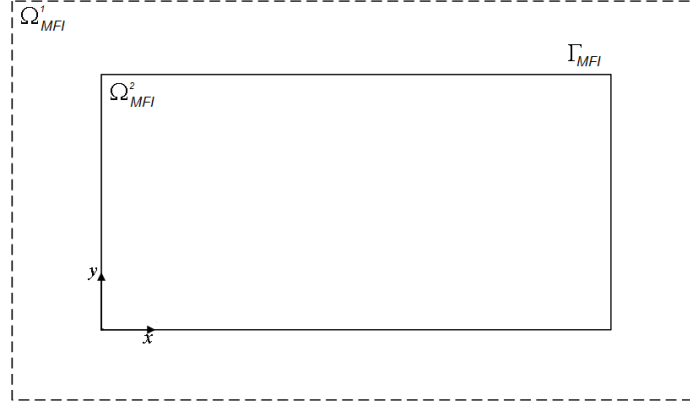


Figura 3.2: Representação esquemática dos domínios lagrangiano (Γ_{MFI}) e euleriano (Ω_{MFI}) (MARIANO, 2011).

Na Eq. 3.1 aparece o termo f_l^{MFI} , denominado campo de força euleriana, responsável por representar a interface das condições de contorno no domínio euleriano Ω . Matematicamente pode ser escrito (MARIANO, 2011):

$$f_l^{MFI}(\vec{x} - \vec{X}) = \begin{cases} F_l^{MFI}(\vec{X}, t) & \text{se } \vec{x} = \vec{X} \\ 0 & \text{se } \vec{x} \neq \vec{X} \end{cases}, \quad (3.7)$$

onde F_l^{MFI} é a componente l da força lagrangiana definida na fronteira Γ_{MFI} , \vec{x} é o vetor posição de um ponto qualquer no domínio euleriano e \vec{X} é o vetor posição de um ponto qualquer no domínio lagrangiano. Nota-se pela Eq. 3.7 que o campo de força euleriano é nulo em todo domínio exceto sobre os pontos lagrangianos, onde ele passa a modelar virtualmente a presença do domínio imerso.

O cálculo da força lagrangiana, F_l^{MFI} , é feito usando o método da imposição direta da força (“Direct Forcing” - DF) proposto por Uhlmann (2005). Uma nova forma desse modelo foi proposta para metodologia IMERSPEC, apresentada por Mariano (2011). De forma geral, este método consiste em estimar uma velocidade (u^*) podendo ser entendida como um campo de velocidade predita. Em seguida, faz-se a “correção” do campo (u^*), impondo

o valor de velocidade que se deseja na fronteira do seu domínio. Detalhes do método são encontrados em Mariano (2011).

3.3 Modelagem matemática para representação da interface móvel

Nesta seção será apresentada a modelagem matemática referente aos dois métodos que foram acoplados à metodologia IMERSPEC para representação da interface, os quais são FT e VOF. De modo geral, ambos os métodos calculam, de formas diferentes, o termo fonte f^{FM} apresentado na Eq. 3.1, o qual é o responsável por representar a fronteira móvel e deformável nas equações de Navier-Stokes.

O método FT pertencente a classe de métodos lagrangianos, ou seja, é utilizado, para construção da interface, uma malha estruturada unidimensional, sendo esta pertencente ao domínio lagrangiano. Inclui-se o método VOF na classe dos métodos eulerianos, os quais definem a interface através de frações de volumes. Ambos os métodos foram implementados e foi realizada uma comparação entre eles ao acoplá-los com a metodologia IMERSPEC.

3.3.1 Método *front-tracking*

Baseado na ideia do método da fronteira imersa desenvolvido por Peskin (1977), o método *Front-tracking*, desenvolvido por Unverdi and Tryggvason (1992), constrói a interface imersa a partir de uma malha não-estruturada, a qual se move sob a malha estacionária. Logo, de forma semelhante ao MFI, o fluido, como um todo, é representado por um domínio euleriano $\Omega_{FM} = \Omega_0 \cup \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$, Fig. 3.3. As interfaces Γ_1 , Γ_2 e Γ_3 , Fig. 3.3, são denominados domínios lagrangianos, os quais podem se deslocar e deformar sob a malha fixa e cartesiana Ω_{FM} . O subdomínio Ω_0 representa a fase contínua e os subdomínios Ω_1 , Ω_2 e Ω_3 as fases dispersas. As equações de Navier-Stokes são usadas para modelar a dinâmica dos fluidos no domínio Ω_{FM} e a formulação lagrangiana modela a dinâmica da interface $\Gamma_{FM} = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$.

A comunicação entre as equações de Navier-Stokes e as equações para o movimento da interface é realizada através do termo fonte f_l^{FM} (eq. 3.2). O cálculo de f_l^{FM} , denominada força externa euleriana, é feito usando a Eq. 3.8 e assume valores diferente de zero sobre as interfaces e nulo dentro e fora delas. Este comportamento é representado matematicamente

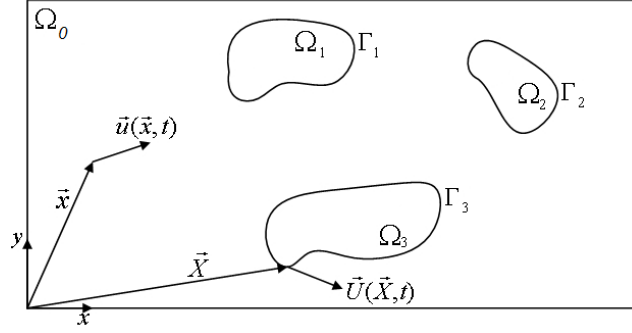


Figura 3.3: Representação dos domínios euleriano $\Omega_{FM} = \Omega_0 \cup \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Omega_3$ e lagrangiano $\Gamma_{FM} = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$ para três corpos imersos de geometria arbitrária.

usando a função delta de Dirac (δ), a qual é definida pela Eq. (3.9) (PESKIN, 1977),

$$f_l^{FM}(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}, \quad (3.8)$$

onde,

$$\delta(\vec{x} - \vec{X}) = \begin{cases} 0 & \text{se } \vec{x} \neq \vec{X} \\ \infty & \text{se } \vec{x} = \vec{X} \end{cases}, \quad (3.9)$$

sendo $F_l^{FM}(\vec{X}, t)$ a componente l da força lagrangiana calculada sobre as partículas de fluido que compõem a interface, x_l é a componente l do vetor posição de uma partícula de fluido no domínio euleriano e X_l é a componente l do vetor posição de uma partícula de fluido que está sobre o domínio lagrangiano (Γ_{FM}), vide Fig 3.3.

Como apresentado anteriormente, a distribuição da força lagrangiana para o domínio euleriano é feita através da Eq. 3.9, ou seja, $f_l^{FM}(\vec{x}, t)$ é diferente de zero apenas sobre a interface estendida. Porém, numericamente, é rara essa coincidência. Então, faz-se o espalhamento da força lagrangiana para os pontos eulerianos.

A função δ , no processo de discretização é substituída por uma função suave D_h , Eq. 3.10 (PESKIN, 1977):

$$D_h(\vec{x} - \vec{X}) = \frac{1}{h^2} W_{\cos} \left(\frac{X - x}{h} \right) W_{\cos} \left(\frac{Y - y}{h} \right), \quad (3.10)$$

$$W_{\cos}(r) = \begin{cases} \frac{1}{4} \left[1 + \cos \left(\frac{\pi|r|}{2} \right) \right] & \text{se } 0 \leq |r| \leq 2 \\ 0 & \text{se } 2 < |r| \end{cases}, \quad (3.11)$$

onde $\vec{r} = \frac{\vec{X} - \vec{x}}{h}$, sendo h o espaçamento do domínio discretizado, Δx e Δy (LAI; PESKIN, 2000). A Fig. 3.4 ilustra a função distribuição W_{cos} . Ela tem a forma similar a uma gaussiana e atende à propriedade de integral unitária no intervalo $[-\infty, \infty]$.

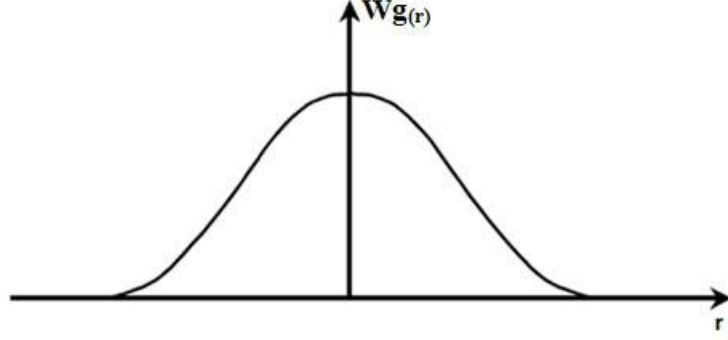


Figura 3.4: Função distribuição do tipo Gaussiana (LAI; PESKIN, 2000).

Para o cálculo das propriedades físicas variáveis, como a massa específica ρ e a viscosidade dinâmica μ , utiliza-se a função indicadora $I(\vec{x}, t)$ (DE LIMA E SILVA, 2002). Esta função é calculada a cada passo no tempo e assume valores variando de 0 a 1, sendo 0 para fase contínua e 1 para fase dispersa, Eq. (3.12):

$$\frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_k} (I(\vec{x}, t)) = \frac{\partial}{\partial x_k} \int_{\Gamma} n_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}, \quad (3.12)$$

onde $n_l(\vec{X}, t)$ é a componente l do vetor normal à interface.

Dado I , para o cálculo das propriedades físicas da fase contínua, fase dispersa e para a região de transição entre ambas as fases utiliza-se uma função *Heaviside* (MIRANDA, 2010), Eqs. (3.13) e (3.14):

$$\rho(\vec{x}, t) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)H(I(\vec{x}, t)), \quad (3.13)$$

$$\mu(\vec{x}, t) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)H(I(\vec{x}, t)), \quad (3.14)$$

onde μ_c e μ_d são as viscosidades dinâmicas e ρ_c e ρ_d são as massas específicas, da fase contínua e dispersa. $H(I)$ é a função *Heaviside* (MIRANDA, 2010).

Formulação lagrangiana

A interface Γ_{FM} é representada de forma paramétrica $(X(s, t), Y(s, t))$, que são as coordenadas dos pontos lagrangianos, sendo s o parâmetro de comprimento de arco que varia de

$0 \leq s \leq L_b$, onde $1 \leq q \leq N_L$, sendo N_L o total de pontos lagrangianos. L_b é o comprimento total da interface (Fig. 3.7).

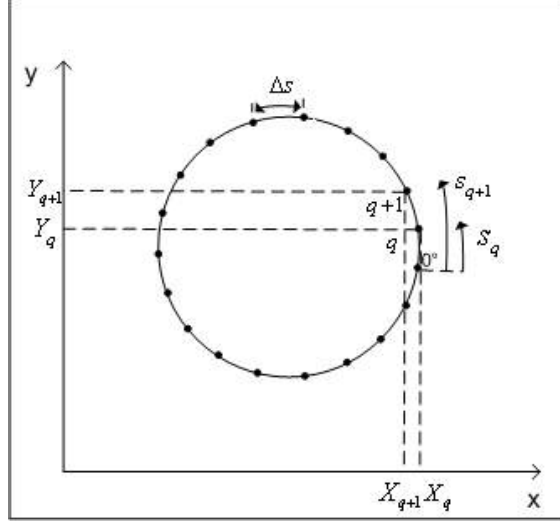


Figura 3.5: Parâmetro s para uma interface Γ_{FM} representada por uma curva fechada.

Para a modelagem da força lagrangiana $F_l^{FM}(\vec{X}, t)$, faz-se um balanço de força sobre um ponto arbitrário do segmento da interface, e, a partir dessa dedução, obtém-se:

$$F_l^{FM} = \sigma \kappa n_l, \quad (3.15)$$

onde $\kappa = \left\| \frac{\partial \tau_l}{\partial s} \right\| / \left\| \frac{\partial X_l}{\partial s} \right\|$ é a curvatura da interface, σ é o coeficiente de tensão interfacial, $n_l = \frac{\partial \tau_l}{\partial s} / \left\| \frac{\partial \tau_l}{\partial s} \right\|$ é a componente l do vetor normal à interface e $\tau_l = \frac{\partial X_l}{\partial s} / \left\| \frac{\partial X_l}{\partial s} \right\|$ é a componente l do vetor unitário tangente à interface.

O movimento da interface é modelado utilizando-se Eq. (3.16):

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = U_l(\vec{X}, t), \quad (3.16)$$

onde $U_l(\vec{X}, t)$ corresponde à componente l do vetor velocidade lagrangiana da interface, calculada a partir da interpolação das velocidades eulerianas para os pontos lagrangianos. Assim, define-se uma velocidade lagrangiana da forma:

$$U_l(\vec{X}, t) = \int_{\Omega} u_l(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x}. \quad (3.17)$$

Substituindo a Eq.3.17 na Eq.3.16 tem-se:

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = \int_{\Omega} u_l(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x}. \quad (3.18)$$

Devido às forças que aparecem no escoamento, a interface se deforma e se move, afetando a distribuição dos pontos lagrangianos. Geralmente, observa-se que em regiões de alta curvatura os pontos lagrangianos tendem a se aglomerar e, ao contrário, em regiões de menor curvatura, os pontos lagrangianos tendem a se distanciar (VILLAR, 2007). Para manter a acurácia dos cálculos, é necessária uma redistribuição dos pontos na interface, buscando assim mantê-los uniformemente distribuídos. O método numérico utilizado é descrito no capítulo 4.

Acoplamento euleriano-lagrangiano

Na seção 3.1, a função delta de Dirac, δ , foi mencionada como dispositivo de comunicação entre os domínios euleriano e lagrangiano. Ela é responsável pela distribuição da força interfacial lagrangiana para os pontos eulerianos e pela interpolação das velocidades do domínio euleriano para os pontos pertencentes à interface lagrangiana. Tais operações são denominadas de distribuição e interpolação, e são representadas, respectivamente, pelas Eq.3.19 e Eq.3.20:

$$f_l^{FM}(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} F_l^{FM}(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}, \quad (3.19)$$

$$U_l(\vec{X}, t) = \int_{\Omega} u_l(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x}. \quad (3.20)$$

O núcleo de Dirac é dado pela Eq. 3.10 e a função peso utilizada é dada pela Eq. 3.11.

3.3.2 Método Volume of Fluid

No método VOF a variável que representa a interface é a fração volumétrica (fc) de cada célula, Eq. 3.21, denominada função coloração (LISITA, 2015). Dessa maneira, para $fc = 1$ ou $fc = 0$ são células que estão totalmente preenchidas pela fase 1 ou 2, respectivamente, e para $0 < fc < 1$ são células que possuem a interface. A ilustração da função coloração é encontrada na Fig. 3.6.

$$fc_{ij} = \frac{A^1}{A^{ce}}, \quad (3.21)$$

onde A^1 é a porção da área referente a fase 1 e $A^{ce} = \Delta x \Delta y$ é a área da célula, sendo Δx e Δy os espaçamentos da malha na direção x e y , respectivamente.

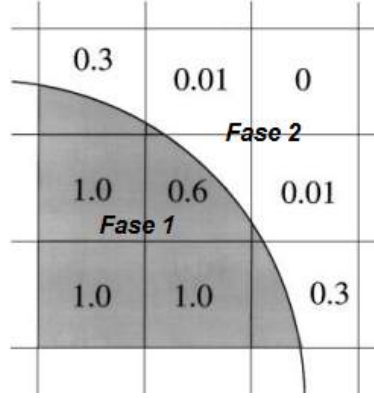


Figura 3.6: Interface separando duas regiões construídas por frações volumétricas (Método VOF) (SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999), sendo a fase 1 denominada dispersa e a fase 2, contínua.

Uma vez de posse do campo função coloração, pode-se definir as propriedades físicas de cada fluido:

$$\rho(fc) = \rho_2 + (\rho_1 - \rho_2)fc(\vec{x}, t), \quad (3.22)$$

$$\mu(fc) = \mu_2 + (\mu_1 - \mu_2)fc(\vec{x}, t), \quad (3.23)$$

onde ρ e μ são as propriedades físicas, massa específica e viscosidade dinâmica, respectivamente. O subíndice 1 significa fase 1 e 2 a fase 2.

Como descrito na seção 3.1, para representação da interface nas equações de Navier-Stokes deve-se adicionar o termo fonte f_l^{FM} , o qual é calculado pela Eq. 3.24:

$$f_l^{FM} = \sigma \kappa \eta_l \delta_S, \quad (3.24)$$

onde σ é o coeficiente de tensão interfacial, $\eta_l = \frac{\vec{\nabla} fc}{|\vec{\nabla} fc|}$ é a componente l do vetor normal unitário, $\kappa = \vec{\nabla} \cdot \eta$ é a curvatura da interface S , δ_S é a função delta concentrada na interface. Para o cálculo dessa função delta existem diversos métodos. A presente tese utiliza o método *continuum surface force* (CSF) (CUMMINS; FRANCOIS; KOTHE, 2004), onde faz-se a seguinte aproximação:

$$\delta_S = |\vec{\nabla} fc|, \quad (3.25)$$

resultando na Eq. 3.26, considerando que $\eta_l = \frac{\vec{\nabla} fc}{|\vec{\nabla} fc|}$,

$$f_l^{FM} = \sigma \kappa \vec{\nabla} fc, \quad (3.26)$$

e sua discretização é apresentada no capítulo de método numérico, Cap. 4.

A advecção da função escalar, fc , é modelada pela Eq. 3.27:

$$\frac{\partial fc}{\partial t} + \nabla(\vec{u}.fc) = 0, \quad (3.27)$$

onde \vec{u} é o vetor velocidade.

Um dos grandes desafios do método VOF é a discretização da equação de advecção da função coloração (Eq. 3.27). Em esquemas de baixa ordem ocorre perda de massa e, conseqüentemente, a função coloração não representa a interface de forma adequada. Métodos de alta ordem são numericamente instáveis e resultam em oscilações numéricas. Dessa maneira, são necessários esquemas de advecção que sejam conservativos. Ao longo dos anos, várias técnicas de advecção têm sido propostas como: *Simple Line interface Calculation* (SLIC) (NOH; WOODWARD, 1976), *Piecewise Linear Interface Calculation* (PLIC), *flux-corrected transport* (FCT) (BORIS; BOOK, 1973), *Compressive interface capturing scheme for arbitrary meshes* (CICSAM) (UBBINK, 1997), entre outros. No presente trabalho foi implementado o método PLIC e será apresentado no capítulo 4. Os métodos CSF e PLIC foram adotados inicialmente pela facilidade de implementação e experiência do grupo MFlab, onde o presente trabalho se insere, de trabalhar com ambos os métodos.

3.4 Resumo da modelagem matemática para escoamentos bifásicos

Na figura 3.7 descreve um resumo da modelagem matemática para ambas metodologias propostas no presente trabalho: IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF.

3.5 Modelagem matemática para o método espectral de Fourier

Objetiva-se nesta seção desenvolver a modelagem matemática do método espectral de Fourier. Para isso, parte-se da definição das transformadas de Fourier e de suas propriedades, para assim, proceder com a transformação das equações de Navier-Stokes para o espaço espectral de Fourier. De posse dos fundamentos teóricos nesta seção desenvolve-se a ferramenta numérica pseudoespectral de Fourier utilizada no presente trabalho.

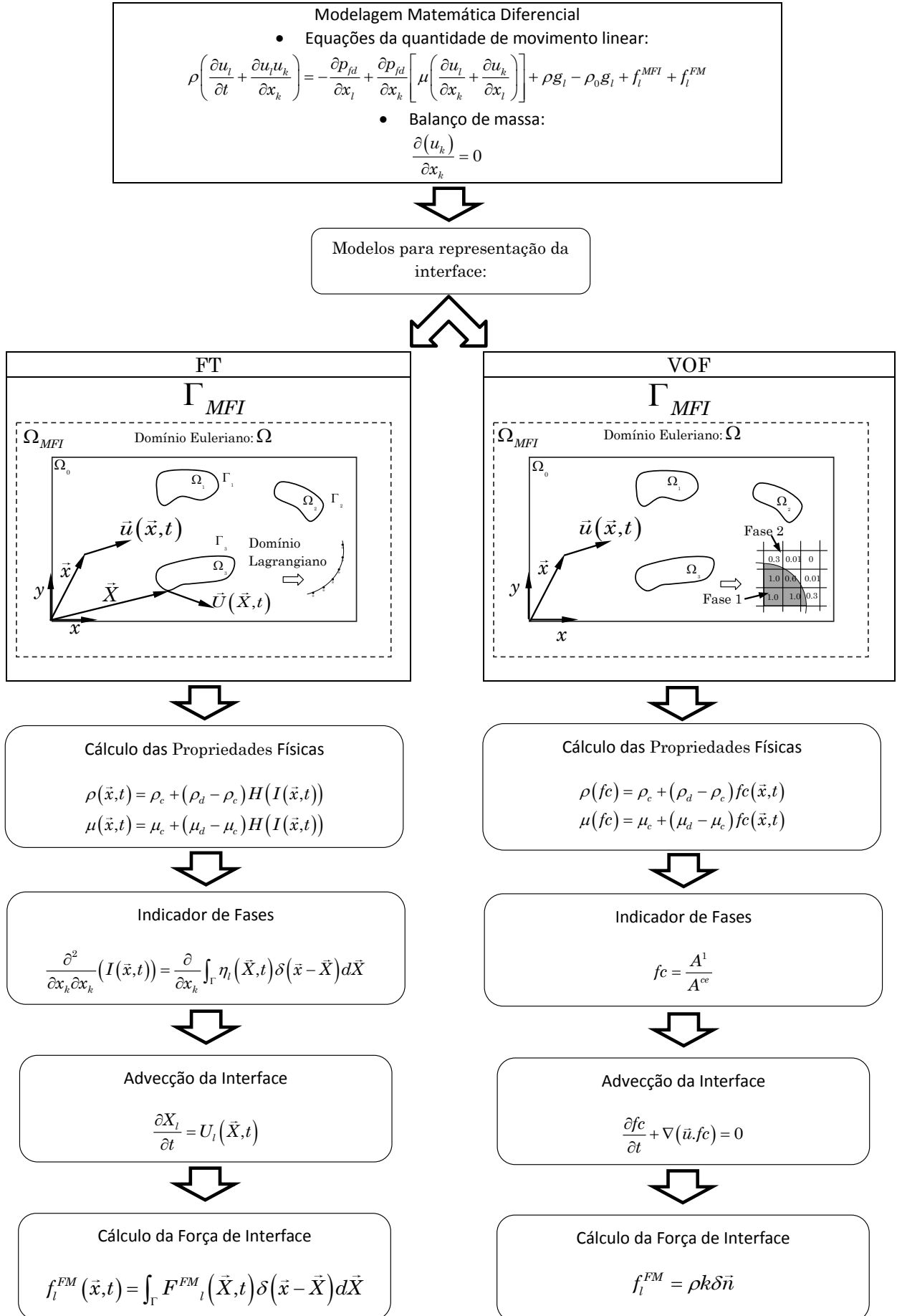


Figura 3.7: Resumo da modelagem matemática para escoamentos bifásicos.

3.5.1 Transformadas de Fourier

Dada uma função $f : \Re \rightarrow \Re$, sua transformada de Fourier é definida pela expressão, Eq. 3.28 (DE FIGUEIREDO, 2000):

$$\widehat{f}(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (3.28)$$

onde o acento circunflexo “^” indica que a função f está transformada, $-\infty < \vec{k} < \infty$ é o vetor número de onda e $i = \sqrt{-1}$.

A Eq. 3.28 é uma integral imprópria, a qual deve ser entendida da seguinte maneira:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x}) d\vec{x} = \lim_{M, N \rightarrow \infty} \int_{-M}^N e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (3.29)$$

onde M e N tendem ao infinito independentemente. Para garantir a existência deste limite, a função f deve apresentar as seguintes características:

- f é seccionalmente contínua em cada intervalo $[-M, N]$, o que implica f ser limitada e integrável em $[-M, N]$;
- $\int_{-\infty}^{\infty} |f(\vec{x})| d\vec{x} < \infty$, ou seja, o limite existe.

A transformada inversa de Fourier, a qual transforma uma função que está no espaço espectral de Fourier para o espaço físico, é dada pela Eq. (3.30):

$$f(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} \widehat{f}(\vec{k}) d\vec{k}. \quad (3.30)$$

3.5.2 Propriedades da Transformada de Fourier

A função no espaço de Fourier possui propriedades que facilitam o trabalho com as equações diferenciais parciais (EDP), e, conseqüentemente, com as equações de Navier-Stokes. Considere f e g duas funções periódicas e seccionalmente contínuas, logo as principais propriedades do espaço espectral de Fourier são:

- Homogeneidade, Eq. 3.31:

$$\widehat{\beta f}(\vec{k}) = \beta \widehat{f}(\vec{k}), \quad (3.31)$$

onde β é uma constante.

- Aditividade, Eq. 3.32:

A transformada da soma de duas funções é a soma das transformadas:

$$\widehat{(f+g)}(\vec{k}) = \widehat{f}(\vec{k}) + \widehat{g}(\vec{k}). \quad (3.32)$$

- Derivada, Eq. 3.33:

A transformada da derivada de uma função é dada por:

$$\widehat{\frac{\partial^n f}{\partial x_l^n}}(\vec{k}) = (ik_l)^n \widehat{f}(\vec{k}), \quad (3.33)$$

onde n é a ordem da derivada.

- Produto de funções, Eq. 3.34:

A transformada do produto de duas funções é um produto de convolução entre as transformadas dessas funções:

$$\widehat{fg}(\vec{k}) = [\widehat{f}(\vec{r}) * \widehat{g}(\vec{s})](\vec{k}). \quad (3.34)$$

onde \vec{k} é o parâmetro de transformação do produto, \vec{r} é o parâmetro de transformação da função $f(\vec{x})$, \vec{s} é o parâmetro de transformação da função $g(\vec{x})$ e o símbolo "*" é a representação do produto de convolução. O produto de convolução é dado por:

$$[\widehat{f}(\vec{r}) * \widehat{g}(\vec{s})](\vec{k}) = \int_{\vec{k}=\vec{r}+\vec{s}} \widehat{f}(\vec{r}) \widehat{g}(\vec{k}-\vec{r}) d\vec{r}. \quad (3.35)$$

3.5.3 Transformação das equações de Navier-Stokes para o espaço espectral de Fourier

Para transformar as equações de Navier-Stokes e da continuidade para o espaço espectral de Fourier, para escoamentos incompressíveis (Eqs. 3.36 e 3.37), pode-se utilizar o método da projeção para o desacoplamento pressão-velocidade, além da aplicação das propriedades da transformada de Fourier (SILVEIRA NETO, 2002; CANUTO et al., 2006; POPE, 2000). Reescrevendo as Eqs. 3.1 e 3.2 com as devidas simplificações, citadas na seção 3.1, têm-se:

$$\frac{\partial u_l}{\partial x_l} = 0, \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial u_l}{\partial t} + \frac{\partial u_l u_k}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_l} + \left(\frac{1}{\rho} \right) \left[\frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \right) \right] + \left(\frac{\rho - \rho_0}{\rho} \right) g_l + \frac{1}{\rho} f_l. \quad (3.37)$$

A equação da continuidade, Eq. 3.36, transformada é dada por

$$ik_l \hat{u}_l = 0. \quad (3.38)$$

Das propriedades da álgebra linear (BOLDRINI, 1980), o vetor velocidade transformado, $\hat{u}_l(\vec{k}, t)$, é perpendicular ao vetor número de onda, k_l , pois o produto escalar entre eles é nulo, Eq. 3.38. Define-se, então, o plano π , o qual é perpendicular ao vetor k_l e contém \hat{u}_l , e pode ser representado graficamente de acordo com a Fig. 3.8.

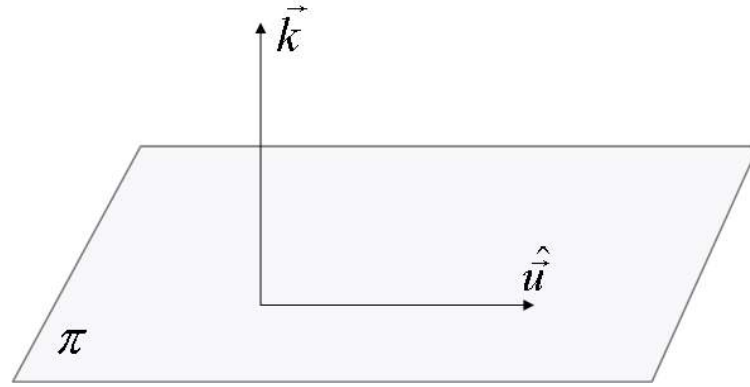


Figura 3.8: Definição do plano π (SILVEIRA NETO, 2002).

Transformando a Eq. 3.37, tem-se a Eq. 3.39

$$\begin{aligned} \widehat{\frac{\partial u_l}{\partial t}} + ik_k \widehat{(u_l u_k)} &= \\ &= -\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} + \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_k * [\widehat{\mu} * (ik_k \widehat{u}_l + ik_l \widehat{u}_k)] + \frac{1}{\widehat{\rho}} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_l + \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_l. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Da Eq. 3.39, pode-se concluir que o termo da taxa de variação da quantidade de movimento linear, $\frac{\partial \hat{u}_l}{\partial t}$, está contido no plano π , pois tem-se que:

$$\widehat{\frac{\partial u_l}{\partial t}} = \frac{\partial \hat{u}_l}{\partial t}. \quad (3.40)$$

Retomando-se a Eq. 3.38, tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial t} (k_l \hat{u}_l) = k_l \frac{\partial \hat{u}_l}{\partial t} = 0 \implies \frac{\partial \hat{u}_l}{\partial t} \subset \pi. \quad (3.41)$$

Quanto ao termo advectivo $ik_k \widehat{(u_l u_k)}$, ao termo gradiente de pressão $\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p}$, ao termo fonte $\frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_l$, ao termo difusivo $\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_k * [\widehat{\mu} * (ik_k \widehat{u}_l + ik_l \widehat{u}_k)]$ e ao termo gravitacional $\frac{1}{\widehat{\rho}} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_l$ nada se pode afirmar sobre as suas posições em relação ao plano π .

Para desacoplar o campo de pressão do campo de velocidade, Silveira Neto (2002), Pope (2000) utilizam o método da projeção. Primeiramente, separam-se os termos que pertencem ao plano π dos demais (Eq. 3.42)

$$\underbrace{\left[\widehat{\frac{\partial u_l}{\partial t}} \right]}_I + \underbrace{\left[ik_k(\widehat{u_l u_k}) + \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_k * [\widehat{\mu} * (ik_k \widehat{u_l} + ik_l \widehat{u_k})] - \frac{1}{\widehat{\rho}} * (\widehat{\rho} - \widehat{\rho_0}) g_l - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_l} \right]}_{II} = 0. \quad (3.42)$$

Observe que, como descrito anteriormente, $I \subset \pi$, e por definição, se a soma de dois vetores é nula, então os dois vetores são colineares. Assim, II é colinear a I e está contido no plano π .

Definindo, então, o tensor projeção Eq. 3.43,

$$\wp_{lk}(\vec{k}) = \delta_{lk} - \frac{k_k k_l}{k^2}, \quad (3.43)$$

onde δ_{lk} é o delta de Kronecker Eq. 3.44:

$$\delta_{lk} = \begin{cases} 1 & \text{se } l = k, \\ 0 & \text{se } l \neq k \end{cases}. \quad (3.44)$$

O tensor projeção \wp_{lk} projeta qualquer vetor sobre o plano π .

De posse da definição do tensor projeção e da conclusão referente é Eq. 3.42 tem-se que:

$$\left[\widehat{TNL_l} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} - \widehat{DIF_l} - \widehat{GRAV_l} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_l} \right] \subset \pi, \quad (3.45)$$

onde $\widehat{TNL_l}$ é o termo $ik_k(\widehat{u_l u_k})$, $\widehat{DIF_l}$ é o termo $\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_k * [\widehat{\mu} * (ik_k \widehat{u_l} + ik_l \widehat{u_k})]$ e $\widehat{GRAV_l}$ é o termo $\frac{1}{\widehat{\rho}} * (\widehat{\rho} - \widehat{\rho_0}) g_l$. Logo, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \left[\widehat{TNL_l} + \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} - \widehat{DIF_l} - \widehat{GRAV_l} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_l} \right] &= \\ &= \wp_{lm} \left[\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

O termo $\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p}$ nada se pode afirmar quanto a sua posição no plano π . Porém, nota-se na Eq. 3.46, que este termo desaparece no lado direito do sinal de igualdade. Isso ocorre quando consideramos ρ constante e, portanto, o termo $\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p}$ é ortogonal ao plano π . Assim,

quando projetado sobre esse mesmo plano, este termo é nulo. Este procedimento faz o desacoplamento pressão-velocidade da equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis no espaço espectral de Fourier.

Porém, no contexto do presente trabalho ρ sofre variações na interface, e, portanto, o termo $\frac{1}{\rho} * ik_l \hat{p}$ não é ortogonal ao plano π . Esta afirmação fica clara visualizando a Fig. 3.9. Neste trabalho, considera-se $\frac{1}{\rho} * ik_l \hat{p}$ perpendicular ao plano π a fim de facilitar a modelagem matemática e a implementação do método para aplicações com propriedades físicas variáveis. As consequências desta aproximação ficam evidentes quando se utiliza essa modelagem matemática para representar problemas com altas razões de propriedades físicas. Nos resultados obtidos no capítulo 5, aparecem oscilações espúrias, as quais podem ser removidas utilizando filtros numéricos (seção 4).

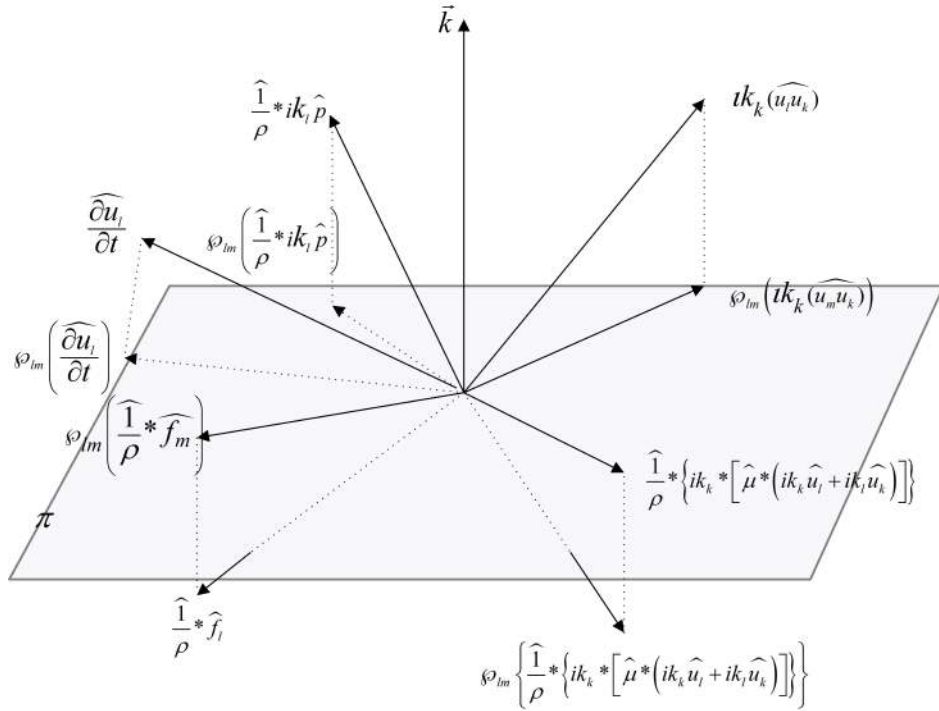


Figura 3.9: Projeção dos termos fonte, advectivo, difusivo e do termo gravitacional sobre o plano π .

Finalmente, substituindo o lado direito da Eq. 3.46 na Eq. 3.42, obtém-se as equações de Navier-Stokes no espaço espectral de Fourier:

$$\frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t} = \wp_{lm} \left[-\widehat{TNL}_m + \widehat{DIF}_m + \widehat{GRAV}_m + \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_m \right]. \quad (3.47)$$

Algumas observações devem ser tecidas a respeito da Eq. 3.47. A primeira, é a independência do termo de pressão, o qual foi substituído pela projeção dos termos fonte, advectivo, difusivo e gravitacional. Comparando com esquemas clássicos, esse procedimento equivale a substituir a solução de uma equação de Poisson por um produto vetor-matriz, que, em termos numéricos, é mais barato. Em termos físicos, ambos têm a mesma função, a qual é garantir a conservação de massa.

Uma segunda observação é a presença de integrais de convolução, que rigorosamente, devem ser resolvidas através de algum esquema de integração numérica. Caso isso seja feito, provalvemente, o ganho computacional obtido pela operação projeção seria perdido na resolução dessas integrais. Todavia, como será visto posteriormente, essas integrais de convolução são substituídas pelo método pseudoespectral, tornando-se a resolução da Eq. (3.47) vantajosa quando comparada com métodos clássicos de alta ordem.

Uma última ressalva é que apesar do campo de pressão não aparecer nas equações de Navier-Stokes, ele pode ser recuperado por pós-processamento, a partir da Eq. 3.46. Para isso, após obter os campos de velocidade no instante de tempo posterior a Eq. 3.47, recalculam-se os termos do lado direito da equação (\widehat{TNL}_m , \widehat{DIF}_m , \widehat{GRAV}_m e $\frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_m$) usando os novos campos de velocidade com esses novos termos do lado direito, volta-se a Eq. 3.46 e isola o termo referente ao gradiente de pressão:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} &= \mathcal{J}_{lm} \left[\widehat{TNL}_m - \widehat{DIF}_m - \widehat{GRAV}_m - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_m \right] - \\ &- I_{lm} \left[\widehat{TNL}_m - \widehat{DIF}_m - \widehat{GRAV}_m - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_m \right], \end{aligned} \quad (3.48)$$

onde I_{lm} é o tensor identidade, o qual foi introduzido por conveniência, sem alterar a Eq. 3.48. Colocando-se em evidência os termos entre colchetes, tem-se:

$$\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} = (\mathcal{J}_{lm} - I_{lm}) \left[\widehat{TNL}_m - \widehat{DIF}_m - \widehat{GRAV}_m - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_m \right]. \quad (3.49)$$

Para determinar o campo de pressão, transforma-se a Eq. 3.49 para o espaço físico e multiplica-se ambos os lados por ρ , obtendo-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_k}(p) = \rho TIF \left[(\mathcal{J}_{lm} - I_{lm}) \left(\widehat{TNL}_m - \widehat{DIF}_m - \widehat{GRAV}_m - \frac{1}{\widehat{\rho}} \widehat{f}_m \right) \right]. \quad (3.50)$$

onde TIF [] é a transformada inversa de Fourier.

Transformando-se a Eq. 3.50 para o espaço de Fourier, obtêm-se:

$$ik_l \widehat{p} = \widehat{\rho} * \left[(\mathcal{J}_{lm} - I_{lm}) \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right) \right]. \quad (3.51)$$

Multiplica-se a Eq. 3.51 por ik_l , tem-se:

$$\widehat{p} = -\frac{ik_l}{k^2} \left\{ \widehat{\rho} * \left[(\mathcal{J}_{lm} - I_{lm}) \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right) \right] \right\}. \quad (3.52)$$

Mas,

$$(\mathcal{J}_{lm} - I_{lm})k_l = \left(\delta_{lm} - \frac{k_l k_m}{k^2} - I_{lm} \right) k_l = -k_m. \quad (3.53)$$

Assim,

$$\widehat{p} = \frac{ik_m}{k^2} \left[\widehat{\rho} * \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right) \right]. \quad (3.54)$$

E, finalmente,

$$p(\vec{x}, t) = TIF \left\{ \frac{ik_m}{k^2} \left[\widehat{\rho} * \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right) \right] \right\}. \quad (3.55)$$

CAPÍTULO IV

MÉTODO NUMÉRICO

Objetiva-se neste capítulo apresentar as implementações numéricas realizadas para a utilização da metodologia IMERSPEC. Primeiramente, serão abordados os algoritmos numéricos básicos para a utilização do método pseudoespectral de Fourier. Em seguida, são dados os detalhes das implementações numéricas referentes às equações de Navier-Stokes. Por fim, as discretizações numéricas referentes aos modelos de representação da interface FT e VOF são apresentadas.

4.1 DFT e FFT

Para trabalhar com a Transformada de Fourier numericamente utiliza-se a Transformada Discreta de Fourier (TDF), dada pela Eq. 4.1.

$$\widehat{f}(\vec{k}) = \sum_{n=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} f(\vec{x}) e^{\frac{-2\pi i k n}{N}}, \quad (4.1)$$

onde \vec{k} é o vetor número de onda, N é o número de pontos de colocação eulerianos, $f(\vec{x})$ é a função a ser transformada, n fornece a posição do vetor $x_n = n\Delta x$ nos nós de colocação e $i = \sqrt{-1}$.

A Transformada Discreta Inversa de Fourier (TDIF) é apresentada pela Eq. 4.2:

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{n=-\frac{N}{2}+1}^{\frac{N}{2}} \widehat{f}(\vec{k}) e^{\frac{2\pi i k n}{N}}. \quad (4.2)$$

As Eqs. 4.1 e 4.2 são aproximações numéricas da transformada direta e inversa de Fourier dada pelas Eqs. 3.28 e 3.30. Para a obtenção dessas aproximações é necessário que a função a ser transformada para o espaço espectral seja periódica (BRIGGS; HENSON, 1995), ou seja:

$$f_l(x, t) = f_l(x + L, t), \quad (4.3)$$

onde L é o comprimento do domínio. Esta propriedade limita o uso da TDF a problemas modelados por equações diferenciais parciais com condições de contorno periódicas.

Cooley and Tukey (1965) desenvolveram um algoritmo denominado *Fast Fourier Transform* (FFT), o qual trabalha com um procedimento denominado rotação de bit, tornando o cálculo da TDF muito mais eficiente quando comparado com as Eqs. 4.1 e 4.2, pois o número de operações reduz de $O(N^2)$ para $O(N \log_2 N)$ (Fig. 4.1). Com esse custo computacional torna-se atrativo resolver equações diferenciais parciais utilizando o método espectral de Fourier. Outra grande vantagem do método espectral é a acurácia numérica, a qual será mostrada mais adiante através da verificação do código utilizando a técnica das soluções manufaturadas para problemas com variações de propriedades físicas. Porém, para atingir uma melhor performance na utilização das FFTs é preciso usar 2^N , 3^N ou 5^N pontos de colocação (onde N é um número inteiro) (BRIGGS; HENSON, 1995). Além disto os pontos de colocação devem ser uniformemente espaçados.

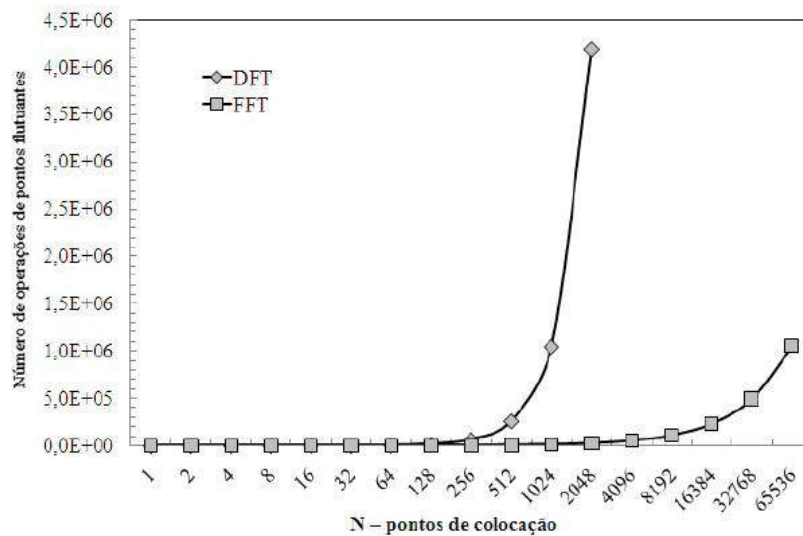


Figura 4.1: Comparação entre a resolução da TDF e da FFT (MARIANO, 2007).

Encontram-se disponíveis várias subrotinas para o uso da FFT (www.fftw.org/benchfft-ffts.html), as quais levam em conta diversos parâmetros, como por exemplo, trabalhar com dados reais ou complexos, números pares ou ímpares de nós de colocação, simples ou dupla precisão, unidimensional, bidimensional ou tridimensional, serial ou paralelo, números de nós de colocação de potência 2, 3 ou 5 e em diversas linguagens de programação. Especificamente, para o presente trabalho, foi utilizada uma versão da subrotina FFTE de Takahashi (2006), que pode ser encontrada em www.ffte.jp. Tal subrotina escrita em FORTRAN 77, tem dupla precisão e seu melhor desempenho ocorre para 2^N nós de colocação, onde N é um número inteiro (BRIGGS; HENSON, 1995).

Um procedimento muito importante a ser considerado é o cálculo dos números de onda k , que são usados na resolução das equações transformadas e são calculados no presente trabalho de acordo com a Eq. 4.4:

$$k_{l(n)} = \begin{cases} \frac{2\pi(n-1)}{[N(\Delta x_l)]} & 1 \leq n \leq \frac{N}{2} + 1, \\ \frac{2\pi(n-1-N)}{[N(\Delta x_l)]} & \frac{N}{2} + 2 \leq n \leq N. \end{cases} \quad (4.4)$$

onde k_l é a componente l do vetor número de onda \vec{k} , N é o número de nós de colocação, Δx é o espaçamento entre os nós de colocação e n é a posição no vetor em uma direção do domínio como indicado na Eq. 4.1. Caso outra subrotina que calcule a FFT seja utilizada, deve-se observar como é realizado o cálculo dos números de onda, uma vez que este parâmetro é diferente para cada subrotina (BRIGGS; HENSON, 1995).

4.2 Tratamento do termo não-linear

Quando se trabalha com a resolução das equações de Navier-Stokes de forma espectral deve-se tratar o termo não-linear de forma apropriada, pois sua resolução passa por uma integral de convolução, já que trata-se da transformação do produto de duas funções Eq. 3.35. A resolução dessa integral é inviável computacionalmente, portanto faz-se uso do método pseudo-espectral.

O termo não-linear pode ser tratado de diferentes formas (CANUTO et al., 1987), apesar de serem matematicamente idênticas, assumindo que $\nabla \cdot \vec{u} = 0$, tais formas apresentam diferentes propriedades quando discretizadas. São estas:

- Forma advectiva ou não-conservativa: $(\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u}$
- Forma divergente ou conservativa: $\nabla \cdot (\vec{u} \vec{u})$
- Forma anti-simétrica: $\frac{1}{2}[(\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} + \nabla \cdot (\vec{u} \vec{u})]$
- Forma rotacional: $\nabla \cdot (\vec{u} \vec{u}) + \vec{\omega} \times \vec{u}$ onde $\vec{\omega} = \nabla \times \vec{u}$.

A forma rotacional é a que apresenta menor custo computacional, mas introduz oscilações nos altos números de onda, a menos que o processo de *dealise* (CANUTO et al., 1987) seja usado. No entanto, esse processo aumenta o custo do cálculo dos coeficientes de Fourier consideravelmente. A forma anti-simétrica é a mais estável e apresenta os melhores resultados, mas apresenta um custo computacional duas vezes maior. Apesar dessas observações a forma anti-simétrica é aqui adotada (MARIANO, 2011).

O algoritmo básico de um método pseudoespectral para o cálculo do termo não-linear na forma anti-simétrica, utilizada no presente trabalho. A seguir o procedimento que trabalha com o termo não-linear na forma divergente, é dado por:

1. Primeiro traz-se o campo \hat{u}_l para o espaço físico;
2. Calcula-se os produtos necessários $u_l u_k$ no espaço físico;
3. Transforma-se os produtos $u_l u_k$ para o espaço de Fourier, obtendo-se $\widehat{u_l u_k}$;
4. Calcula-se as derivadas de $\widehat{u_l u_k}$ no espaço de Fourier obtendo as parcelas do termo não linear calculadas na forma conservativa $(ik_k \widehat{u_l u_k})$;

Agora, descreve-se o cálculo do termo não-linear na forma advectiva.

1. Conhecendo-se \hat{u}_k , calcula-se as derivadas $ik_k \hat{u}_k$;
2. Faz-se a transformada inversa da derivada $ik_k \hat{u}_k$ e do campo de velocidade \hat{u}_l ;
3. Faz-se, no espaço físico, o produto $u_l \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$;
4. Transforma-se o produto $u_l \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$ para o espaço de Fourier, obtendo as parcelas do termo não-linear calculadas na forma não-conservativa $\widehat{u_l \frac{\partial u_k}{\partial x_l}}$;

5. Para finalizar o cálculo do termo não linear faz-se média das parcelas obtidas no último passo de cada procedimento descrito acima, usando-se a forma conservativa e a forma não-conservativa, ou seja,

$$\widehat{TNL} = \frac{1}{2} \left(ik_k \widehat{u_l u_k} + u_l \widehat{\frac{\partial u_k}{\partial x_l}} \right), \quad (4.5)$$

onde TNL corresponde ao termo não linear no espaço espectral de Fourier.

Esta sequência de passos fornece o tratamento do termo não-linear através da forma anti-simétrica. Esta metodologia apresenta menor custo computacional comparado com a solução de uma integral de convolução. Além disso, segundo de Souza (2005), ela é mais estável que as formas advectiva e divergente separadamente.

4.3 Discretização temporal das equações de Navier-Stokes

Nota-se que as equações de Navier-Stokes transformadas para o espaço espectral de Fourier resultou em duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem no tempo (uma para cada componente do vetor velocidade). Para resolvê-las é necessário utilizar um esquema de integração temporal de alta ordem que seja compatível com o esquema de solução espacial, o qual possui a possui alta ordem (DE SOUZA, 2005).

No presente trabalho utilizou-se um esquema de Runge-Kutta de quarta ordem, com seis passos (RK46), otimizado com baixa dispersão e difusão e com redução do custo de armazenamento de variáveis (ALLAMPALLI et al., 2009). O algoritmo RK46 é mostrado abaixo:

$$AUX_{it} = \alpha_{it} AUX_{it-1} + \Delta t [\widehat{RHS}_{it}], \quad (4.6)$$

$$\widehat{u}_{it+1} = \widehat{u}_{it} + \beta_{it} AUX_{it}, \quad (4.7)$$

onde $it = 1, 2, \dots, 6$, AUX é uma variável auxiliar que, para o presente trabalho, representa a velocidade intermediária nos passos do RK46, α e β são constantes dadas na Tab. 4.1 e \widehat{RHS} é o lado direito da Eq. (3.47), ou seja,

$$\widehat{RHS}_l = \mathcal{J}_{lm} \left[ik_m (\widehat{u_l u_m}) - \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_m * [\widehat{\mu} * (ik_m \widehat{u_l} + ik_l \widehat{u_m})] - \frac{1}{\widehat{\rho}} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_l - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_l} \right]. \quad (4.8)$$

Tabela 4.1: Coeficientes dos esquema RK46 (ALLAMPALLI et al., 2009).

it	α	β
1	0.0	0.122
2	-0.691750960670	0.477263056358
3	-1.727127405211	0.381941220320
4	-0.694890150986	0.447757195744
5	-1.039942756197	0.498614246822
6	-1.531977447611	0.186648570846

Fazendo as seis iterações propostas na Eq. 4.6 obtêm-se a velocidade no espaço de Fourier, (\hat{u}_l) no tempo posterior, ou seja, $\hat{u}_l^{t+\Delta t}$.

4.4 Processo de filtragem

Quando se trabalha com métodos de alta ordem, por exemplo o método pseudoespectral de Fourier, a solução das equações que apresentam descontinuidades no domínio de cálculo é influenciada pelo fenômeno de Gibbs, o qual produz erros numéricos nos pequenos comprimentos de ondas na forma de oscilações espúrias (NAVARRA; STERN; MIYAKODA, 1994). Um exemplo de fenômeno de Gibbs é observado na Fig. 4.2. Para combater esse problema a literatura aponta para processos de filtragem dos campos das variáveis onde aparecem as descontinuidades (CANUTO et al., 2007; MARIANO, 2007).

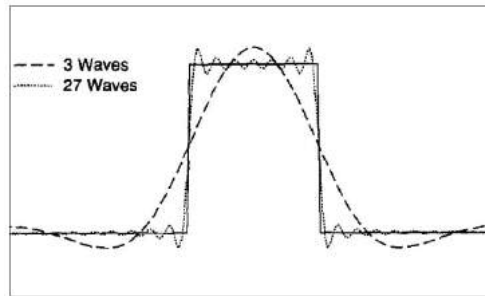


Figura 4.2: Exemplo de fenômeno de Gibbs em uma função do tipo onda quadrada (NAVARRA; STERN; MIYAKODA, 1994).

No presente trabalho o processo de filtragem é imposto nos campos de velocidades e no campo de pressão. Este processo de filtragem é dado pela equação:

$$\hat{g}(\vec{k}, t) = \omega \hat{g}(\vec{k}, t) \quad (4.9)$$

onde \hat{g} é a função descontínua a ser filtrada e $\omega(\theta)$ é a função filtro.

Baseado em Canuto et al. (2006), dois filtros foram utilizados no presente trabalho, os quais são: Lanczos (ω_l) e Exponencial (ω_e), os quais são dados pelas Eqs. 4.10 e 4.11, respectivamente:

$$\omega_l(\theta) = \frac{\sin(\theta_i)}{\theta_i} \frac{\sin(\theta_j)}{\theta_j}, \quad (4.10)$$

e

$$\omega_e(\theta) = e^{-\alpha(\theta_i)^\beta} e^{-(\theta_j)^\beta}. \quad (4.11)$$

Onde,

$$\theta_i = \frac{L_i k_i}{N_x}, \quad (4.12)$$

e

$$\theta_j = \frac{L_j k_j}{N_y}, \quad (4.13)$$

sendo i e j as posições da matriz ω_{ij} , L é o comprimento do domínio em uma das direções, N_x e N_y são os números de pontos discretizados do domínio nas direções x e y , respectivamente. O vetor número de onda em uma das direções é representado por k e β corresponde a ordem do filtro. No presente trabalho, $\beta = 2$.

4.5 Estabilidade Numérica

Um método numérico é instável quando quaisquer erros ou perturbações na solução são amplificadas sem limites. Essas amplificações fazem com que o módulo dos valores na solução numérica cresçam a cada etapa do cálculo. O acúmulo de tais erros pode ser evitado, se critérios de estabilidade para cada método numérico são satisfeitos (VILLAR, 2007).

Os critérios de estabilidade envolvendo a simulação numérica de escoamentos bifásicos são dados obedecendo os critérios de estabilidade dos termos difusivos Eq. 4.14, convectivos Eq. 4.15, gravitacional Eq. 4.16, da tensão interfacial Eq. 4.17 e da advecção da interface Eq. 4.18 são:

$$\Delta t_d = \frac{1}{2} \left(\frac{\rho}{\mu} \right) \left(\frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta x^2 + \Delta y^2} \right), \quad (4.14)$$

$$\Delta t_c = \min \left(\frac{\Delta x}{|u|_{\max}}, \frac{\Delta y}{|v|_{\max}} \right), \quad (4.15)$$

$$\Delta t_g = \frac{1}{\sqrt{|g_y|\Delta y}}, \quad (4.16)$$

$$\Delta t_{ts} = \frac{1}{\sqrt{\frac{\sigma \kappa}{\min(\rho_d, \rho_c)} \min(\Delta x, \Delta y)^2}}, \quad (4.17)$$

$$\Delta t_{ai} = \frac{\min(0, 5\Delta x, 0, 5\Delta y)}{|V_{bl}|}. \quad (4.18)$$

Dessa maneira o critério de estabilidade é dado pela Eq. 4.19:

$$\Delta t = CFL \min(\Delta_d, \Delta_c, \Delta_g, \Delta_{ts}, \Delta_{ai}). \quad (4.19)$$

onde $0 < CFL \leq 1$ e \min é a função que calcula o mínimo entre os parâmetros dados.

4.6 Método Front-Tracking (FT)

Nesta seção apresenta-se a discretização do modelo matemático proposto para o método FT. Como descrito no capítulo 3, o método FT faz uso de um domínio euleriano, onde se tem uma malha fixa e uniforme e um domínio lagrangiano, o qual possui uma malha não-estruturada que se move no interior da malha euleriana. Na malha euleriana ocorre a solução das equações de Navier-Stokes. Na malha lagrangiana é onde se tem informações da interface móvel e deformável, Fig. 4.3. O processo de discretização na malha euleriana foi descrito anteriormente, enquanto que o processo de implementação da malha lagrangiana será apresentado nessa seção.

4.6.1 Cálculo das propriedades físicas

Além do termo não-linear das equações de Navier-Stokes, outros termos são tratados de forma pseudoespectral. No presente trabalho, como citado anteriormente, busca-se resolver escoamentos incompressíveis com propriedades físicas variáveis. Dessa forma, como citado no capítulo 3, μ e ρ são constantes apenas sob uma linha de corrente, e, assim, devem ser tratadas como produto de duas funções Eq. 3.35. As Eqs. 4.20 e 4.21 apresentam as avaliações de ρ e μ , Eqs. 4.20 e 4.21, respectivamente, no espaço espectral de Fourier.

$$\hat{\rho}(\vec{k}, t) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c) \hat{I}(\vec{k}, t), \quad (4.20)$$

$$\hat{\mu}(\vec{k}, t) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c) \hat{I}(\vec{k}, t). \quad (4.21)$$

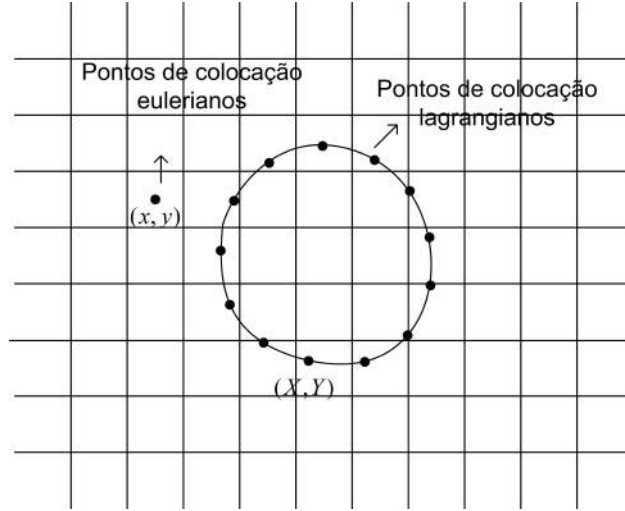


Figura 4.3: Representação esquemática da malha euleriana e da malha lagrangiana nas simulações realizadas com o método FT.

A função indicadora é calculada no espaço espectral de Fourier através da Eq. 4.22:

$$\hat{I}(\vec{k}, t) = -\frac{ik_l}{k^2} \hat{\phi}(\vec{k}, t), \quad (4.22)$$

onde, $\phi(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} \eta_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}$ é a distribuição do vetor normal unitário η_l , calculado na malha lagrangiana, para os pontos de colocação eulerianos. Essa função é calculada utilizando-se a aproximação de δ dada nas Eqs. 3.10 e 3.11. A discretização do vetor normal unitário η_l é apresentado na subseção 4.6.3.

Para os termos da Eq. 3.47 onde aparecem propriedades físicas variáveis, o produto é feito no espaço físico, e em seguida, transforma-se o produto para o espaço espectral de Fourier.

O que tornam as Eqs. 4.20 e 4.21 variáveis é a função indicadora I , Eq. (3.12). A função indicadora, usada no presente trabalho, foi apresentada por Unverdi and Tryggvason (1992), e é calculada a partir da normal avaliada em cada ponto lagrangiano.

4.6.2 Discretização das equações pertencentes ao domínio lagrangiano

A discretização das equações que modelam o movimento da interface é realizada em uma malha lagrangiana. Os pontos discretizados são dispostos de maneira que $s_q = q\Delta s$, $q = 1, \dots, N_L$ é a posição dos pontos lagrangianos $X_l(q)$ tal que $\vec{X} = (X(q), Y(q))$, ver Fig. 4.4.

A malha lagrangiana é definida por N_L pontos, tal que N_L é dependente da malha

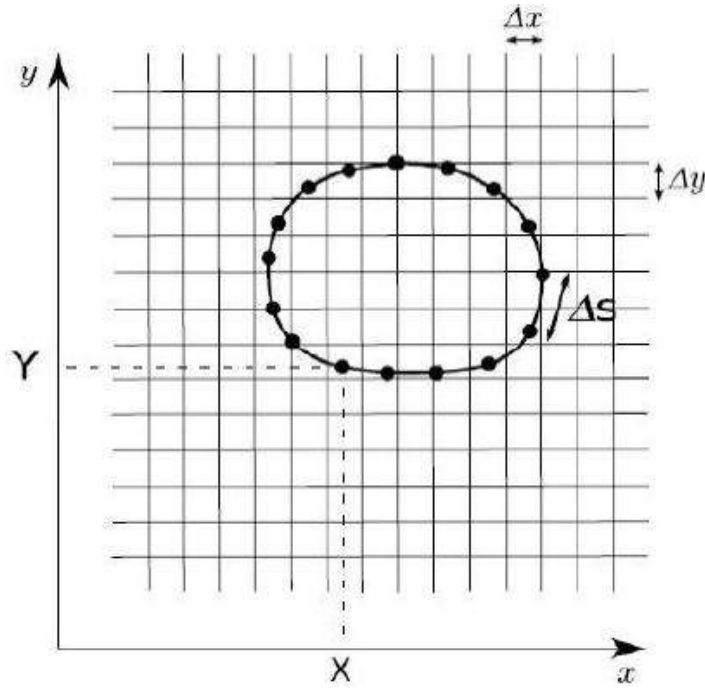


Figura 4.4: Representação esquemática da malha lagrangiana, sobre os nós de colocação eulerianos.

euleriana. No presente trabalho, adota-se em média de dois pontos lagrangianos por célula da malha euleriana (DE LIMA E SILVA, 2002), logo define-se:

$$\begin{aligned}\Delta s &= \min \left[\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2} \right], \\ N_L &= \text{int} \left(\frac{L_b}{\Delta s} \right),\end{aligned}\tag{4.23}$$

onde, L_b é o perímetro da interface e Δs é definido como o espaçamento da malha lagrangiana. $\min []$ é o mínimo entre os valores Δx e Δy , os quais são os espaçamentos da malha euleriana nas direções x e y , respectivamente, e $\text{int} ()$ é a parte inteira da divisão.

4.6.3 Discretização da força lagrangiana

Como visto na seção 3.3.1, a densidade da força lagrangiana é calculada em função da curvatura da interface κ , Eq. (4.27), da componente l do vetor tangente unitário τ_l , Eq. (4.26) e da componente l do vetor normal unitário n_l , Eq. (4.25), as quais são discretizadas recorrendo-se aos polinômios de Lagrange de grau quatro.

Sabendo que a interface pode ser modelada através de uma equação vetorial paramé-

trica do tipo:

$$\vec{R} = g(q)\vec{i} + h(q)\vec{j}, \quad (4.24)$$

onde q é um parâmetro dado, i é o vetor unitário na direção x e j é o vetor unitário na direção y . A partir da Eq. (4.24) e de Lima e Silva (2002), as definições de τ_l , n_l e κ são dados pelas Eqs. (4.25), (4.26) e (4.27), respectivamente.

$$\vec{\eta}(X_q, t) = \frac{-h'\vec{i} + g'\vec{j}}{\sqrt{h'^2 + g'^2}}, \quad (4.25)$$

$$\vec{\tau}(X_q, t) = \frac{g'\vec{i} + h'\vec{j}}{\sqrt{h'^2 + g'^2}}, \quad (4.26)$$

$$\kappa(X_q, t) = \frac{g'h'' - g''h'}{(h'^2 + g'^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.27)$$

onde $(')$ é a primeira derivada em relação ao parâmetro p , $('')$ é a segunda derivada em relação ao parâmetro p , $g(p)$ é definido pela Eq. (4.28) e $h(p)$ é definida pela Eq. (4.29).

$$g_M(p) = \sum_{q=1}^M L_q(p) X_q(p_q), \quad (4.28)$$

$$h_M(p) = \sum_{q=1}^M L_q(p) Y_q(p_q), \quad (4.29)$$

onde,

$$L(p) = \prod_{j \neq q, j=1}^M \frac{p - p_j}{p_q - p_j}. \quad (4.30)$$

onde X_q e Y_q são as coordenadas dos pontos da interface, que podem ser definidos por X_q, Y_q , onde $q = 0, \dots, N_L$ e $p_q = q$.

O espaçamento $\Delta s(q)$ pode também ser definido a partir da equação vetorial paramétrica e é dado pela Eq. (4.31):

$$\begin{aligned} \Delta s(X_q) = & \frac{1}{4} [\sqrt{g'^2(X_l(q-1)) + h'^2(X_l(q-1))} + \\ & + 2\sqrt{g'^2(X_l(q)) + h'^2(X_l(q))} + \sqrt{g'^2(X_l(q+1)) + h'^2(X_l(q+1))}]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

A discretização da força interfacial é dada por:

$$F_l = \sigma \kappa \eta_l, \quad (4.32)$$

para cada ponto X_l a força interfacial é avaliada segundo as eqs. 4.33 4.34,

$$F_x = \sigma \kappa \eta_{X_q}, \quad (4.33)$$

$$F_y = \sigma \kappa \eta_{Y_q}. \quad (4.34)$$

4.6.4 Discretização do avanço da interface

A equação para o movimento da interface é dada por:

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = U_l(\vec{X}, t), \quad (4.35)$$

onde U_l é a componente l do vetor velocidade sobre a interface, dado pela Eq. (3.17), que é o processo de interpolação da velocidade dos pontos de colocação eulerianos para os pontos lagrangianos da interface.

Para discretização temporal da Eq. (4.35) utiliza-se o método de Euler (CHAPRA; CANALE, 1985), descrita da seguinte forma:

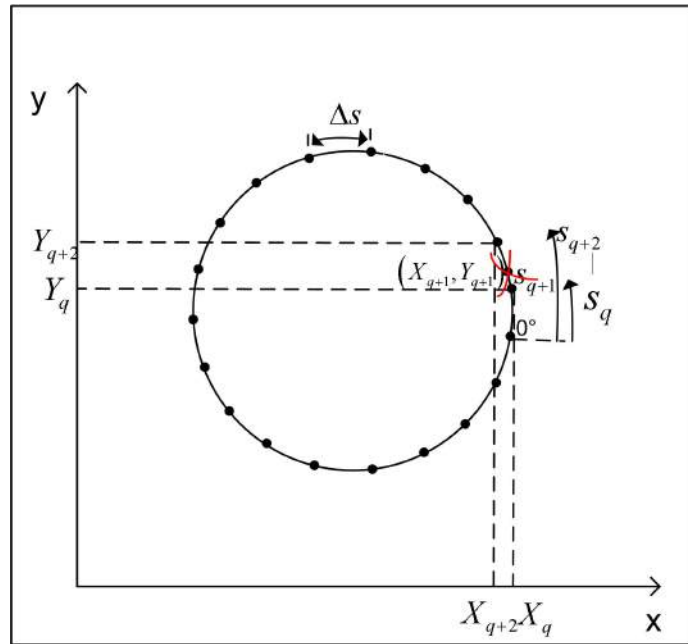
$$X_l^{t+\Delta t} = X_l^t + \Delta t U_l^t. \quad (4.36)$$

4.6.5 Redistribuição dos pontos lagrangianos

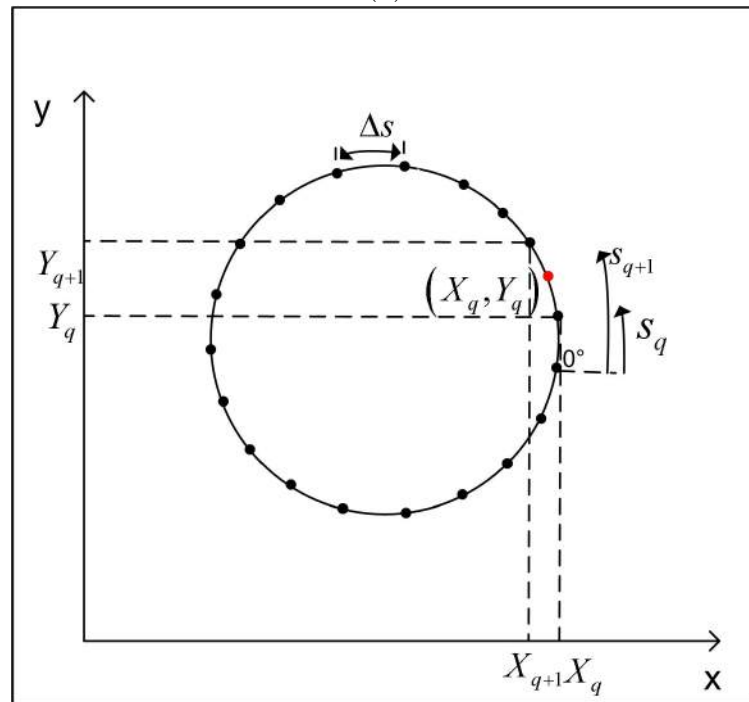
A redistribuição dos pontos lagrangianos é composta de duas etapas: a redefinição de malha e a equidistribuição. Ambos têm por objetivo manter os pontos lagrangianos uniformemente distribuídos de tal maneira a obter a acurácia dos cálculos, como por exemplo, o cálculo da força lagrangiana.

A redefinição de malha é necessária devido à deformação da interface. Desta maneira, para manter uma média de dois pontos lagrangianos por célula da malha euleriana é preciso acrescentar ou retirar pontos lagrangianos.

Nota-se, pela Fig. 4.5 (a), que $\Delta s(q+1) < \Delta s = \min \left[\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2} \right]$, logo o ponto (X_{q+1}, Y_{q+1}) está próximo do ponto (X_q, Y_q) , sendo assim é necessário retirar o ponto (X_{q+1}, Y_{q+1}) , de modo a manter uma densidade de pontos lagrangianos uniforme. Na Fig. 4.5 (b), observa-se que $\Delta s(q+1) > \Delta s = \min \left[\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2} \right]$, assim é necessário inserir o ponto (X_n, Y_n) . Dessa maneira, os pontos lagrangianos irão se aproximar de uma densidade de dois pontos lagrangianos por célula da malha euleriana.



(a)



(b)

Figura 4.5: Representação esquemática da redefinição de malha lagrangiana: (a) remoção de ponto e (b) inserção de ponto.

A posição do ponto lagrangiano que será inserido entre os pontos (X_q, Y_q) e (X_{q+1}, Y_{q+1}) , Fig. 4.5 (b), é definido pela spline paramétrica circular local (CHAPRA; CANALE, 1985). Assim, calcula-se a função cúbica $Y = aX^3 + bX^2 + cX + d$ que representa a curva que passa pelos pontos (X_{q-1}, Y_{q-1}) , (X_q, Y_q) , (X_{q+1}, Y_{q+1}) e (X_{q+2}, Y_{q+2}) , e, então define-se $X_n = \frac{X_q + X_{q+1}}{2}$, e o Y_n é obtido através da função cúbica calculada pela interpolação spline, ou seja, $Y_n = aX_n^3 + bX_n^2 + cX_n + d$.

Este procedimento de redefinição de malha garante um $\Delta s = \min \left[\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2} \right]$, porém, não garante uma distribuição uniforme dos pontos lagrangianos, o qual é necessário para manter a acurácia dos cálculos, logo é preciso equidistribuir os pontos da interface.

Para equidistribuir tais pontos, após a redefinição de malha com o novo número de pontos lagrangianos N_L , utiliza-se a técnica da interpolação spline cúbica paramétrica circular. Assim, recalcula-se o novo comprimento de arco L_b , e, a partir daí, obtém-se $\Delta s_n = \frac{L_b}{N_L}$. Com o novo parâmetro Δs_n obtém-se um conjunto de funções cúbicas que representam o conjunto de pontos que compõe a interface lagrangiana. Com este procedimento, garante-se que $\Delta s_1 = \Delta s_2 = \dots = \Delta s_{N_L}$, isto é, uma distribuição uniforme dos pontos lagrangianos.

4.7 Método VOF

Nesta seção, apresenta-se a discretização do modelo matemático proposto para o método VOF. Como descrito no capítulo 3, o método VOF utiliza a função coloração $f_c(x, y, t)$ para indicar a quantidade fracional de fluido presente em uma determinada posição (x, y) no tempo t . Primeiramente, será apresentado o artifício numérico para inicialização da função coloração. Após isso, a discretização da equação para advecção da interface será mostrado. Por fim, encontram-se os métodos para o cálculo da força de interface e para o cálculo da curvatura.

4.7.1 Inicialização da Função Coloração

A inicialização da função coloração é um artifício numérico necessário para o cálculo dos vetores normais no primeiro passo de tempo e para o posicionamento inicial da interface. Seja a malha apresentada pela Fig. 4.6. Primeiramente, faz-se o mapeamento em cada nó de colocação (i, j) para verificar se este pertence à célula da fase 1, da fase 2 ou a célula em

que intersecta a curva S . Este procedimento é baseado na função distância desta interface.

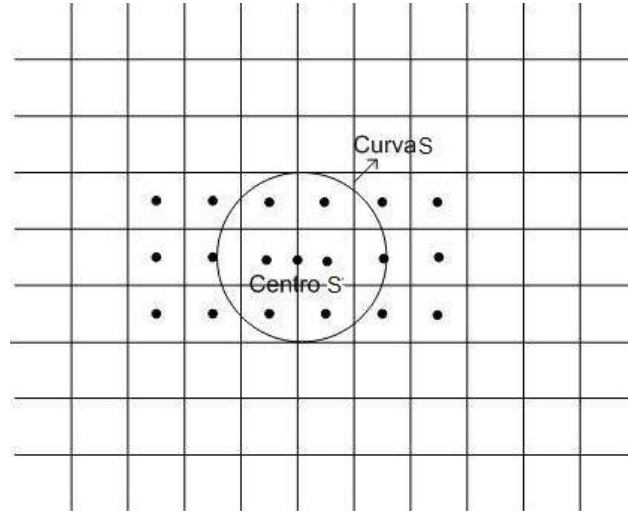


Figura 4.6: Representação da curva S sobre a malha de discretização do domínio.

Seja A^1 a área preenchida pelo fluido pertencente a fase 1 de cada célula (i, j) . Dessa maneira, para os pontos de colocação pertencentes a fase 1, $A^1 = \Delta x \Delta y$, onde Δx e Δy são os espaçamentos dos pontos de colocação. Para as células que pertencem a fase 2, $A^1 = 0$. Para as células que interceptam a curva S é necessário calcular a área A_1 de cada célula.

Observando a Fig. 4.7, nota-se que a célula (i, j) intercepta a curva S . Logo, redividindo a malha (i, j) em submalhas (Fig. 4.7), e baseando-se na função distância, verificaremos quais nós de colocação da submalha pertencem a fase 1. Dessa maneira, a área da célula (i, j) é dado pelo somatório de todas submalhas que pertencem a fase 1, ou seja, $A^1 = \sum_1^n ddx.d dy$, sendo $ddx = \Delta x / nnx$ e $ddy = \Delta y / nny$ os espaçamentos da submalha, nnx e nny são a quantidades de pontos da submalha e nn a quantidade de pontos que pertencem a fase 1.

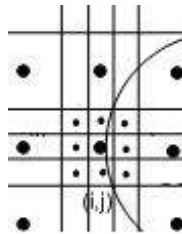


Figura 4.7: Representação esquemática da submalha.

Uma vez calculado o volume de cada célula, obtém-se, então, a fração de volume (fc),

dada pela Eq. 4.37.

$$fc = \frac{A^1}{A^{ce}}, \quad (4.37)$$

onde $A^{ce} = \Delta x \Delta y$, área total da célula (i, j) e A^1 é a porção de área pertencente a fase 1 de cada ponto de colocação.

4.7.2 Método VOF-PLIC

O método VOF consiste em duas etapas: reconstrução da interface e advecção da interface. O objetivo da reconstrução da interface utilizando o método *Piecewise Linear Interface* (PLIC) é encontrar uma equação da reta que satisfaça a conservação de massa na malha euleriana. Na etapa de advecção da interface o volume em cada célula, representado pela intersecção entre a célula computacional e a reta, é advectado e um novo volume é calculado (LISITA, 2015).

Reconstrução da interface

No método VOF-PLIC a interface é representada por uma reta em uma célula computacional 2D, Eq. 4.38. O problema pode ser resumido na determinação do vetor normal $\vec{\eta} = (\eta_x, \eta_y)$ e a constante α_{vof} da Eq. 4.38.

$$\eta_x x + \eta_y y = \alpha_{vof}, \quad (4.38)$$

onde α_{vof} é o parâmetro relacionado a menor distância entre a reta e a origem (GUEYFFIER et al., 1999) e $\vec{\eta} = \vec{\nabla} fc$.

Para o cálculo do vetor normal $\vec{\eta}$, utilizou-se o método de Youngs (GUEYFFIER et al., 1999) descrito nesta subseção. Obtido o vetor normal, o problema pode ser descrito como segue. Seja uma célula retangular de lados Δx e Δy no plano (x_1, x_2) , como descrito na Fig. 4.8, e uma reta EH com vetor normal $\vec{\eta}$. A idéia do problema de reconstrução é obter a área $ABFGD$ na Fig. 4.8 (GUEYFFIER et al., 1999).

Os pontos os quais intersectam com o eixos x_1 e x_2 são, respectivamente, α_{vof}/η_x e α_{vof}/η_y , são os pontos E e H da Fig. 4.8 e são obtidos através da Eq. 4.38. A área da região

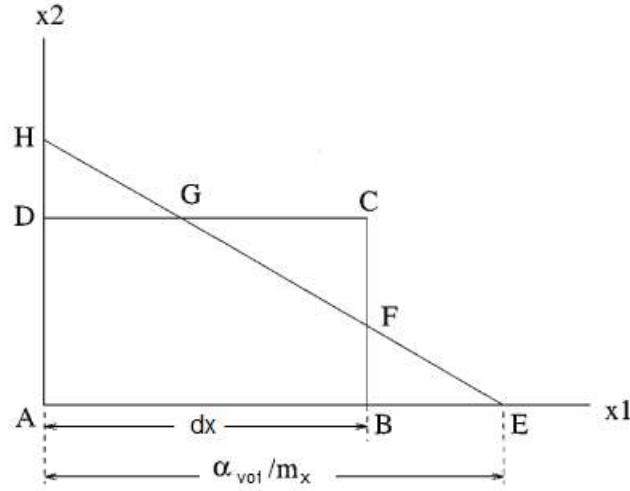


Figura 4.8: Representação da célula para a reconstrução da interface no método VOF-PLIC.

contida no retângulo $ABCD$ tem a expressão definida pela Eq. 4.39:

$$Area = \frac{\alpha_{vof}^2}{2n_x n_y} \left[1 - H(\alpha_{vof} - n_x \Delta x) \left(\frac{\alpha_{vof} - n_x \Delta x}{\alpha_{vof}} \right)^2 - H(\alpha_{vof} - n_y \Delta y) \left(\frac{\alpha_{vof} - n_y \Delta y}{\alpha_{vof}} \right)^2 \right], \quad (4.39)$$

onde Δx e Δy são os espaçamentos da malha. $H(x)$ é definido como,

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ 1 & \text{para } x > 1 \end{cases}. \quad (4.40)$$

Dado o vetor normal e o espaçamento da malha, o problema de reconstrução da interface baseia-se em encontrar o parâmetro α_{vof} através da Eq. 4.39, para uma dada área de corte. O próximo passo é encontrar a área a partir do novo α_{vof} .

Cálculo do vetor normal

A primeira parte da reconstrução da interface é obter o vetor normal, calculado pela Eq. 4.41.

$$\vec{\eta} = \vec{\nabla} f c \quad (4.41)$$

A discretização é feita por diferenças finitas centradas e calcula-se, primeiramente, os valores nos cantos da célula (Fig. 4.9, Eq. 4.42 e 4.43) e o valor no ponto central (i, j) é obtido através de uma média (Eq. 4.44).

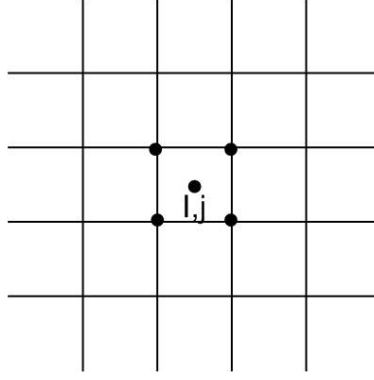


Figura 4.9: Representação esquemática da malha para o cálculo da normal.

$$\eta_{x,i+1/2,j+1/2} = \frac{1}{2\Delta x}(fc_{i+1,j} - fc_{i,j} + fc_{i+1,j+1} - fc_{i,j+1}), \quad (4.42)$$

$$\eta_{y,i+1/2,j+1/2} = \frac{1}{2\Delta y}(fc_{i,j+1} - fc_{i,j} + fc_{i+1,j+1} - fc_{i+1,j}), \quad (4.43)$$

$$\eta_{i,j} = \frac{1}{4}(\eta_{i+1/2,j-1/2} + \eta_{i-1/2,j-1/2} + \eta_{i+1/2,j+1/2} + \eta_{i-1/2,j+1/2}). \quad (4.44)$$

onde η é o vetor normal não-normalizado.

Advecção lagrangiana da interface

Após finalizar a reconstrução da interface, a função VOF necessita ser atualizada. Adotou-se o esquema de propagação lagrangiana usado por Sussman et al. (1999), o qual utiliza uma estratégia *split*, permitindo o avanço em cada direção separadamente. Sabendo-se que a equação da reta para um dado tempo t_n é dada por:

$$\eta_x^n x + \eta_y^n y = \alpha_{vof}^n. \quad (4.45)$$

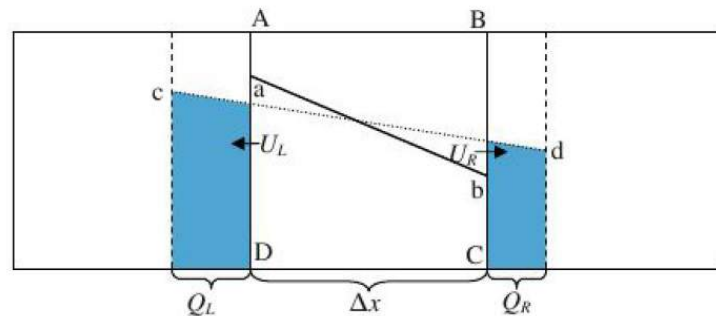


Figura 4.10: Advecção lagrangiana da interface. Fonte: (SILVEIRA NETO et al., 2010).

A advecção da interface em todas as direções é realizada de forma similar, dessa maneira será descrita para a direção x . A componente x de velocidade em uma célula $ABCD$ (Fig. 4.10) é dada por uma interpolação linear:

$$u(x) = \frac{U_R - U_L}{\Delta x}x + U_L = Ax + B, \quad (4.46)$$

onde U_R e U_L são as componentes x da velocidade nas faces das células, $A = \frac{U_R - U_L}{\Delta x}$ e $B = U_L$. O método pseudoespectral de Fourier trabalha com nós de colocação. Dessa maneira, as velocidades resultantes das soluções das equações de Navier-Stokes são obtidas em tais nós. Assim, para acoplar o método pseudoespectral de Fourier ao método VOF é necessário criar uma malha em que, no presente trabalho, os nós de colocação sejam os centros dessa malha. Dessa forma, interpolam-se as velocidades calculadas dos nós de colocação para as faces utilizando polinômio de Lagrange de quarta ordem (CHAPRA; CANALE, 1985).

Como a interface muda de posição, a coordenada x para cada ponto da interface no tempo $t_n + \Delta t$, é obtida com um método de Runge-Kutta de segunda ordem,

$$x^{(*)} = \left[1 + A\Delta t + \frac{1}{2}A^2(\Delta t)^2 \right] x^{(n)} + \frac{1}{2}AB(\Delta t)^2 + B\Delta t, \quad (4.47)$$

e $x^{(n)}$ pode ser obtida a partir da Eq. 4.48.

$$x^{(n)} = \frac{x^{(*)} - \left(\frac{1}{2}AB\Delta t^2 + B\Delta t \right)}{1 + A\Delta t + \frac{1}{2}A^2\Delta t^2}. \quad (4.48)$$

Substituindo-se a Eq. 4.48 na Eq. 4.45, obtém-se uma nova equação da reta. Nas equações acima o símbolo $(*)$ é usado ao invés de $n+1$, para reforçar que o método utilizado é *split*. Após a advecção nas 2 direções, então $\alpha_{vof}^{(*)} = \alpha_{vof}^{(n+1)}$ e $\eta_i^{(*)} = \eta_i^{(n+1)}$.

4.7.3 Cálculo da força de interface

Neste trabalho, o cálculo do gradiente $\vec{\nabla}f$ é feito utilizando o método espectral de Fourier. Dessa maneira, a \vec{f}^{CSF} é obtida nos centros das células, respeitando o cálculo das equações de Navier-Stokes. Logo, tem-se:

$$\widehat{\vec{\nabla}f} = i\vec{k}\widehat{f}, \quad (4.49)$$

onde i é o número imaginário.

Devido a aproximação proposta na Eq. 3.25, podemos escrever no espaço espectral de Fourier a Eq. 4.49:

$$\widehat{f^{CSF}} \approx \sigma \kappa \vec{k} \widehat{f}, \quad (4.50)$$

4.7.4 Cálculo da curvatura

O método utilizado para calcular a curvatura é denominado CELESTE (*curvature evaluation with least-squares fit of Taylor expansion*) (DENNER F.; WACHEM, 2014). Este método é baseado na expansão da série de Taylor de segunda ordem da função coloração em um ponto de colocação de vizinhança Q . A expansão da série de Taylor de segunda ordem é dada pela Eq. 4.51:

$$fc^Q = fc^P + \sum_i \left. \frac{\partial fc}{\partial x_i} \right|_P (x_{i,Q} - x_{i,P}) + \sum_i \sum_j \left. \frac{\partial^2 fc}{\partial x_i \partial x_j} \right|_P \frac{(x_{i,Q} - x_{i,P})(x_{j,Q} - x_{j,P})}{2} + O(\Delta x^3, \Delta y^3) \quad (4.51)$$

onde i e j denotam os dois eixos coordenados.

Existem 6 termos desconhecidos necessitando de 6 pontos em torno da célula central P . No entanto, a escolha dos 6 pontos devem ocorrer de modo a obter um estêncil simétrico. Na prática, este fato não é possível, e então um sistema de equações sobredeterminado é obtido.

Com o intuito de determinar os gradientes desconhecidos, um sistema linear $AM = B$ é construído e resolvido com o algoritmo dos mínimos quadrados. Os coeficientes $(x_Q - x_P)$ são os termos que constituem a matriz A e os valores conhecidos da célula P e dos vizinhos Q são os termos da matriz B , logo:

$$A = \begin{pmatrix} \Delta x^1 & \Delta y^1 & \frac{1}{2}(\Delta x^1)^2 & \frac{1}{2}(\Delta y^1)^2 & \frac{1}{2}(\Delta x^1 \Delta y^1) \\ \Delta x^2 & \Delta y^2 & \frac{1}{2}(\Delta x^2)^2 & \frac{1}{2}(\Delta y^2)^2 & \frac{1}{2}(\Delta x^2 \Delta y^2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Delta x^N & \Delta y^N & \frac{1}{2}(\Delta x^N)^2 & \frac{1}{2}(\Delta y^N)^2 & \frac{1}{2}(\Delta x^N \Delta y^N) \end{pmatrix}, \quad (4.52)$$

$$M = \begin{pmatrix} \frac{\partial fc}{\partial x} & \frac{\partial fc}{\partial y} & \frac{\partial^2 fc}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 fc}{\partial y^2} & \frac{\partial^2 fc}{\partial x \partial y} \end{pmatrix}, \quad (4.53)$$

$$B = \begin{pmatrix} \Delta f c^1 \\ \Delta f c^2 \\ \dots \\ \Delta f c^N \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

onde $\Delta x^N = (x_F - x_P)$, $\Delta y^N = (y_F - y_P)$ e $\Delta f c^N = (C_F - C_P)$ e o subíndice N significa o n -ésimo ponto da vizinhança. Este sistema possui uma única solução se $N = 6$. Na prática, 9 vizinhos são necessários para obter um estêncil simétrico.

As componentes do vetor normal são calculadas através das equações:

$$\eta_x = \left. \frac{\partial f c}{\partial x} \right|_P, \quad (4.55)$$

$$\eta_y = \left. \frac{\partial f c}{\partial y} \right|_P. \quad (4.56)$$

Para o cálculo da curvatura, uma vez calculado o vetor normal, basta resolver a Eq. 4.57.

$$\kappa = \left. \frac{\partial \eta}{\partial x} \right|_P + \left. \frac{\partial \eta}{\partial y} \right|_P \quad (4.57)$$

Para resolução da Eq. 4.57 tem-se que resolver as derivadas $\left. \frac{\partial \eta}{\partial x} \right|_P$ e $\left. \frac{\partial \eta}{\partial y} \right|_P$. Isso foi realizado de forma análoga ao procedimento de cálculo das componentes do vetor normal utilizando a expansão de série de Taylor.

4.8 Algoritmo da metodologia IMERSPEC

Nesta seção é apresentado o algoritmo computacional para a metodologia IMERSPEC de acordo com os fundamentos apresentados nas seções anteriores. O algoritmo será apresentado em duas etapas: primeiramente para a metodologia IMERSPEC - FT e, em seguida, a sequência computacional para a metodologia IMERSPEC - VOF.

4.8.1 Metodologia IMERSPEC - FT

- 1- Inicializa-se os campos de velocidade, $u_l(\vec{x}, t)$ no espaço físico em $t = 0$;

2- Calcula-se o vetor posição da interface imersa, representado pelos pontos lagrangianos, o vetor \vec{X} em $t = 0$;

3- Aplica-se a DFT, utilizando o algoritmo da FFT, sobre os campos de velocidades, $u_l(\vec{x}, t)$, obtendo os campos de velocidades transformados $\widehat{u}_l(\vec{k}, t)$ no tempo $t = 0$;

4- Calcula-se os parâmetros geométricos, vetor normal unitário e a curvatura, para o cálculo da função indicadora e da força lagrangiana em $t = 0$;

5- Calcula-se a função indicadora e força lagrangiana em $t = 0$;

6- Calcula-se as propriedades físicas variáveis ρ e μ ;

Início do laço do tempo

7- Obtém-se a nova posição dos pontos lagrangianos resolvendo a Eq. 3.18 e, caso necessário, redistribua os pontos lagrangianos obtidos de modo que estejam equidistantes;

8- Calcula-se os parâmetros geométricos, vetor normal unitário e a curvatura, da interface deslocada;

9- Calcula-se a função indicadora e força lagrangiana em $t = t + \Delta t$

10- Calcula-se os termos difusivo, advectivo e termo empuxo do lado direito dos campos de velocidades (\widehat{RHS}_l), Eqs. 3.47;

11- Aplica-se o esquema de avanço temporal, RK46, para calcular $\widehat{u}_l^*(\vec{k}, t)$ em $t + \Delta t$;

12- Calcula-se as forças lagrangianas para as condições de contorno de Dirichlet utilizando a metodologia da fronteira-imersa;

13-Atualiza a velocidade $\widehat{u}_l^*(\vec{k}, t)$ somando as forças lagrangianas para as condições de contorno de Dirichlet, encontrando a velocidade $u_l(\vec{k}, t)$ em $t + \Delta t$;

14- Utilize o método de projeção nos campos de velocidades obtidos no item 11, com a finalidade de garantir a conservação de massa;

15- Avança-se no tempo;

16- Retorna ao item 7 até o fim do loop do tempo;

Fim do laço do tempo

4.8.2 Metodologia IMERSPEC - VOF

1- Inicializa-se os campos de velocidade, $u_l(\vec{x}, t)$ no espaço físico em $t = 0$;

2- Inicializa-se a função coloração fc ;

3- Aplica-se a DFT, utilizando o algoritmo da FFT, sobre os campos de velocidades, $u_l(\vec{x}, t)$, obtendo os campos de velocidades transformados $\hat{u}_l(\vec{k}, t)$ no tempo $t = 0$;

4- Calcula-se os parâmetros geométricos, vetor normal unitário e a curvatura, para a advecção da função coloração e para o cálculo da força lagrangiana em $t = 0$;

5- Calcula-se a força lagrangiana em $t = 0$;

6- Calcula-se as propriedades físicas variáveis ρ e μ ;

Início do laço do tempo

7- Advecção-se a função coloração, de forma split, como descrito nesse capítulo;

8- Calcula-se a curvatura, da interface deslocada;

9- Calcula-se força lagrangiana em $t = t + \Delta t$;

10- Calcula-se os termos difusivo, advectivo e termo empuxo do lado direito dos campos de velocidades (\widehat{RHS}_l), Eqs. 3.47;

11- Aplica-se o esquema de avanço temporal, RK46, para calcular $\hat{u}_l^*(\vec{k}, t)$ em $t + \Delta t$;

12- Calcula-se as forças lagrangianas para as condições de contorno de Dirichlet utilizando a metodologia da fronteira-imersa;

13-Atualiza a velocidade $\hat{u}_l^*(\vec{k}, t)$ somando as forças lagrangianas para as condições de contorno de Dirichlet, encontrando a velocidade $u_l(\vec{k}, t)$ em $t + \Delta t$;

14- Utilize o método de projeção nos campos de velocidades obtidos no item 11, com a finalidade de garantir a conservação de massa;

15- Avança-se no tempo;

16- Retorna ao item 7 até o fim do loop do tempo;

Fim do laço do tempo

CAPÍTULO V

RESULTADOS

O presente capítulo apresenta os resultados obtidos para verificação do código IMERSPEC com variações de propriedades físicas. Após isso, testes numéricos para verificações da implementação do método de representação da interface, *Volume of fluid* e *Front tracking*, no código IMERSPEC foram realizadas. Em seguida, validou-se o código através de resultados para ascensão de uma única bolha.

5.1 Verificação do código computacional bidimensional IMERSPEC com variação de propriedades físicas

Verificação do código é uma análise do programa computacional desenvolvido que consiste em garantir que as equações escolhidas para um dado modelo estão sendo resolvidas corretamente e em quantificar o erro numérico da solução. Utiliza-se, para essa finalidade, um problema de natureza puramente matemática, o qual admite uma solução exata. Este tipo de solução exata pode ser obtida através do método das soluções manufaturadas (MMS), o qual se baseia na introdução de termos fontes nas equações diferenciais. Este termo fonte é então determinado a partir da solução proposta para o sistema de equações diferenciais parciais (DA SILVA; VILLAR, 2010).

A verificação do código IMERSPEC com variação de propriedades físicas foi realizada utilizando a técnica MMS. Para propriedades físicas constantes os resultados da verificação

encontram-se em Mariano (2011). As equações de Navier-Stokes assumem a forma:

$$\rho \left[\frac{\partial u_l}{\partial t} + \frac{\partial u_l u_k}{\partial x_k} \right] = -\frac{\partial p}{\partial x_l} + \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \right] \right) + f_l, \quad (5.1)$$

onde o termo gravitacional foi desprezado e nota-se acréscimo do termo forçante f_l .

As equações exatas adaptado de Nós (2007) para simulações bidimensionais são dadas por:

$$u^e(x_l, t) = \sin^2(2\pi x + 2\pi y + t), \quad (5.2)$$

$$v^e(x_l, t) = \cos^2(2\pi x + 2\pi y + t), \quad (5.3)$$

$$p^e(x_l, t) = \cos(2\pi x + 2\pi y + t), \quad (5.4)$$

onde u e v são os campos de velocidade horizontal e vertical, respectivamente, p é o campo de pressão, e o superíndice e indica que a solução é exata, nos quais $0 \leq t \leq 5$ [s], passo de tempo $\Delta t = 1,0 \times 10^{-6}$ e $(x, y) = x_l \in [0, 1] \times [0, 1]$.

As componentes do termo fonte são dadas por:

$$\begin{aligned} f_x = & \rho^e \left[\frac{\partial u^e}{\partial t} + (u^e, v^e) \cdot \left(\frac{\partial u^e}{\partial x}, \frac{\partial u^e}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial p^e}{\partial x} \\ & - \left[\mu^e \nabla^2 u^e + 2 \left(\frac{\partial u^e}{\partial x} \frac{\partial \mu^e}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial u^e}{\partial y} + \frac{\partial v^e}{\partial x} \right) \frac{\partial \mu^e}{\partial y} \right], \end{aligned} \quad (5.5)$$

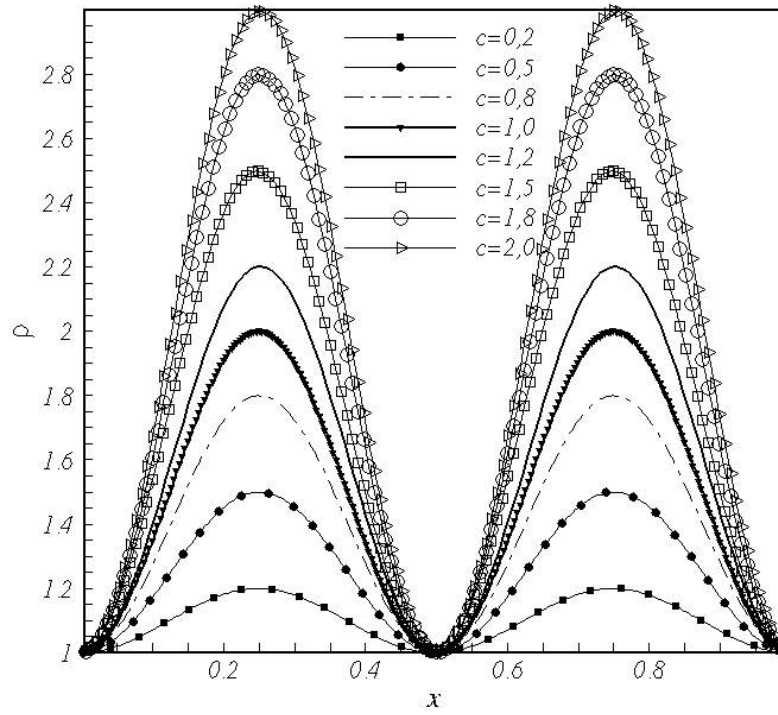
$$\begin{aligned} f_y = & \rho^e \left[\frac{\partial v^e}{\partial t} + (u^e, v^e) \cdot \left(\frac{\partial v^e}{\partial x}, \frac{\partial v^e}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial p^e}{\partial y} \\ & - \left[\mu^e \nabla^2 v^e + 2 \left(\frac{\partial v^e}{\partial y} \frac{\partial \mu^e}{\partial y} \right) + \left(\frac{\partial v^e}{\partial x} + \frac{\partial u^e}{\partial y} \right) \frac{\partial \mu^e}{\partial x} \right]. \end{aligned} \quad (5.6)$$

As condições iniciais são $u(x_l, 0) = u^e(x_l, 0)$, $v(x_l, 0) = v^e(x_l, 0)$, ρ^e é a massa específica analítica (Eq. 5.7) e μ^e é a viscosidade dinâmica analítica (Eq. 5.8).

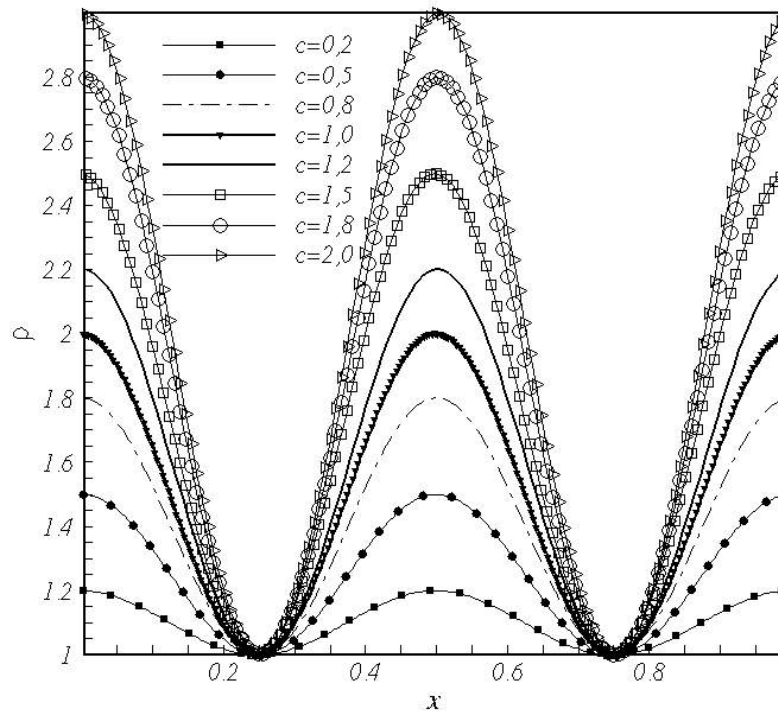
$$\rho^e(x, t) = 1 + c[\sin^2(2\pi x + 2\pi y + t)], \quad (5.7)$$

$$\mu^e(x, t) = 1 + c[\cos^2(2\pi x + 2\pi y + t)]. \quad (5.8)$$

As propriedades físicas ρ^e e μ^e variam de acordo com a constante c , Eqs. 5.7 e 5.8. A medida que aumenta o valor de c nota-se um aumento da amplitude das variáveis ρ^e e μ^e . Na Fig. 5.1 verifica-se tal fato. A ideia é observar a influência do aumento da amplitude no código IMERSPEC, uma vez que a metodologia é sensível a este tipo de comportamento como evidenciado no cap. 3.



(a)



(b)

Figura 5.1: Variação das propriedades físicas com 128×128 nós de colocação em $t = 5$ [s]:

(a) ρ ; (b) μ .

Para comparar a solução analítica com a solução numérica calculou-se o erro, usando a norma L_2 , dada pela Eq. 5.9:

$$L_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} (\psi_{ij}^e - \psi_{ij})^2}{N_x N_y}}, \quad (5.9)$$

onde ψ representa as variáveis analisadas, que no presente trabalho podem ser as componentes de velocidades (u e v) ou a pressão p , N_x e N_y são os números de nós de colocação em cada direção.

Na Tab. 5.1 os resultados apresentados foram simulados para um valor $c = 0,1$ em um domínio $[0, 1] \times [0, 1]$. Nota-se que os erros dado pela norma L_2 (Eq. 5.9) obtidos para malhas uniformes e com condições de contorno periódica, como descrito anteriormente, para as variáveis u , v e p , alcança erro de truncamento de máquina utilizando dupla precisão, o que demonstra a alta acurácia do método pseudoespectral de Fourier.

Nas figs. 5.2 (a) e (b) tem-se o campo de velocidade u e pressão p e nas figs. 5.3 (a) e (b), o campo de viscosidade (μ) e massa específica (ρ), respectivamente, em $t = 0$ [s] com 256×256 nós de colocação.

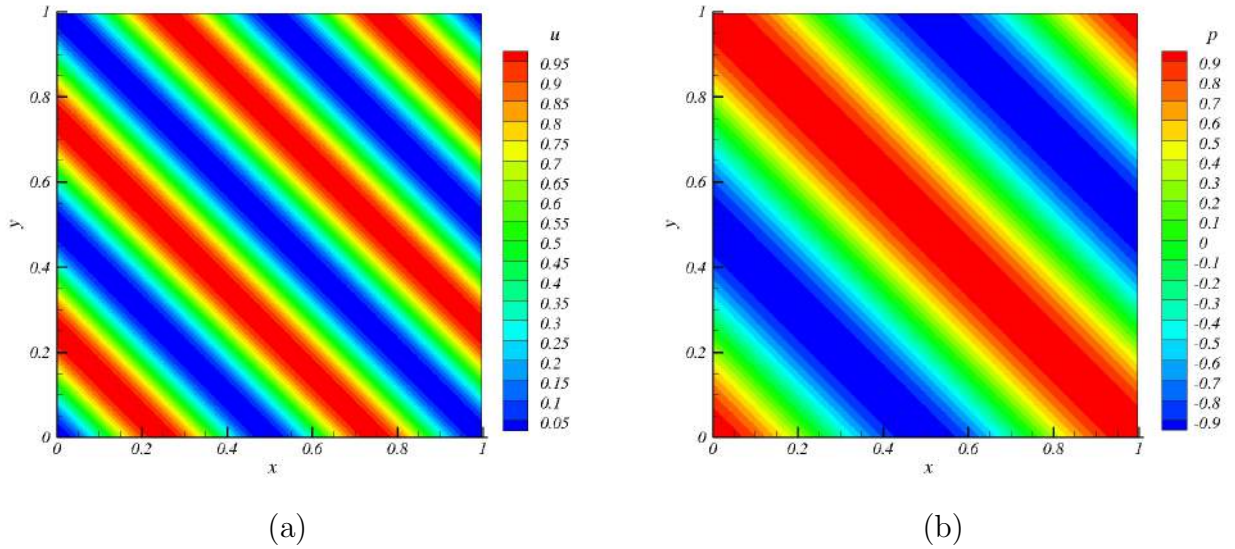


Figura 5.2: Campos em $t = 0$ [s] com 256×256 nós de colocação: (a) velocidade u ; (b) pressão p .

Na Tab. 5.2 fixou-se os nós de colocação em uma malha 128×128 , variou o valor c de 0,2 a 2,0, e verificou-se o comportamento do erro dado pela norma L_2 quando aumenta a

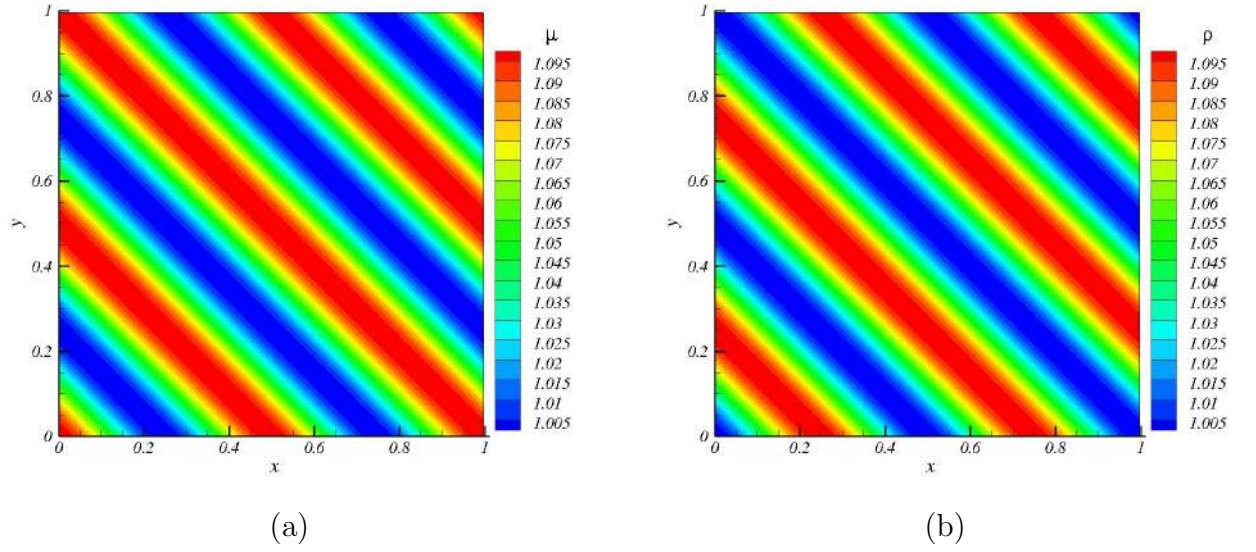


Figura 5.3: Propriedades físicas em $t = 0$ [s] com 256×256 nós de colocação: (a) viscosidade μ ; (b) massa específica ρ .

Tabela 5.1: Norma L_2 para u , v e p com ρ e μ variáveis em $t = 5$ [s] e $c = 0, 1$.

Malha	Variável	Norma L_2
16×16	u	$8,0569 \times 10^{-15}$
	v	$8,0599 \times 10^{-15}$
	p	$6,0927 \times 10^{-15}$
32×32	u	$5,3265 \times 10^{-15}$
	v	$5,3222 \times 10^{-15}$
	p	$3,9150 \times 10^{-15}$
64×64	u	$1,5811 \times 10^{-15}$
	v	$1,5637 \times 10^{-15}$
	p	$2,7136 \times 10^{-15}$
128×128	u	$1,1230 \times 10^{-15}$
	v	$1,1084 \times 10^{-15}$
	p	$2,9079 \times 10^{-15}$
256×256	u	$3,6908 \times 10^{-16}$
	v	$3,6052 \times 10^{-16}$
	p	$4,2561 \times 10^{-15}$

amplitude de variação das propriedades físicas, ρ e μ . Com isso, demonstrou-se que para valores de c até 1,5 a metodologia IMERSPEC apresentou boa convergência numérica. Porém, para $c = 1,8$ apresentou-se um aumento do erro da norma L_2 , não obtendo a convergência espectral. Para $c = 2,0$ a metodologia IMERSPEC não alcançou convergência, mostrando que o método é sensível ao aumento da amplitude de variação de propriedades físicas.

Tabela 5.2: Norma L_2 para u , v e p com ρ e μ variáveis em $t = 5[s]$ utilizando 128×128 nós de colocação e variando a constante c .

Variação das propriedades físicas ρ e μ	Variável	Norma L_2
0,2	u	$2,092 \times 10^{-15}$
	v	$2,077 \times 10^{-15}$
	p	$3,514 \times 10^{-15}$
0,5	u	$2,2273 \times 10^{-15}$
	v	$2,2148 \times 10^{-15}$
	p	$3,9817 \times 10^{-15}$
0,8	u	$2,2309 \times 10^{-15}$
	v	$2,2412 \times 10^{-15}$
	p	$2,7652 \times 10^{-15}$
1,0	u	$2,8800 \times 10^{-15}$
	v	$2,1705 \times 10^{-15}$
	p	$5,0908 \times 10^{-15}$
1,2	u	$2,4125 \times 10^{-15}$
	v	$2,4331 \times 10^{-15}$
	p	$5,1887 \times 10^{-15}$
1,5	u	$2,7949 \times 10^{-15}$
	v	$2,7779 \times 10^{-15}$
	p	$8,9637 \times 10^{-15}$
1,8	u	$9,1161 \times 10^{-5}$
	v	$8,9404 \times 10^{-5}$
	p	$1,4783 \times 10^{-3}$
2,0	u	não convergiu
	v	não convergiu
	p	não convergiu

5.2 Testes de regularização da malha lagrangiana

O método FT representa a interface através de uma malha, denominada lagrangiana. Para que se tenha uma boa representação desta fina interface que separa as fases do escoamento, é necessário que os pontos que pertencem a essa malha estejam distribuídos,

respeitando a quantidade de dois pontos lagrangianos por célula euleriana (VILLAR, 2007). Desta maneira, este procedimento é composto de duas etapas: redefinição da malha e equidistribuição dos pontos Lagrangianos. O método utilizado em ambos os processos encontra-se descrito no capítulo 4 (seção 4.6.5).

Para testar a eficiência da metodologia de redefinição da malha e equidistribuição dos pontos lagrangianos, a interface é submetida a um campo de velocidade cisalhante de valor unitário em um domínio $\Omega = [0;1] \times [0;1]$ em uma malha uniforme com 512×512 nós de colocação, permitindo que metade da interface se desloque (Fig. 5.4).

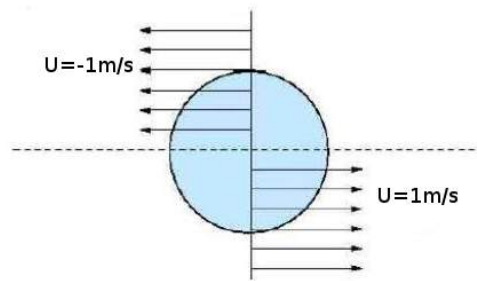
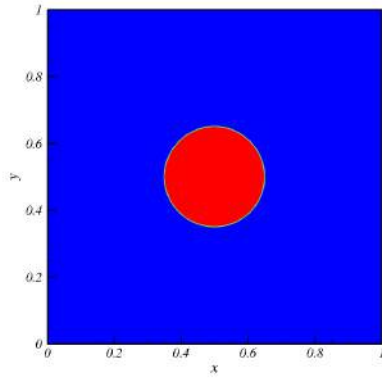


Figura 5.4: Representação esquemática do teste de cisalhamento da interface lagrangiana.

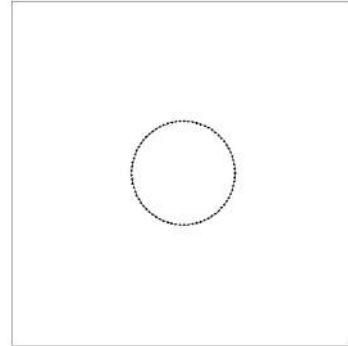
Na fig. 5.5 ilustra-se, através da função indicadora, a deformação da interface ao longo do tempo e mostra-se a distribuição dos pontos lagrangianos, quando esta é submetida a uma deformação. Nota-se que os pontos são inseridos e redistribuídos, de forma a ter uma uniformidade ao longo do tempo. Entretanto, observa-se pequenas oscilações nas extremidades na interface, pois a interface desloca-se bruscamente, ocasionando tais oscilações. Porém, estas não são amplificadas o que não afeta a representação da interface.

Na Fig. 5.6 é feito um comparativo de uma interface com e sem o procedimento de redefinição da malha. Observa-se a importância de manter os pontos uniformemente distribuídos, uma vez que na Fig. 5.6 (b) apresentam-se oscilações na posição dos pontos lagrangianos que definem a geometria, o que ocasiona instabilidades numéricas em toda solução.

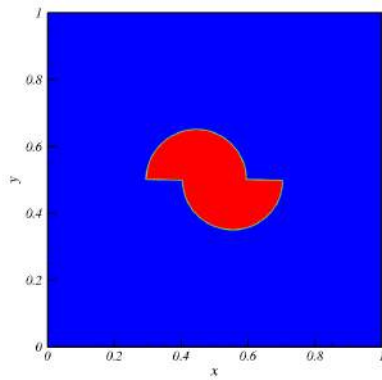
Neste teste adotou-se quatro pontos lagrangianos por célula euleriana. O espaçamento entre os pontos lagrangianos inicial, Δs_i , calculado para interface em $t = 0,0$ [s], é o valor esperado para que se mantenha o espaçamento entre os pontos lagrangianos ao longo do



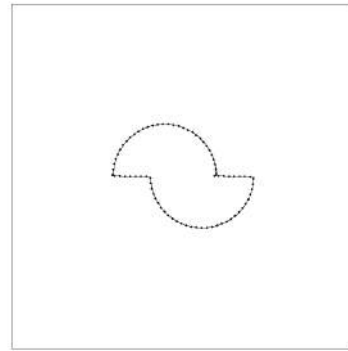
(a)



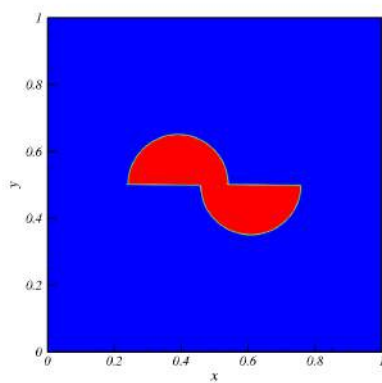
(b)



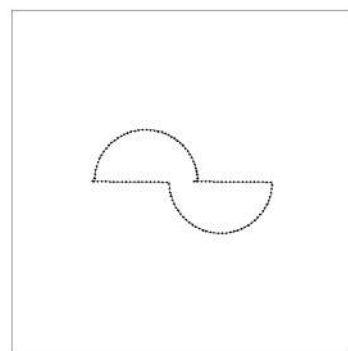
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 5.5: Evolução temporal do campo da função indicadora: (a) e (b) em $t = 0,00$ [s]; (c) e (d) em $t = 0,02$ [s]; (e) e (f) $t = 0,10$ [s].

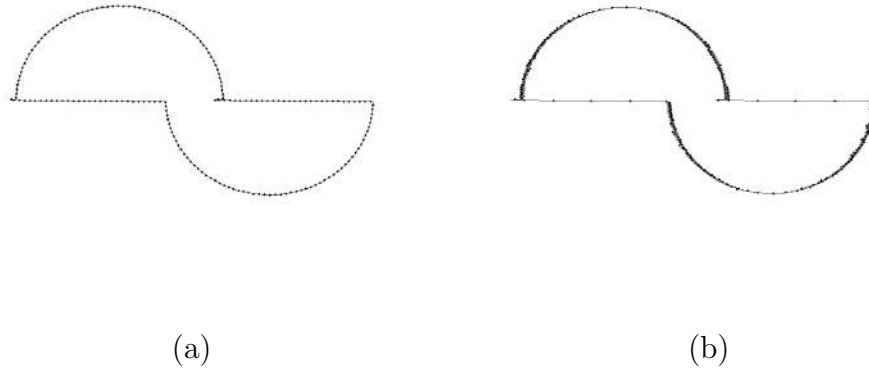


Figura 5.6: Comparação de uma interface: (a) com redefinição da malha Lagrangiana em $t = 0, 10$ [s]; (b) sem redefinição da malha lagrangiana em $t = 0, 10$ [s].

tempo, após realizar o procedimento de redefinição da malha e equidistribuição dos pontos Lagrangianos.

Na Fig. 5.7 apresenta o Δs da interface ao longo do tempo e o valor esperado Δs_i . Isso demonstra a boa eficiência que o método implementado para redefinição da malha e equidistribuição dos pontos Lagrangianos possui, devido a baixa dispersão obtido em relação ao valor esperado Δs_i .

5.3 Verificação da inicialização da função coloração

O procedimento de inicialização da função coloração foi apresentado no Cap. 4 (seção 4.7.1). Adotou-se neste teste $nm_x = nny = 1000$ pontos de colocação da submalha. Para verificação da implementação deste algoritmo, duas curvas foram inicializadas: circunferência e elipse. A Fig.5.8 (a) mostra a inicialização da curva circunferência e na Fig. 5.8 (b), curva elipse. Para análise quantitativa deste procedimento comparou-se a área obtida da inicialização com a área determinada analiticamente, e quantificou-se através do cálculo do erro relativo (Eq. 5.10):

$$E_a = \frac{\phi^n - \phi^a}{\phi^a}, \quad (5.10)$$

onde ϕ^n é a solução numérica e ϕ^a é a solução analítica.

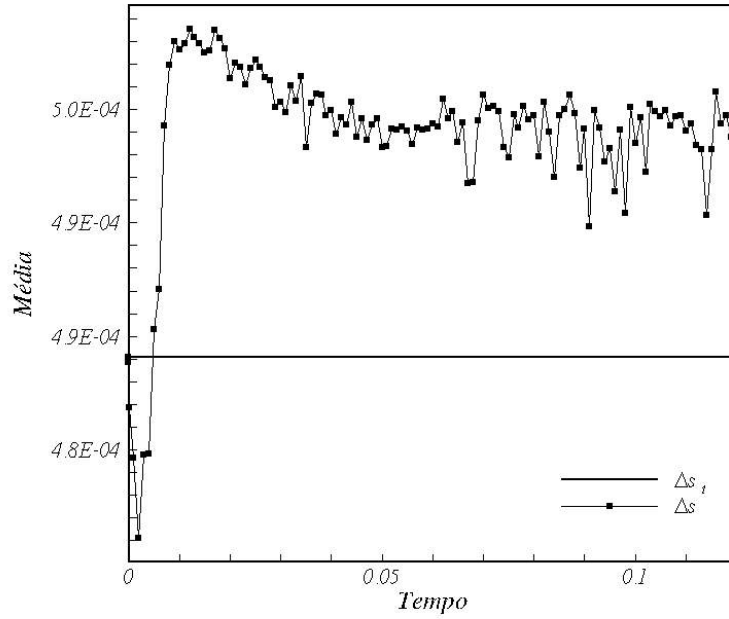


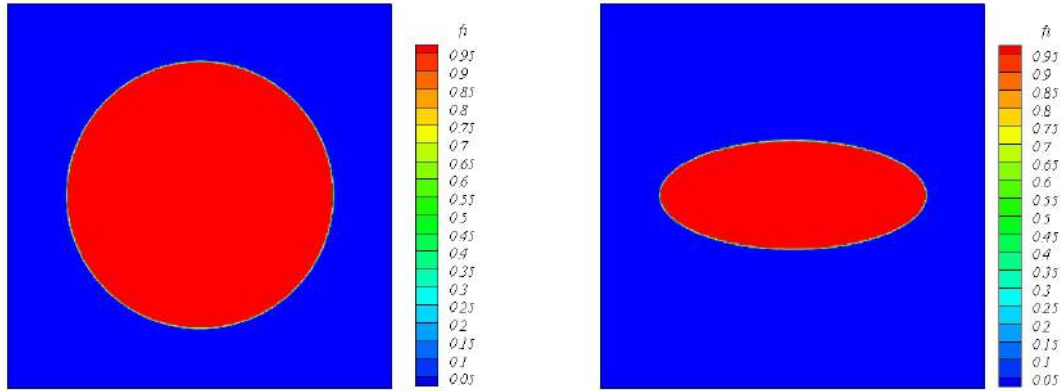
Figura 5.7: Média de Δs_i e Δs ao longo do tempo.

O resultado desta análise é apresentado na Fig 5.9. Nota-se um erro na ordem de aproximadamente de 10^{-4} , próximo dos valores de erro apresentado por Lisita (2015) para a inicialização de uma esfera. Além disso, em ambos os casos obteve-se uma taxa de convergência da ordem de Δx .

5.4 Verificação do cálculo da normal

Para verificação da discretização e implementação do cálculo da normal, importante para a reconstrução da interface no método VOF, é realizada uma comparação com o valor analítica e com o trabalho de Gueyffier et al. (1999).

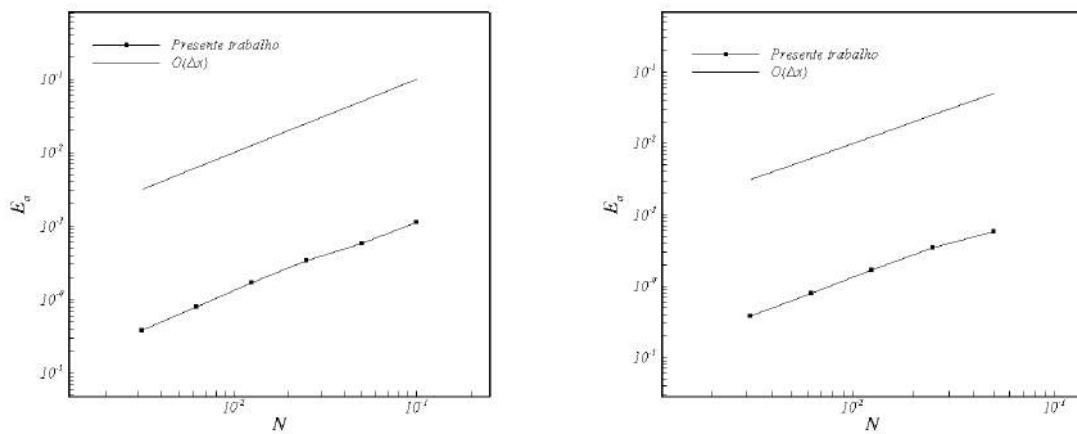
A Tabela 5.3 apresenta o erro da norma L_1 em função do refinamento da malha para a curva elipse. O resultado do presente trabalho foi comparado com os resultados de Gueyffier et al. (1999) e observa-se que os resultados aqui apresentados estão de acordo com os dados da literatura.



(a)

(b)

Figura 5.8: Representação gráfica da função coloração: (a) de uma circunferência e (b) de uma elipse.



(a)

(b)

Figura 5.9: Erro relativo da função coloração: (a) de uma circunferência e (b) de uma elipse.

Tabela 5.3: Erro da norma L_1 do presente trabalho e de Gueyffier et al. (1999).

Malha $nx \times ny$	Presente trabalho	Gueyffier et al. (1999)
10×10	$E = 9,77 \times 10^{-3}$	$E = 3,86 \times 10^{-3}$
20×20	$E = 3,47 \times 10^{-3}$	$E = 7,78 \times 10^{-4}$
40×40	$E = 8,85 \times 10^{-4}$	$E = 2,21 \times 10^{-4}$
80×80	$E = 3,63 \times 10^{-4}$	$E = 8,40 \times 10^{-5}$
160×160	$E = 1,65 \times 10^{-4}$	$E = 3,78 \times 10^{-5}$
320×320	$E = 8,52 \times 10^{-5}$	$E = 1,81 \times 10^{-5}$

5.5 Teste de conservação de massa

Para testar a conservação de massa utilizou-se dois testes comumente encontrados na literatura: disco de Zalesak e *Vortex-Flow*. O primeiro teste foi aplicado somente para VOF, enquanto que o segundo teste foi aplicado em ambos os métodos, FT e VOF. O intuito é verificar a conservação de massa em ambos os métodos. Para estes testes os dois fluidos são considerados invíscitos e de mesma massa específica, isso permite analisar os métodos de advecção da interface sem os efeitos do comportamento do fluido. É calculada a perda de massa definida pela Eq. 5.11.

$$E = \frac{\sum_{i=1}^N \phi_i^n - \sum_{i=1}^N \phi_i^0}{\sum_{i=1}^N \phi_i^0}, \quad (5.11)$$

onde ϕ_i^0 é a área inicial e ϕ_i^n é a área final da interface.

5.5.1 Disco de Zalesak

O disco de Zalesak (ZALESAK, 1979) consiste de um disco vazado centrado em $X_c = (2,0;2,75)$ e de raio $0,5 \text{ m}$. Um campo de velocidade dado por:

$$u = -\omega(y - y_0) \quad (5.12)$$

$$v = \omega(x - x_0),$$

onde $(x_0, y_0) = (2,0;2,0)$ é o centro de rotação e ω é a velocidade angular de $0,5 \text{ rad/s}$, a qual é imposta. O tamanho do domínio utilizado é $D = (0,0;4,0) \times (0,0;4,0)$ com uma malha uniforme de 200×200 pontos de colocação.

A trajetória realizada pelo disco no sentido horário é apresentada na Fig. 5.10. Uma rotação completa do disco corresponde a 2524 passos de tempo, e foi utilizado um CFL de

0,25, vide Eq. 4.19. A condição inicial é apresentada na Fig. 5.11(a). Resultados para a advecção utilizando-se o método VOF-PLIC após uma rotação são mostrados na Fig. 5.11 (b) e na Tabela 5.4 tem-se o erro geométrico ε (Eq. 5.13) comparado com o resultado de Gopala and Wachem (2008), o que demonstra a boa acurácia do método apresentado no presente trabalho. A perda de massa após uma rotação é de $5,102 \times 10^{-15}$.

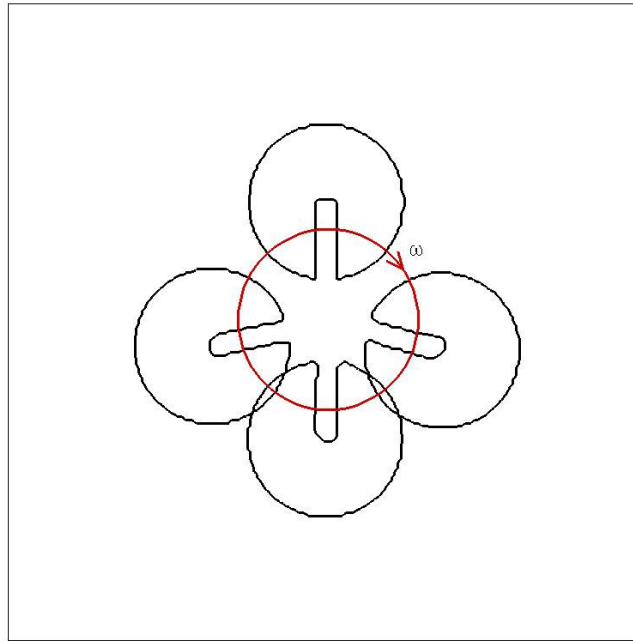


Figura 5.10: Trajetória em sentido horário do disco de Zalesak.

O erro geométrico é dado pela equação:

$$\varepsilon = \frac{\sum_{i,j} \|fc_i^n - fc_i^0\|}{\sum_{i,j} fc_i^0}, \quad (5.13)$$

onde fc^n é a função coloração após n iterações e fc^0 é a função coloração inicial.

Tabela 5.4: Cálculo do erro geométrico.

PLIC (Gopala and Wachem (2008))	PLIC (Código IMERSPEC-VOF)
0,176	0,077

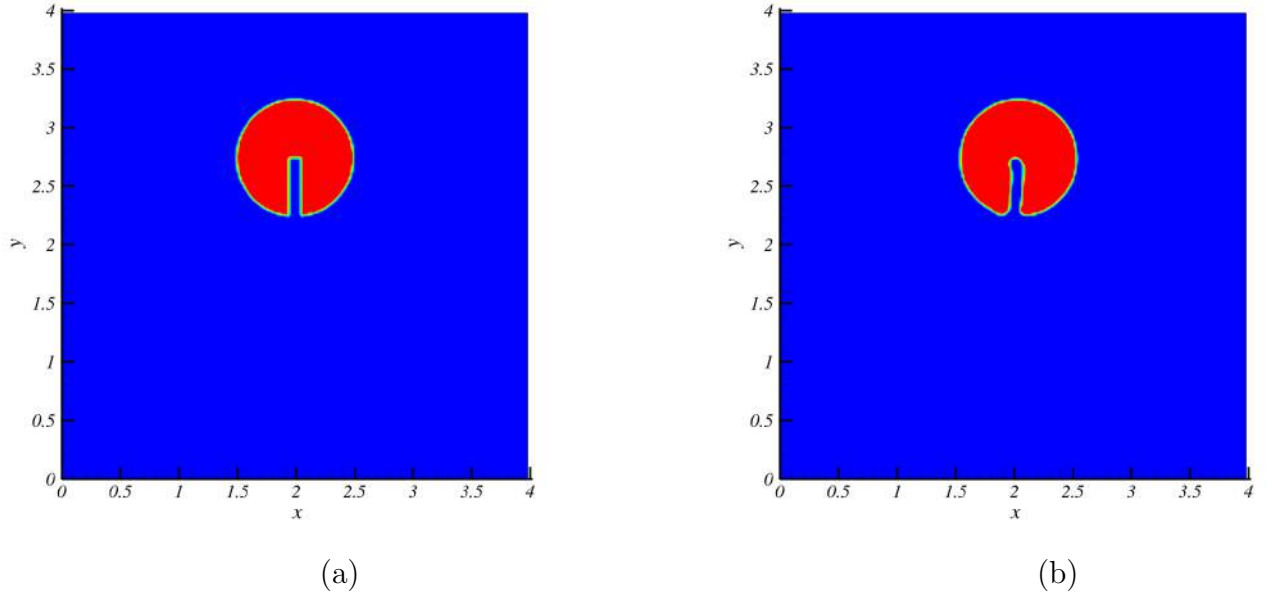


Figura 5.11: Configuração do teste de Zalesak em: (a) $t = 0$ e (b) $t = 0,25$.

5.5.2 Vortex-Flow

O teste de *vortex-flow* consiste em iniciar com uma interface circular, a qual sofre um estiramento (CENICEROS et al., 2010; SILVEIRA NETO et al., 2010). Esta deformação da interface é gerada através do campo de velocidade dado pela função corrente:

$$\psi(t, x, y) = \frac{1}{\pi} \sin(\pi x)^2 \sin(\pi y)^2 \cos(\pi t/T), \quad (5.14)$$

onde T é o período após o qual a interface retorna à sua forma inicial e $u = \partial\psi/\partial y$, $v = -\partial\psi/\partial x$.

O teste de *vortex-flow* é utilizado para verificar quantitativamente a conservação de massa. Além disso, este teste é usado para validar a função indicadora no método FT e a função coloração no método VOF com o intuito de certificar se ambos os métodos acompanham a deformação presente, definindo as propriedades de cada fluido de forma correta.

O domínio computacional é $[0, 1] \times [0, 1]$. A interface, inicialmente circular, tem raio de $0,15 [m]$ e está centrada em $(0,50; 0,75)$ e $T = 8 [s]$ (CENICEROS et al., 2010; SILVEIRA NETO et al., 2010). A malha euleriana é de 512×512 pontos de colocação. Na Fig. 5.12

tem-se o perfil horizontal do campo da função indicadora e da função coloração na altura do centro da interface. Nota-se a descontinuidade desta função e cabe ressaltar que apesar do salto, a função indicadora e a função coloração atingem o resultado esperado.

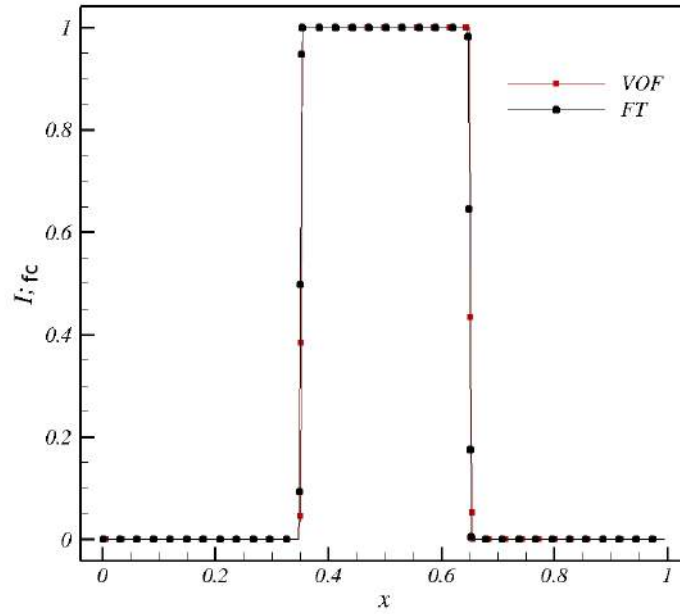


Figura 5.12: Perfil horizontal do campo da função indicadora e da função coloração em $t = 0$ [s] e $y = 0,75$ [m]: I (função indicadora para FT) e fc (função coloração).

Nas Figs. 5.13 apresentam-se a evolução temporal da simulação do *vortex flow*. A interface atinge a deformação máxima em $t = 4,0$ [s], e após isso ela volta a forma de origem. Nota-se o acompanhamento da função indicadora e da função coloração a medida que a interface deforma, o que valida a utilização destas funções, mostrando que qualitativamente estão corretas.

Além disso, na Fig. 5.14 mostra-se a importância de regularizar a distribuição dos pontos lagrangianos no caso da utilização do método FT. Nota-se na Fig. 5.14 (b) que os pontos lagrangianos tendem a se aglomerar em regiões de altas curvaturas, enquanto que nas regiões de menores curvaturas os pontos lagrangianos tendem a se distanciarem uns dos outros. Isso evidencia a necessidade de manter os pontos equidistribuídos, uma vez que, a má distribuição destes pontos, ocasiona baixa acurácia nos cálculos.

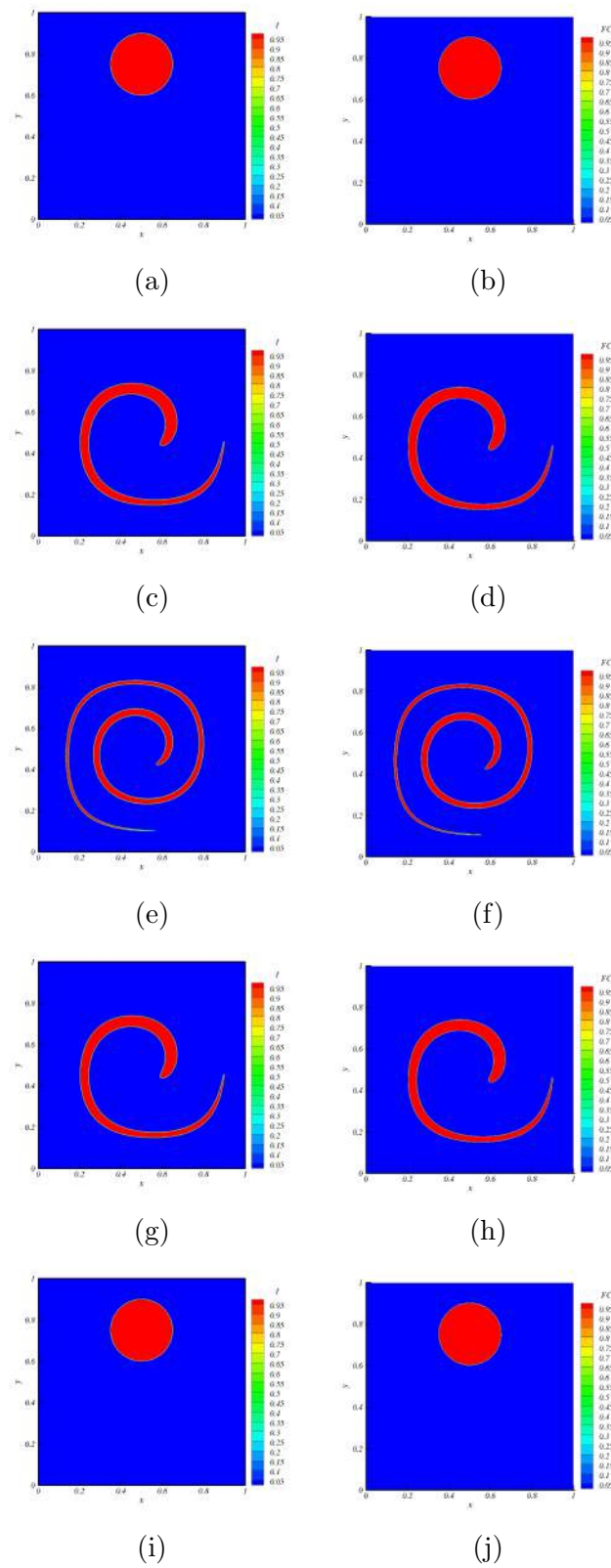


Figura 5.13: Evolução temporal do campo da função indicadora e do campo da função coloração: (a) FT e (b) VOF em $t = 0,0$ [s]; (c) FT e (d) VOF em $t = 1,5$ [s]; (e) FT e (f) VOF em $t = 4,0$ [s]; (g) FT e (h) VOF em $t = 6,5$ [s]; (i) FT e (j) VOF em $t = 8,0$ [s].

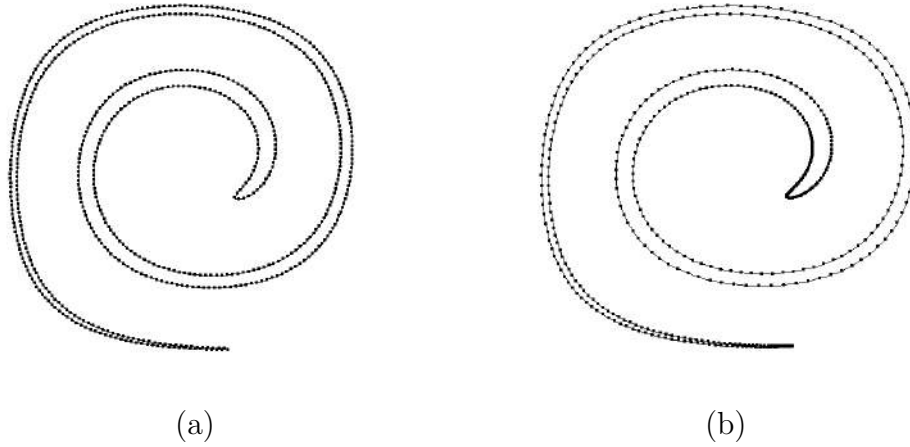


Figura 5.14: Distribuição dos pontos lagrangianos sobre a interface em $t = 4$ [s] (a) com regularização e (b) sem regularização; método FT.

Na Tab. 5.5 tem-se um comparativo da perda de massa (Eq. 5.11) obtido no presente trabalho para ambos os métodos de representação de interface, VOF e FT. O teste de conservação de massa foi realizado para nós de colocação variando de 32×32 a 512×512 em $t = 8$ [s], tempo em que a bolha volta a sua posição inicial. Nota-se que a metodologia IMERSPEC-FT é menos conservativa que a metodologia IMERSPEC-VOF, como esperado.

Além disso, comparou-se a metodologia proposta por Cenicerós et al. (2010), o qual os autores utilizaram o método das diferenças finitas centradas com malha adaptativa localmente. Os autores acoplaram este método com os métodos VOF e FT e os testes de conservação de massa foram realizados e comparados com o código IMERSPEC, demonstrando que os resultados obtidos no presente trabalho se encontram de acordo a literatura.

Tabela 5.5: Perda de massa das metodologias IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF.

Malha	VOF (SILVEIRA NETO et al., 2010)	FT (CENICEROS et al., 2010)	VOF (Código IMERSPEC-VOF)	FT (código IMERSPEC-FT)
32×32	$7,73 \times 10^{-2}$	-	$1,89 \times 10^{-2}$	$1,20 \times 10^{-1}$
64×64	$5,40 \times 10^{-3}$	-	$1,94 \times 10^{-3}$	$2,14 \times 10^{-2}$
128×128	$4,01 \times 10^{-4}$	-	$6,61 \times 10^{-4}$	$4,44 \times 10^{-3}$
256×256	$2,63 \times 10^{-5}$	$7,0 \times 10^{-5}$	$2,39 \times 10^{-5}$	$4,58 \times 10^{-4}$
512×512	$2,30 \times 10^{-5}$	$1,0 \times 10^{-5}$	$2,74 \times 10^{-6}$	$2,09 \times 10^{-4}$

5.6 Curvatura

Nesta seção são apresentados os resultados quantitativos para a verificação do cálculo da curvatura através do método CELESTE (Cap. 4, seção 4.7.4) para a metodologia IMERSPEC-VOF. Além disso, verificou a implementação da discretização pelo polinômio de Lagrange para o cálculo da curvatura (Cap. 4, seção 4.6.3) para a metodologia IMERSPEC-FT. Após isso, comparou-se ambos os métodos. Para a verificação, foi avaliada a curvatura de um círculo e comparada com a solução exata, $\kappa_{ex} = 1/r$, onde $r = 0,25$ é o raio do círculo centrado na posição $(0,5;0,5)$ de um domínio $(1,0;1,0)$. Para avaliação quantitativa foi calculado o erro da norma L_2 para diferentes malhas.

Os resultados apresentados foram comparados com o trabalho de Cummins, Francois and Kothe (2004), que avaliou a acurácia de diversos métodos para testar o cálculo da curvatura. Os métodos apresentados por ele foram: *convolved VOF* (CV), função altura (*height function* (HF)), *reconstructed distance function* (RDF) e *Exact distance function* (DF). Na Fig. 5.15, apresenta-se a norma L_2 . Observa-se que o método FT obteve quarta ordem como esperava-se devido à utilização do polinômio de Lagrange de quarta ordem, apresentando melhor resultado dentre os métodos apresentados. Com os métodos DF e HF, mostrados por Cummins, Francois and Kothe (2004), obtiveram-se segunda ordem, enquanto que, com os métodos CELESTE, RDF e CV, não apresentaram uma taxa de convergência, pois nota-se um aumento da norma L_2 com o refinamento de malha.

Na Fig. 5.16 tem-se um comparativo dos métodos implementados no presente trabalho, sendo o CELESTE para a metodologia IMERSPEC-VOF e o polinômio de Lagrange para a metodologia IMERSPEC-FT. Nota-se os bons resultados da aproximação do cálculo da curvatura pelos polinômios de Lagrange, retratando a alta acurácia para o cálculo da curvatura para a metodologia IMERSPEC-FT.

5.7 Correntes espúrias

Um teste muito utilizado para verificar a correta implementação do cálculo da força interfacial em escoamentos multifásicos é através da simulação numérica de uma bolha cilíndrica estática, onde se observa a formação de correntes espúrias. Essas correntes são

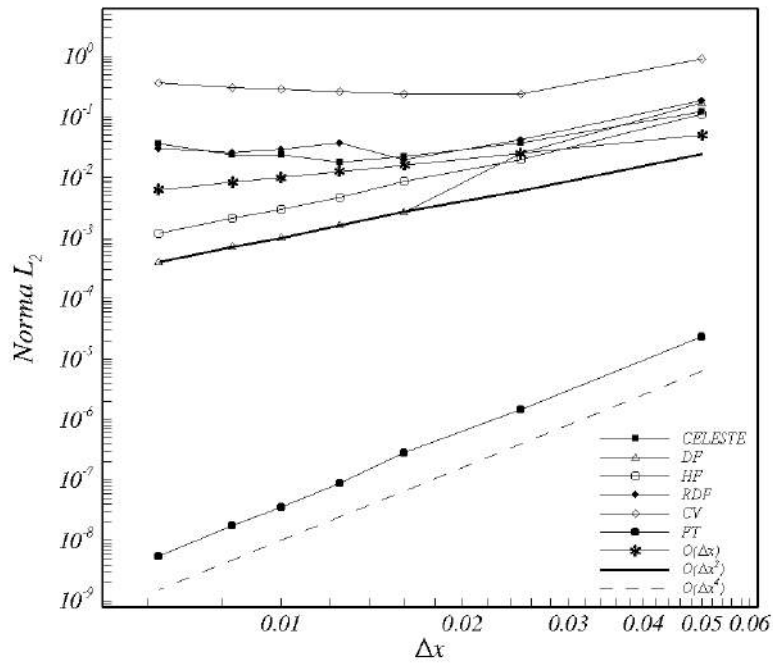


Figura 5.15: Erro da norma L_2 para o cálculo da curvatura para diferentes métodos.

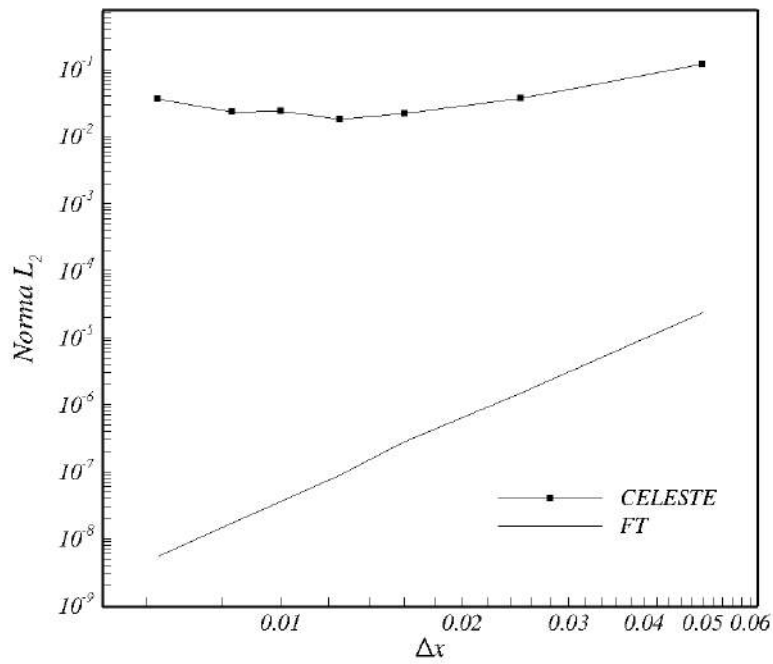


Figura 5.16: Comparativo para o cálculo da curvatura entre os métodos CELESTE e o aproximação por polinômios de Lagrange de quarta ordem.

caracterizadas por velocidades diferente de zero causadas por erros numéricos. Este caso teste foi sugerido por Popinet and Zaleski (1999) e posteriormente utilizado por Lafaurie et al. (1994), Cenicerós et al. (2010) e Marchandise et al. (2007), que observaram dois fatores responsáveis pela geração dessas correntes: o cálculo da força interfacial e o cálculo da curvatura.

As correntes espúrias no método FT podem ser influenciadas também pelas funções distribuição e interpolação e apresentam elevada intensidade, o que pode afetar a acurácia da solução numérica avaliada, além do risco de serem amplificadas ao longo de uma simulação. No método VOF o que pode intensificar as correntes espúrias é o cálculo da curvatura. Nesta seção serão quantificadas as correntes espúrias de ambas as metodologias apresentadas no presente trabalho: IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF.

5.7.1 Metodologia IMERSPEC-FT

O domínio computacional considerado nesta verificação é $D = [0, 2d_b] \times [0, 2d_b]$, onde d_b é o diâmetro da bolha, a qual está localizada no centro do domínio D e as condições de contorno são periódicas. Existem dois pontos lagrangianos por célula euleriana, equidistribuídos na interface de uma bolha circular. O filtro utilizado para este teste foi o filtro Lanczos (seção 4.4). Os resultados obtidos foram comparados com Cenicerós et al. (2010) que utilizaram o método *Front-Tracking* e Marchandise et al. (2007) que trabalharam com a combinação do método da quadratura livre de Galerkin descontínuo com o método *level set*. A simulação foi realizada até o tempo $t = 250tc$, onde tc é o tempo característico dado por:

$$tc = \mu d_b / \sigma. \quad (5.15)$$

Para a avaliação das correntes espúrias, é necessário definir o número de Laplace, dado por:

$$La = \frac{\sigma \rho_c d_b}{\mu_c^2}, \quad (5.16)$$

onde $d_b = 0,5[m]$ é o diâmetro da bolha, $\lambda = \frac{\rho_c}{\rho_d} = 1$ e $\gamma = \frac{\mu_c}{\mu_d} = 1$.

A magnitude das correntes espúrias é medida através do número de capilaridade, definido como:

$$Ca = \frac{U_{max} \mu}{\sigma}, \quad (5.17)$$

onde U_{max} é o módulo da velocidade máxima obtida da simulação. Esse número é equivalente a norma L_∞ .

Primeiramente, fixou-se a malha em 32×32 nós de colocação, e variou-se o número de Laplace (La) de 1,2 até 12000, sendo $\rho_c = \rho_d$ e $\mu_c = \mu_d$. Na Tab. 5.6 mostra-se a magnitude máxima das correntes espúrias (Ca) para diferentes La . O código IMERSPEC-FT apresentou bons resultados quando comparado com as referências citadas.

Tabela 5.6: Magnitude da corrente espúrias (Ca) para uma malha fixa 32×32 para diferentes La .

La	Ca (Ceniceros et al. (2010))	Ca (Marchandise et al. (2007))	Ca (Código IMERSPEC)
1,2	$5,11 \times 10^{-3}$	-	$1,77 \times 10^{-5}$
12	$5,20 \times 10^{-5}$	$8,51 \times 10^{-5}$	$1,60 \times 10^{-5}$
120	$5,08 \times 10^{-4}$	$8,62 \times 10^{-5}$	$1,53 \times 10^{-5}$
1.200	$5,08 \times 10^{-4}$	$8,59 \times 10^{-5}$	$1,10 \times 10^{-5}$
1.000	$5,16 \times 10^{-4}$	$8,31 \times 10^{-5}$	$4,83 \times 10^{-6}$

Na Tab. 5.7 procurou-se verificar a influência do refinamento da malha na geração de correntes espúrias. Para isso fixou-se o número de Laplace $La = 12.000$ e variando a malha de 16×16 até uma malha mais refinada de 256×256 pontos, sendo $\rho_c = \rho_d$ e $\mu_c = \mu_d$. Nota-se que a metodologia IMERSPEC-FT apresentou bons resultados quando comparados com Cenicerros et al. (2010).

Tabela 5.7: Magnitude das correntes espúrias Ca para $La = 12.000$ e a malha variável.

$Malha$	Ca (Ceniceros et al. (2010))	Ca (Código IMERSPEC)
16×16	$5,22 \times 10^{-4}$	$2,15 \times 10^{-6}$
32×32	$4,45 \times 10^{-4}$	$4,83 \times 10^{-6}$
64×64	$2,91 \times 10^{-4}$	$8,82 \times 10^{-6}$
128×128	$1,53 \times 10^{-4}$	$8,28 \times 10^{-6}$
256×256	$9,02 \times 10^{-5}$	$5,99 \times 10^{-6}$

Testes para a verificação da influência do aumento das razões de propriedades físicas na geração de correntes espúrias foram realizados. Para isso, fixou-se a malha de 128×128 pontos, o número de Laplace em $La = 12.000$, gravidade nula, $\rho_c = 1.000$, $\mu_c = 100$ e variou-se as razões de massa específica e viscosidade, respectivamente, $\lambda = \frac{\rho_c}{\rho_d}$ e $\gamma = \frac{\mu_c}{\mu_d}$, Tab. 5.8.

Este teste foi realizado com os dois filtros apresentados, o filtro Lanczos e o filtro exponencial (seção 4.4). O filtro exponencial apresentou melhores resultados.

Outra verificação possível de se realizar é o salto de pressão para uma bolha cilíndrica, o qual pode ser comparado analiticamente com o valor dado por $\Delta p^e = \frac{2\sigma}{d_b}$. O salto de pressão analítico, para este caso, é $\Delta p^e = 9.600$ e na Tab. 5.9 apresentam-se os resultados para diferentes razões de propriedades físicas, comparando o salto de pressão numérico com analítico através do erro relativo,

$$E_r = |(\text{numerico} - \text{analitico}) / \text{analitico}| \cdot 100. \quad (5.18)$$

Nota-se que os resultados obtidos com o filtro exponencial não divergiram para maiores razões de massa específica, enquanto que os resultados obtidos com o filtro Lanczos divergiram para razões maiores que 100.

Tabela 5.8: Magnitude das correntes espúrias Ca para diferentes razões de propriedades físicas.

Razões	Ca (Filtro Lanczos)	Ca (Filtro exponencial)
1	$6,75 \times 10^{-7}$	$6,69 \times 10^{-8}$
2	$7,10 \times 10^{-7}$	$9,48 \times 10^{-8}$
10	$5,00 \times 10^{-6}$	$4,87 \times 10^{-7}$
100	$8,84 \times 10^{-5}$	$3,38 \times 10^{-6}$
1.000	-	$5,05 \times 10^{-6}$
1.100	-	$5,08 \times 10^{-6}$
1.500	-	$5,15 \times 10^{-6}$
2.000	-	$5,21 \times 10^{-6}$
2.500	-	$5,24 \times 10^{-6}$
3.000	-	$5,27 \times 10^{-6}$
5.000	-	$5,32 \times 10^{-6}$
10.000	-	$5,37 \times 10^{-6}$
13.000	-	$5,39 \times 10^{-6}$

5.7.2 Metodologia IMERSPEC-VOF

Primeiramente, avaliou-se as correntes espúrias sem a influência do cálculo da curvatura. Logo, para este teste a curvatura é exata, uma vez que para uma bolha circular a curvatura analítica é $1/r$, onde r é o raio da bolha. Considerou uma malha de 40×40 pontos em um domínio $(8,0;8,0)$ e com passo de tempo $\Delta t = 10^{-5}$. Além disso, foi avaliado

Tabela 5.9: Erro relativo do salto de pressão para diferentes razões de propriedades físicas.

Razões	E_r (Filtro Lanczos)	E_r (Filtro exponencial)
1	$1,45 \times 10^{-5}\%$	$1,22 \times 10^{-1}\%$
2	$2,34 \times 10^{-4}\%$	$1,25 \times 10^{-1}\%$
10	$1,34 \times 10^{-1}\%$	$1,22 \times 10^{-1}\%$
100	$2,55 \times 10^{-1}\%$	$1,21 \times 10^{-1}\%$
1.000	-	$3,4 \times 10^{-1}\%$
1.100	-	$3,4 \times 10^{-1}\%$
1.500	-	$3,5 \times 10^{-1}\%$
.2000	-	$3,65 \times 10^{-1}\%$
2.500	-	$3,63 \times 10^{-1}\%$
3.000	-	$3,74 \times 10^{-1}\%$
5.000	-	$3,75 \times 10^{-1}\%$
10.000	-	$3,81 \times 10^{-1}\%$
13.000	-	$3,89 \times 10^{-1}\%$

o salto de pressão, o qual pode ser obtido analiticamente para uma bolha circular, ou seja, $\Delta p_{exato} = \sigma \kappa$, onde σ é o coeficiente de tensão interfacial e κ é a curvatura da interface. Os resultados apresentados foram comparados com o trabalho de Francois et al. (2009) após um passo de tempo.

Para a análise do salto de pressão, foi calculado o erro definido como:

$$E(\Delta p)_n = \frac{\Delta p_n - \Delta p_{exato}}{\Delta p_{exato}} \quad (5.19)$$

onde $\Delta p_n = p_{max} - p_{min}$ e os subscritos *max* denota o máximo e *min* o mínimo.

A avaliação das correntes espúrias é feita através do cálculo da velocidade máxima, definida por

$$|u|_{max} = \max(|u|). \quad (5.20)$$

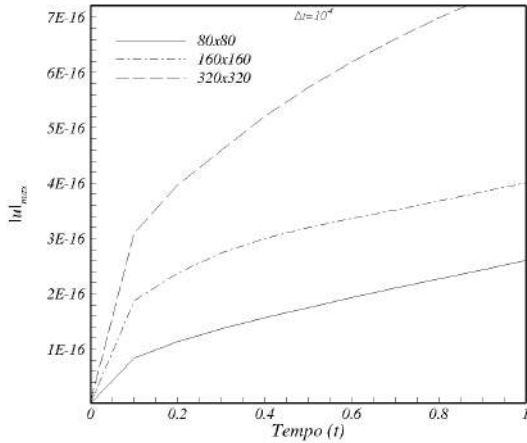
A Tab. 5.10 apresenta os resultados obtidos no presente trabalho e comparou-se com o trabalho de Francois et al. (2009) para diferentes razões de massa específica. Observa-se a maior estabilidade numérica do método utilizado no presente trabalho, uma vez que este apresentou convergência numérica para maiores razões de propriedades físicas.

Para avaliar as correntes espúrias com curvatura calculada através do método CE-LESTE, testes foram simulados. Primeiramente, considerou-se razões de propriedades físicas igual a um, $\rho_1/\rho_2 = 1,0$ e $\mu_1/\mu_2 = 1,0$ e variou a malha de 80×80 até 320×320 em um

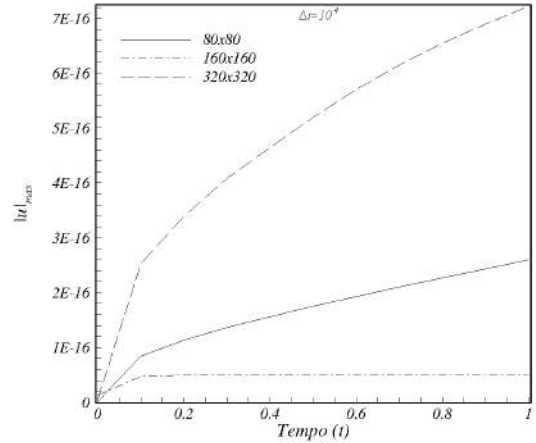
Tabela 5.10: Cálculo do $|u|_{max}$ e $E(\Delta p)_n$ para diferentes razões de massa específica.

ρ_1/ρ_2	$ u _{max}$ Francois et al. (2009)	$ u _{max}$ Presente trabalho	$E(\Delta p)_n$ Francois et al. (2009)	$E(\Delta p)_n$ Presente trabalho
1	$2,28 \times 10^{-5}$	$8,24 \times 10^{-24}$	$7,79 \times 10^{-14}$	$1,9175 \times 10^{-2}$
1/2	—	$1,63 \times 10^{-9}$	—	$1,9175 \times 10^{-2}$
1/10	—	$2,42 \times 10^{-8}$	—	$1,9175 \times 10^{-2}$
1/100	—	$3,86 \times 10^{-7}$	—	$1,9175 \times 10^{-2}$
1/1.000	Não converge	$4,49 \times 10^{-6}$	Não converge	$1,9176 \times 10^{-2}$
1/10.000	—	$4,77 \times 10^{-5}$	—	$1,9178 \times 10^{-2}$
1/100.000	Não converge	$4,83 \times 10^{-4}$	Não converge	$1,9186 \times 10^{-2}$

domínio $D = (8,0;8,0)$, com um passo de tempo $\Delta t = 10^{-4}$ e $\sigma = 73$ [N/m]. Além disso, foram testados dois tipos de filtros, Lanczos e exponencial em ambos os casos as correntes espúrias obtiveram valores próximos de zero, chegando ao erro de truncamento de máquina.



(a)



(b)

Figura 5.17: Representação gráfica do $|u|_{max}$ ao longo do tempo com $\rho_1/\rho_2 = 1,0$ e $\mu_1/\mu_2 = 1,0$, utilizando: (a) filtro Lanczos e (b) filtro exponencial.

Por fim, na Tab. 5.11 tem-se o cálculo do $|u|_{max}$ para diferentes razões de massa específica. Nota-se que as correntes espúrias aumentam com o aumento da razão das propriedades físicas. Além disso, observa-se que o filtro exponencial apresentou melhores resultados e suportou maiores razões de propriedades físicas quando se compara com o filtro Lanczos.

Diantes dos resultados apresentados conclui-se que as correntes espúrias com $\rho_1/\rho_2 = 1,0$ e $\mu_1/\mu_2 = 1,0$ apresentaram valores de $|u|_{max}$ em erro de truncamento de máquina

Tabela 5.11: Cálculo do $|u|_{max}$ para diferentes razões de massa específica.

ρ_1/ρ_2	$ u _{max}$ Presente trabalho - filtro exponencial	$ u _{max}$ Presente trabalho - filtro Lanczos
1	$2,00 \times 10^{-16}$	$2,5 \times 10^{-16}$
2	$1,06 \times 10^{-3}$	$5,86 \times 10^{-3}$
10	$1,77 \times 10^{-2}$	$4,16 \times 10^{-1}$
50	$2,31 \times 10^{-1}$	divergiu
100	$7,99 \times 10^{-1}$	divergiu
1.000	1,81	divergiu

utilizando ambos os filtros, ou seja, aproximando de valor esperado que é velocidade nula. Porém, quando se aumenta as razões de propriedades físicas os valores de $|u|_{max}$ aumentam significativamente, tanto para o filtro exponencial, quanto para o filtro Lanczos, porém é notório os melhores resultados apresentados pelo filtro exponencial.

Comparando com outras metodologias apresentadas por Denner et al. (2014), fez-se outro teste em um domínio bidimensional de tamanho $D = (8,0;8,0)$ [m], com um passo de tempo $\Delta t = 10^{-3}$ e $\sigma = 73$ [N/m]. As razões de propriedades físicas são $\rho_1/\rho_2 = 0,1$ e $\mu_1/\mu_2 = 1,0$. Nas Tabs. 5.12 e 5.13 tem-se a magnitude da velocidade máxima, $|u|_{max}$ m/s, e cálculo do erro do salto de pressão, $E(\Delta p)_{max}$ (Eq. 5.19), em $t = 0$ [s] e $t = 50\Delta t$ [s].

Nota-se que os resultados apresentados no presente trabalho estão de acordo com a literatura. Isto pode ser concluído quando se compara com outras metodologias, a qual aqui comparou-se com o trabalho de Denner et al. (2014). Além disso, observa-se que o filtro exponencial apresentou resultados mais consistentes para a magnitude da velocidade máxima, porém o filtro Lanczos aproximou mais do salto de pressão analítico.

Tabela 5.12: Cálculo da magnitude da velocidade máxima ($|u|_{max}$) e erro do salto de pressão ($E(\Delta p)_{max}$) em $t = 0$ [s]

Método	$ u _{max}$ ms	$E(\Delta p)_{max}$
VOF CELESTE - Denner et al. (2014)	$1,01 \times 10^{-3}$	$1,36 \times 10^{-2}$
VOF-PLIC HF - Denner et al. (2014)	$7,91 \times 10^{-3}$	$3,68 \times 10^{-3}$
Presente trabalho - filtro Lanczos	$2,08 \times 10^{-2}$	$4,38 \times 10^{-2}$
Presente trabalho - filtro exponencial	$1,36 \times 10^{-3}$	$2,41 \times 10^{-2}$

Tabela 5.13: Cálculo da magnitude da velocidade máxima ($|u|_{max}$) e erro do salto de pressão ($E(\Delta p)_{max}$) em $t = 50\Delta t$ [s].

Método	$ u _{max} \text{ ms}^{-1}$	$E(\Delta p)_{max}$
VOF CELESTE - Denner et al. (2014)	$6,74 \times 10^{-2}$	$1,25 \times 10^{-2}$
VOF-PLIC HF - Denner et al. (2014)	$4,25 \times 10^{-2}$	$6,57 \times 10^{-3}$
Presente trabalho - filtro Lanczos	$7,71 \times 10^{-2}$	$3,00 \times 10^{-2}$
Presente trabalho - filtro exponencial	$3,46 \times 10^{-3}$	$2,41 \times 10^{-2}$

5.8 Ascensão de bolhas

Após os testes realizados e apresentados nas seções anteriores, busca-se nessa seção validar a metodologia proposta através de simulações numéricas da ascensão de uma única bolha em um domínio bidimensional. Parâmetros adimensionais foram utilizados para controlar o experimento numérico, sendo que dois desses parâmetros envolvem as razões entre as massas específicas e as viscosidades dinâmicas da fase contínua (c) e da fase dispersa (d), isto é, $\lambda = \rho_c/\rho_d$ e $\gamma = \mu_c/\mu_d$. Os outros dois parâmetros são definidos pela presença da aceleração da gravidade g [m/s^2], pelo diâmetro da bolha d_b [m], pelo coeficiente de tensão interfacial σ [N/m], pela massa específica da fase contínua ρ_c [kg/m^3] e pela viscosidade do fluido μ_c [kg/ms]. Assim, podem ser definidos:

$$M = \frac{g\mu_c^4\Delta\rho}{\rho_c^2\sigma^3}, \quad (5.21)$$

$$Eo = \frac{\Delta\rho g d_d^2}{\sigma}. \quad (5.22)$$

onde $\Delta\rho = \rho_c - \rho_d$.

O parâmetro Eo , conhecido como número de Eötvös, é a razão entre as forças gravitacional e interfacial e o número de Morton (M) é constante para um dado fluido quando a aceleração gravitacional e a força interfacial σ são constantes.

Tais parâmetros adimensionais definem o comportamento do movimento da bolha. Assim, quando as bolhas são pequenas e a tensão interfacial é alta, as bolhas tendem a permanecer esféricas e a dinâmica é independente da tensão interfacial (HAN; TRYGGVASON, 1999). Para altos valores de M , a geometria da bolha tende a se tornar elipsoidal. À medida que Eo aumenta, as bolhas eventualmente se deformam e assumem a forma de calotas

esféricas. Para M moderados, as bolhas apresentam um movimento helicoidal. Para altos valores de M , a ascensão de uma bolha é normalmente instável. Para altos valores de Eo e M , as bolhas podem se deformar e até mesmo se fragmentar. Outro importante parâmetro adimensional é o número de Reynolds Re , o qual relaciona forças de inércia com forças viscosas. Em escoamentos multifásicos, só é possível determinar o Re de uma bolha após o cálculo da velocidade de seu centróide. Resultados experimentais de Clift, Grace and Weber (1978), apresentam, para diferentes números de Eötvös e Morton, o número de Reynolds para uma bolha em regime permanente e as suas diferentes geometrias (Fig. 5.18).

O número de Reynolds é então definido por:

$$Re = \frac{\rho_c d_b V_b}{\mu_c}. \quad (5.23)$$

onde V_b é a velocidade do centróide da bolha.

Devido à tensão interfacial surge um salto de pressão entre as duas fases, o qual pode ser calculado analiticamente pela Eq. 5.24 (WHITE, 1991),

$$\Delta p_a = p_d - p_c = \Delta p^e = \frac{2\sigma}{d_b}. \quad (5.24)$$

onde e indica que o diferencial de pressão é analítico.

A Eq. 5.24 é conhecida como a Lei de Young-Laplace. Esse resultado é utilizado como referência para validar os resultados com baixos valores de número de Eötvös onde há pouca deformação da interface.

Dessa maneira, os estudos realizados no presente trabalho partem inicialmente de um fluido em repouso. Os números de Eötvös e Morton, Eqs. 5.22 e 5.21, respectivamente, são fornecidos, e a partir deles obtém-se as propriedades, massa específica e viscosidade dinâmica.

Diante disso, compara-se o número de Reynolds em regime estacionário e forma geométrica da bolha com dados experimentais do diagrama de Clift, Grace and Weber (1978) e Bhaga (1976), para assim validar as metodologias IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF. Além disso, os resultados também serão comparados com o trabalho de Villar (2007).

5.8.1 IMERSPEC-FT

Para validar a metodologia IMERSPEC-FT foram simulados vários regimes de bolhas em ascensão. Primeiramente, apresentou-se uma análise de sensibilidade para bolha a baixo

e alto número de Reynolds. O intuito dessa análise é verificar a influência da parede e do refinamento de malha. Além disso, resultados para analisar a capacidade da metodologia de simular altas razões de massa específica e viscosidade.

A Fig.5.18 destaca-se os regimes simulados com as bolhas preenchidas pela cor preta e posicionadas na região do diagrama em que se encontram. Em todos os testes apresentados utilizou-se um tempo adimensional baseado no diâmetro inicial da bolha, $t^* = \frac{t}{\sqrt{d_b/g}}$. As condições de contorno utilizadas foram de não-deslizamento em x e periodicidade em y . O domínio de cálculo utilizado é apresentado na Fig. 5.19.

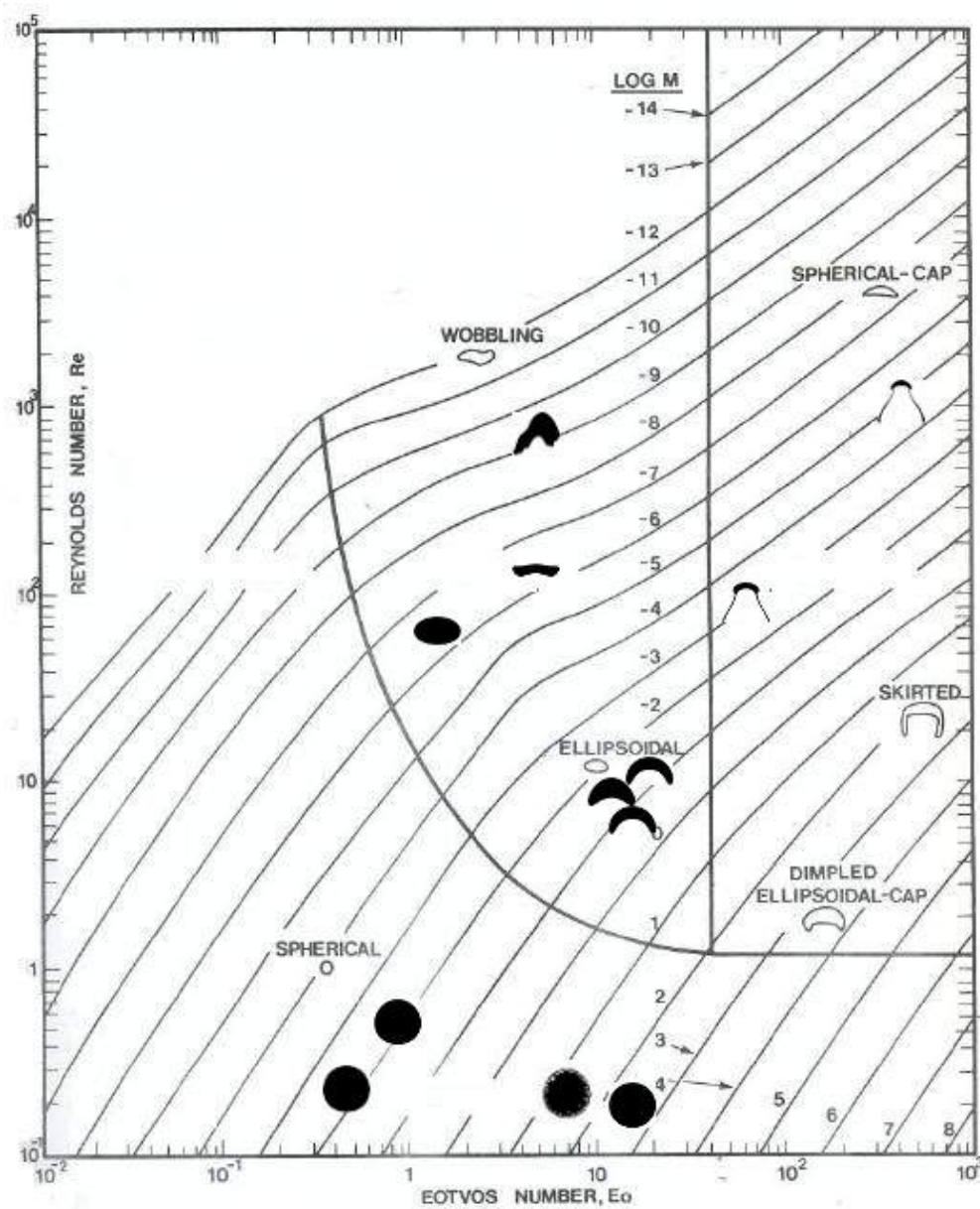


Figura 5.18: Diagrama de Clift, Grace and Weber (1978).

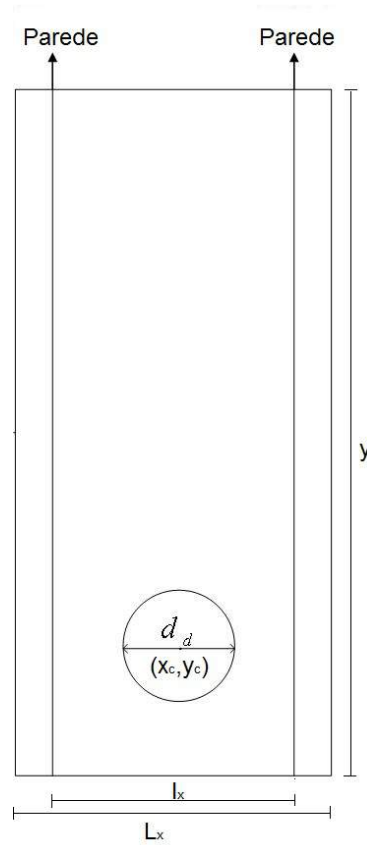


Figura 5.19: Domínio de cálculo

A velocidade utilizada para calcular o número de Reynolds é a velocidade do centróide da bolha (centro de gravidade). A posição do centróide é dada pelo vetor pb_{b_l} e a área da bolha é A_b . O método para o cálculo de pb_{b_l} e A_b foi proposto por Bunner and Tryggvason (2002):

$$A_b = \int_{A_b} dA = \frac{1}{2} \int_{A_b} \frac{\partial}{\partial x_k} X_k dA_b = \frac{1}{2} \oint_{\Gamma} X_l n_l ds, \quad (5.25)$$

$$pb_{b_l} = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} X_l dA_b = \frac{1}{2A_b} \int_{A_b} \frac{\partial}{\partial x_k} (X_k X_l) dA_b = \frac{1}{2A_b} \oint_{\Gamma} (X_l X_l) n_l ds. \quad (5.26)$$

A velocidade do centróide da bolha, $\vec{V}_b = (U_{b_l}, V_{b_l})$, pode ser obtida por:

$$V_b = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} U_{b_l} dA_b = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} \frac{\partial}{\partial x_k} (X_k U_k) dA_b = \frac{1}{A_b} \oint_{\Gamma} X_l (U_{b_l} n_l) ds, \quad (5.27)$$

onde U_{b_l} é a componente l do vetor velocidade da interface.

Análise de sensibilidade para regime de bolhas a baixo número de Reynolds

Para verificar a influência do domínio para uma bolha em ascensão a baixo número de Reynolds foi realizada a simulação numérica da ascensão de uma bolha em regime calota-

esférica. Especificamente este caso, o número de $Eo = 10,00$ e o número de Morton $M = 2 \times 10^{-2}$ e, pelo experimento de Clift, Grace and Weber (1978), para este Eötvös e Morton, $Re \approx 9,00$.

Neste experimento numérico, a tensão interfacial $\sigma = 9,0 [N/m]$, o diâmetro da bolha $d_b = 1,00 [m]$, $\lambda = 2,00$ e $\gamma = 2,00$ (condições de entrada para a simulação numérica deste teste encontram-se na Tab. A.3, Apêndice A, Teste A_2). Além disso, o processo de filtragem não está sendo utilizado.

O teste foi realizado para os domínios $D_1 = [0,0;2,0] \times [0,0;6,0]$, $D_2 = [0,0;4,0] \times [0,0;12,0]$, $D_3 = [0,0;6,0] \times [0,0;18,0]$ e $D_4 = [0,0;8,0] \times [0,0;24,0]$. Na Fig. 5.20 tem-se a análise quantitativa da influência da condição de contorno sobre a bolha. Nota-se que a partir do domínio D_3 a condição de contorno de não-deslizamento não influencia na forma da bolha.

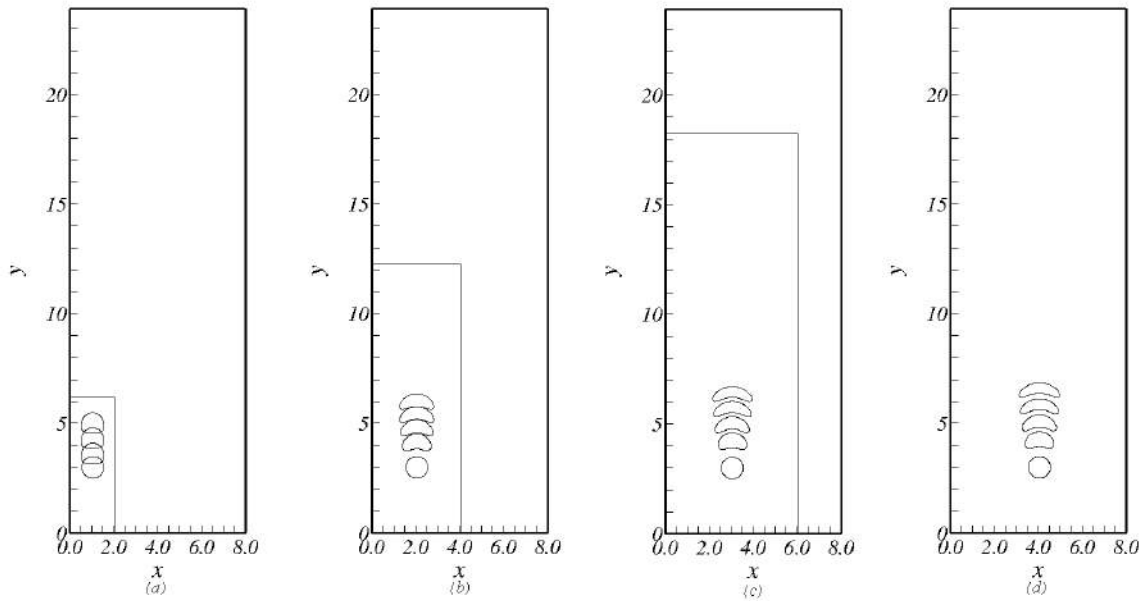


Figura 5.20: Evolução temporal da ascensão da bolha para diferentes domínios, teste A_2 : (a) $D_1 = [0,0;2,0] \times [0,0;6,0]$; (b) $D_2 = [0,0;4,0] \times [0,0;12,0]$; (c) $D_3 = [0,0;6,0] \times [0,0;18,0]$ e (d) $D_4 = [0,0;8,0] \times [0,0;24,0]$

A análise quantitativa é apresentada na Fig. 5.21. Nota-se que a partir do domínio D_2 há uma aproximação entre os números de Reynolds, podendo concluir que para o domínio D_3 , em que na direção x , $L_x = 6d_b$, a condição de contorno de não-deslizamento não influencia na

forma da bolha e aproxima quantitativamente do número de Reynolds obtido pelo domínio D_4 . Sendo este, portanto, o domínio D_3 , um bom domínio de cálculo para representação do experimento em questão, considerando também o custo computacional.

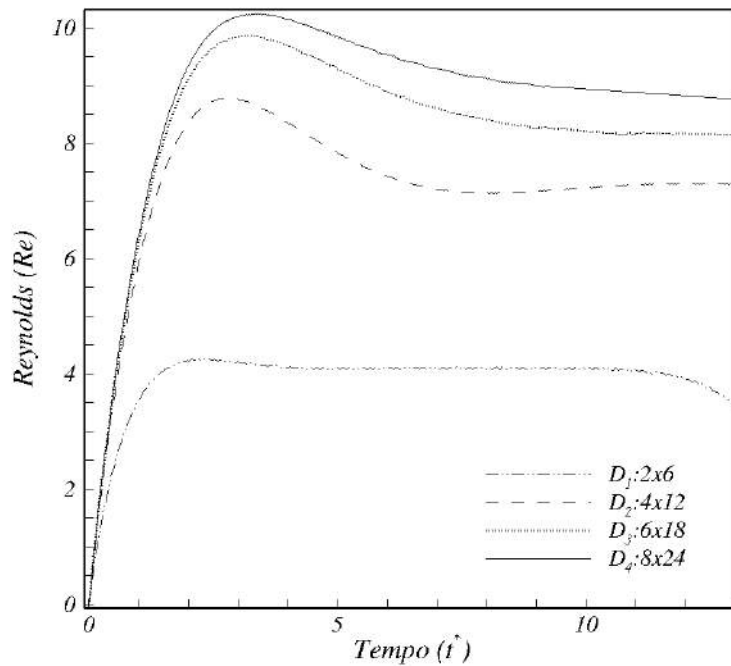


Figura 5.21: Evolução temporal do número de Reynolds do teste A_2 para os domínio D_1 , D_2 , D_3 e D_4 .

Análise de sensibilidade para regime de bolhas a alto número de Reynolds

Para verificar a influência do domínio e do refinamento dos nós de colocação para uma bolha em ascensão a altos números de Reynolds foi realizada a simulação numérica da ascensão de uma bolha em regime *skirted*. Este regime de bolha é caracterizado por apresentar a formação de “saías” nas extremidades laterais da bolha. Especificamente neste caso, o número de $Eo = 407,7$ e o número de Morton $M = 5 \times 10^{-6}$ e, pelo experimento de Clift, Grace and Weber (1978), para este Eötvös e Morton, $Re \approx 1.050,00$. A escolha deste teste para a verificação da análise de sensibilidade da metodologia IMERSPEC-FT é devida ao fato deste regime de bolha ser um caso extremo, pois tem-se um elevado número de Reynolds e uma forte deformação, permitindo verificar de forma mais evidente a influência

das condições de contorno de Dirichlet sobre a forma da bolha.

Neste experimento numérico, o coeficiente de tensão interfacial $\sigma = 9,0 [N/m]$, o diâmetro da bolha $d_b = 0,03 [m]$, $\lambda = 2,00$ e $\gamma = 2,00$ (condições de entrada para a simulação numérica deste teste encontram-se na Tab. A.3, Apêndice A, Teste A₇).

Tamanho do domínio

Na Fig. 5.22 são apresentados os resultados da influência da condição de contorno de não-deslizamento sobre a forma da bolha. Foram analisados cinco tamanhos de domínio $D_5 = [0,0;0,1] \times [0,0;0,3]$ (Fig. 5.22 (a)), $D_6 = [0,0;0,15] \times [0,0;0,45]$ (Fig. 5.22 (b)), $D_7 = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ (Fig. 5.22 (c)), $D_8 = [0,0;0,3] \times [0,0;0,9]$ (Fig. 5.22 (d)) e $D_9 = [0,0;0,4] \times [0,0;1,2]$ (Fig. 5.22 (e)). Nota-se que para o domínio D_5 , com a evolução do tempo, a bolha apresenta uma forma não esperada devido à influência da condição de contorno. Em D_6 , a bolha aproxima da forma esperada, porém é notória a influência da condição de contorno. Para o domínio D_7 observa-se que a forma da bolha aproxima do formato das bolhas nos domínios D_8 e D_9 onde é notória a independência de domínio, pois em ambos casos as bolhas apresentam a mesma forma. Na Fig. 5.23 apresenta, de forma mais nítida, a influência do domínio sobre a forma da bolha.

A análise quantitativa é apresentada na Fig. 5.24. Nota-se que a partir do domínio $D_7 = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ existe uma independência de domínio, pois a evolução, no tempo, do número de Reynolds para os domínios D_7 , D_8 e D_9 tem o mesmo comportamento, demonstrando que quantitativamente não há influência da condição de contorno de não-deslizamento sobre a bolha.

Nós de colocação

Outra análise realizada no presente trabalho é o teste de refinamento dos nós de colocação. Na Fig. 5.25 apresenta-se a forma da bolha em $t^* = 0,82$ e $t^* = 1,55$ para diferentes números de nós de colocação. Observa-se uma grande influência no aumento dos nós de colocação sobre a forma da bolha. Em $t^* = 0,82$, apenas a malha 1024×2048 apresentou a forma *skirted*. Para $t^* = 1,55$, nota-se uma semelhança da forma da bolha entre os nós de colocação 512×1024 e 1024×2048 , representando a forma da bolha *skirted*, como esperado. Para os nós de colocação 128×256 e 256×512 a forma final esperada para bolha não foi alcançada, demonstrando que a partir de $\Delta x = 0,00039$ é que a bolha estará qualitativamente correta.

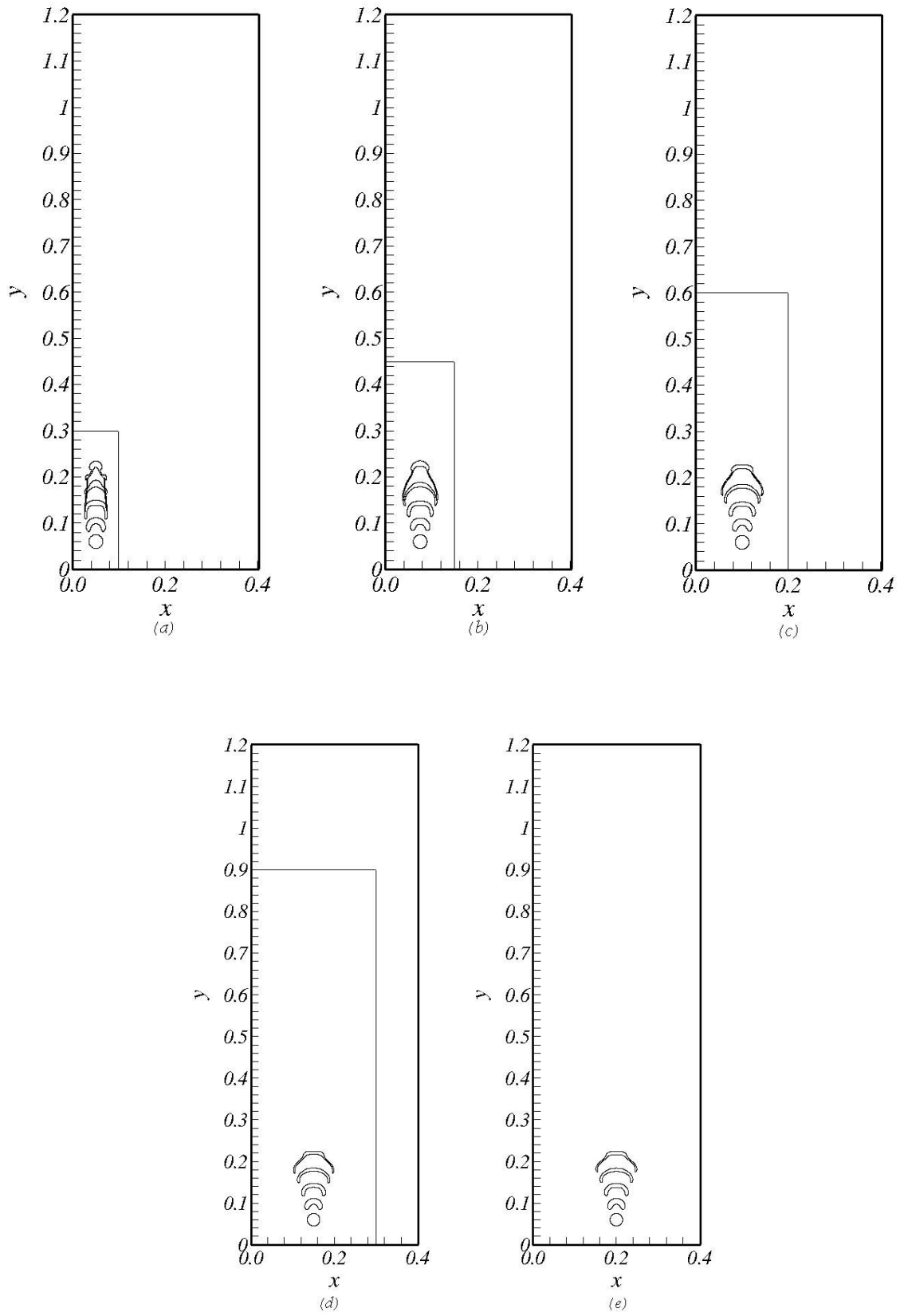


Figura 5.22: Evolução temporal da ascensão da bolha para diferentes domínios, teste A_7 : (a) $D_5 = [0, 0; 0, 1] \times [0, 0; 0, 3]$; (b) $D_6 = [0, 0; 0, 15] \times [0, 0; 0, 45]$; (c) $D_7 = [0, 0; 0, 2] \times [0, 0; 0, 6]$; (d) $D_8 = [0, 0; 0, 3] \times [0, 0; 0, 9]$ e (e) $D_9 = [0, 0; 0, 4] \times [0, 0; 1, 2]$.

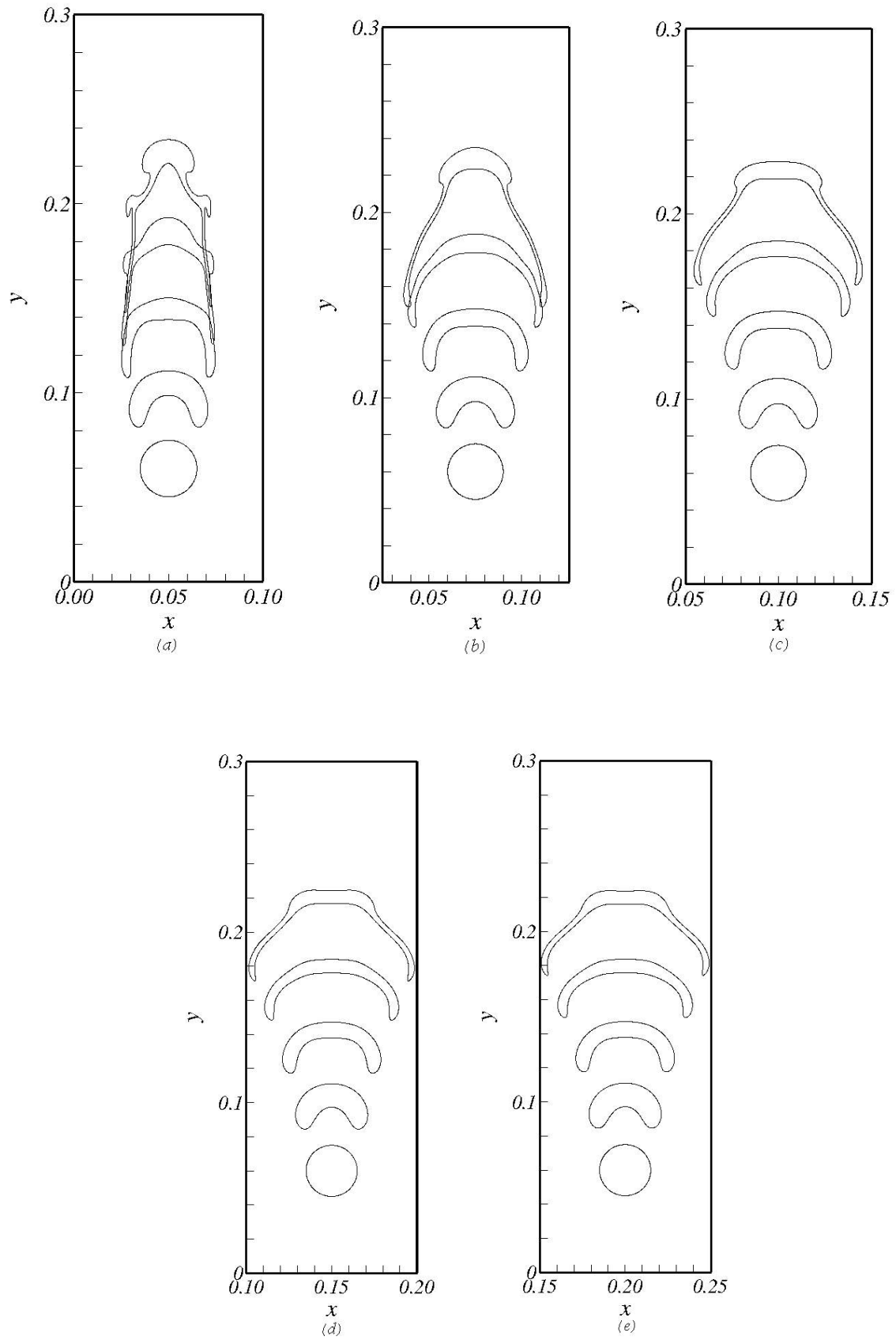


Figura 5.23: Evolução temporal da forma da bolha para diferentes domínios, teste A_7 : (a) $D_5 = [0, 0; 0, 1] \times [0, 0; 0, 3]$; (b) $D_6 = [0, 0; 0, 15] \times [0, 0; 0, 45]$; (c) $D_7 = [0, 0; 0, 2] \times [0, 0; 0, 6]$; (d) $D_8 = [0, 0; 0, 3] \times [0, 0; 0, 9]$ e (e) $D_9 = [0, 0; 0, 4] \times [0, 0; 1, 2]$.

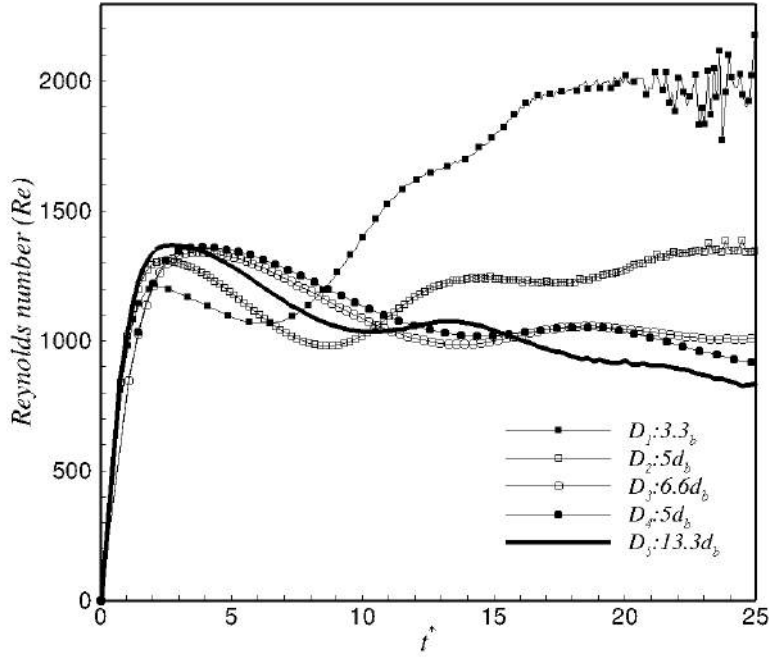


Figura 5.24: Evolução temporal do número de Reynolds, teste A_7 , para os domínios D_5 , D_6 , D_7 , D_8 e D_9 .

É interessante perceber também a formação de uma dupla saia para a malha 1024×2048 , o que não foi observado em nenhuma outra simulação numérica.

Na Fig. 5.26 tem-se a evolução temporal do número de Reynolds para diferentes refinamentos das quantidades de pontos de colocação. Nota-se que para os pontos de colocação 512×1024 e 1024×2048 a bolha atinge o regime permanente em valores de Reynolds próximos, $Re = 1.294,31$ e $Re = 1.252,09$, respectivamente. Comparando com os dados experimentais de Clift, Grace and Weber (1978), o qual apresenta para $Eu = 407,7$ e $M = 5 \times 10^{-6}$, um $Re \approx 1.050,00$, tem-se uma diferença relativa de $E_r = 23,26\%$ e $E_r = 19,24\%$, para os pontos de colocação 512×1024 e 1024×2048 , respectivamente, sendo:

$$E_r = \frac{Re_n - Re_e}{Re_e} 100 \quad (5.28)$$

onde Re_n é o número de Reynolds obtido pela solução numérica e Re_e é o número de Reynolds apresentado por dados experimentais.

Tempo de processamento

Para análise do desempenho computacional foi utilizado um computador com proces-

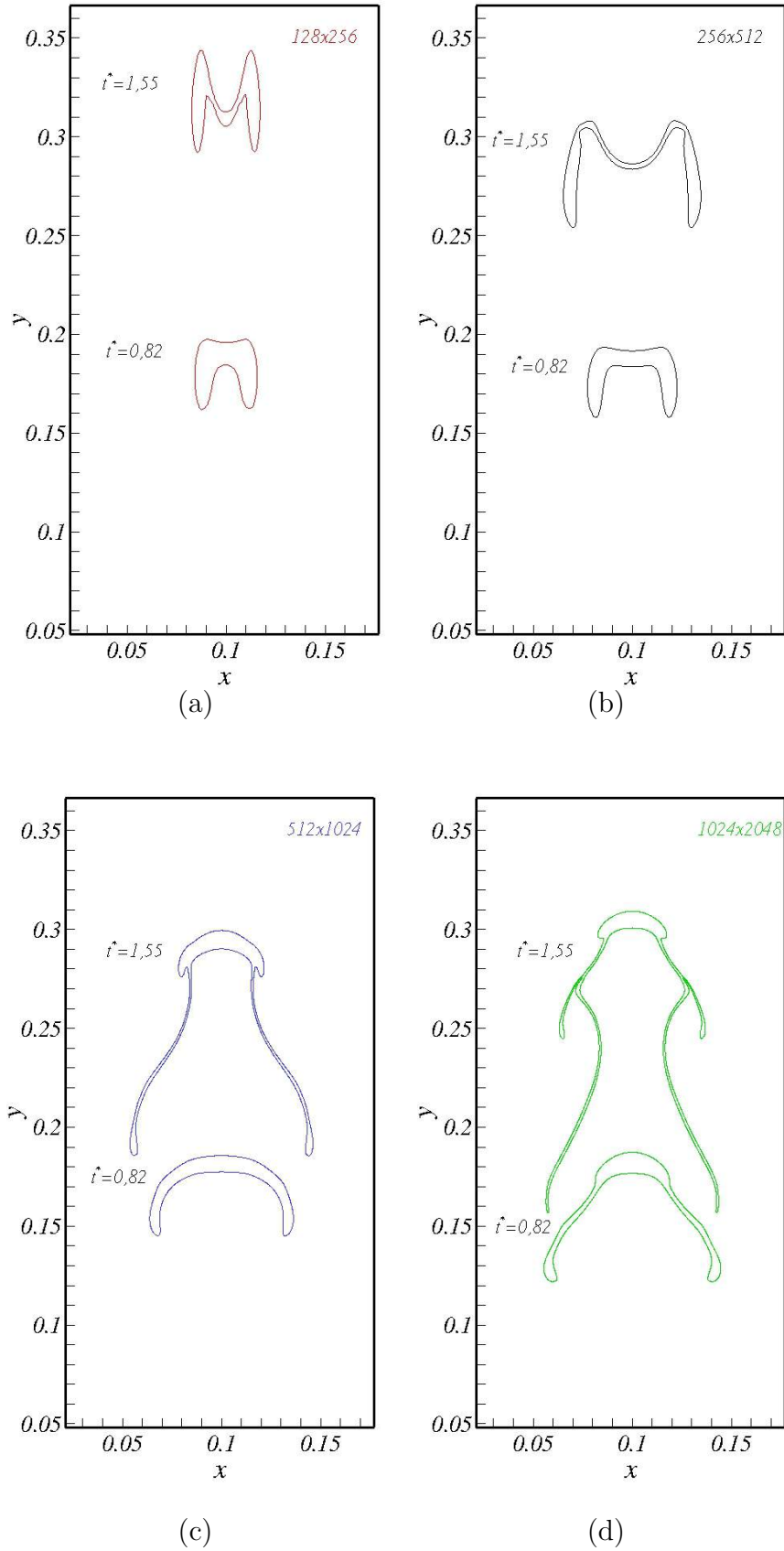


Figura 5.25: Evolução temporal da forma da bolha para diferentes números de nós de colocação, teste A_7 : (a) 128×256 ; (b) 256×512 ; (c) 512×1024 e (d) 1024×2048 .

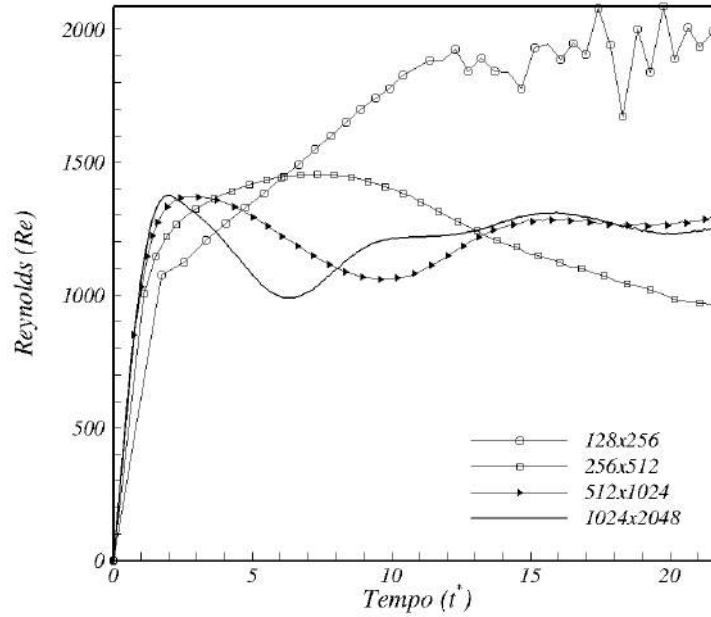


Figura 5.26: Evolução temporal do número de Reynolds, teste A_7 , para diferentes quantidades de nós de colocação.

sador Intel Xeon, modelo E5620 com quatro núcleos de $2,4GHz$ de processamento e $48GB$ de memória RAM e o tempo computacional foi medido por meio da função de contagem do próprio Fortran.

Na fig.5.27 apresenta-se o tempo de execução, fornecido em segundos, em função da quantidade de pontos de colocação para $CFL = 0,01$. Pode ser observado que o método praticamente mantém a ordem $O(N \log_2 N)$, onde N é o número de nós de colocação, $N = N_x \times N_y$, assegurando o mesmo tempo computacional da transformada rápida de Fourier (BRIGGS; HENSON, 1995).

Conclusão da análise de sensibilidade

Diante dos resultados apresentados pode-se concluir que bolhas a baixo números de Reynolds, as quais possuem pouca deformação da interface, exige-se um tamanho de domínio na direção x de, no mínimo, $D = 6 \times d_b$ para que a influência da condição de contorno seja pequena e considerando a demanda computacional. Essa conclusão pode ser demonstrada através dos dados quantitativos através do número de Reynolds na Fig. 5.21, uma vez que

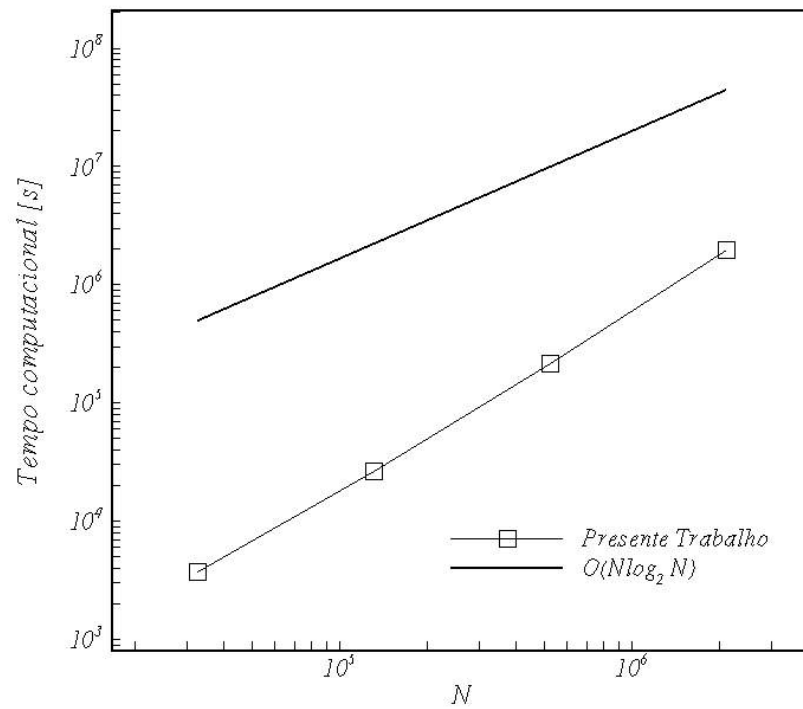


Figura 5.27: Análise do tempo de processamento com o refinamento dos nós de colocação para o teste A_7 .

se observa uma aproximação de valores de Re entre os domínios D_3 e D_4 .

Para bolhas a altos número de Reynolds em que a interface sofre uma deformação extrema, conclui-se que as condições de contorno impostas através da fronteira-imersa seja posicionada de modo que tenha o tamanho de no mínimo $D \approx 6,7d_b$ para que a influência da condição de contorno sobre a bolha seja pequena. Nota-se através da Fig. 5.24 que o comportamento do número de Reynolds ao longo do tempo para os domínios D_7 , D_8 e D_9 não alteram, confirmando a conclusão da análise qualitativa através de dados quantitativos.

No teste de refinamento da malha notou-se que apenas as malhas 512×1024 e 1024×2048 apresentaram resultados consistentes em relação a forma geométrica da bolha e valores do número de Reynolds terminal. Portanto, considerando o custo computacional, para simular problemas semelhantes é necessário tamanho de domínio de $D = 6d_b$ e pontos de colocação 512×1024 .

Por fim, com o propósito de ilustração dos testes realizados, na Fig. 5.28 observa-se as linhas de correntes sobre a geometria da bolha, e nota-se recirculações à jusante da bolha apresentando uma emissão de vórtices do modo varicoso.

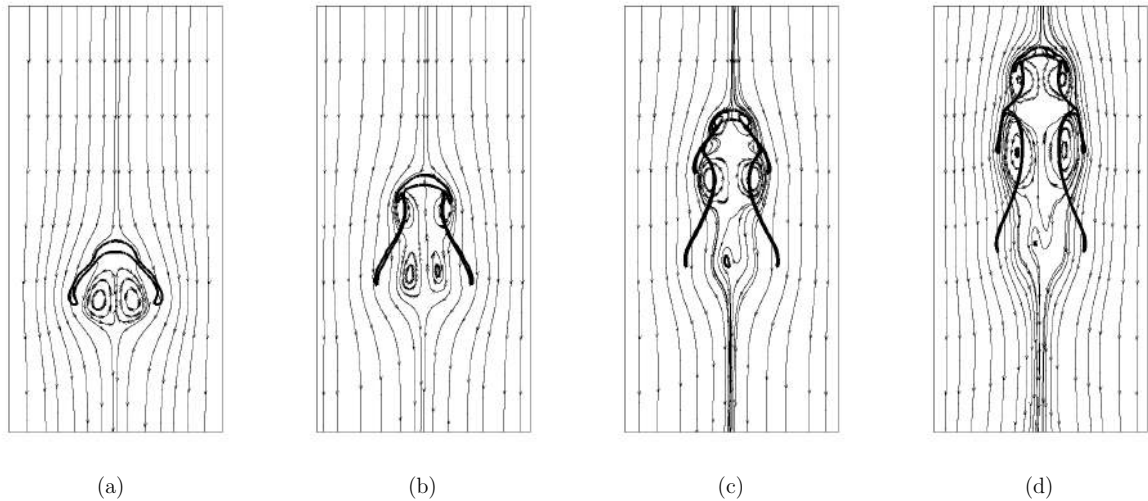


Figura 5.28: Evolução temporal da forma da bolha sobre linhas de correntes, teste A_7 : (a) $t^* = 7,27$; (b) $t^* = 10,90$; (c) $t^* = 14,55$ e (d) $t^* = 18,18$.

5.8.2 Análise qualitativa e quantitativa para vários regime de movimentação da bolha

Uma vez feita a análise de sensibilidade da metodologia IMERSPEC-FT, é apresentada a validação da metodologia proposta de modo que a influência da condição de contorno seja mínima e o número dos pontos de colocação N seja suficiente para representar a solução fisicamente correta. Uma vez que tais exigências sejam respeitadas, pode-se comparar com a simulação numérica bidimensional apresentada por Villar (2007), a qual utiliza o método da diferenças finitas centradas, com malha adaptativa, acoplado ao método *Front-tracking* e condição de contorno periódica em todas as direções.

Para a validação da metodologia, foram simuladas numericamente bolhas em ascensão para diferentes regimes, tais como cilíndrico, elipsoidal e calota-esférica. Além disso, foram analisados o regime *skirted* e, por fim, o regime *wobbling*. Além disso, testes para verificar a capacidade do código IMERSPEC-FT de simular numericamente a ascensão de uma única bolha com altas razões das propriedades físicas foram apresentados. Tais resultados foram comparados com a simulação numérica axissimétrica de Hua and Lou (2007) que utilizaram o método dos volumes finitos acoplado com o método *Front-tracking*.

Baixas razões de propriedades físicas

Foram realizadas dez simulações numéricas de ascensão de bolhas com baixa razões de propriedades físicas. Nas Tabs. A.1, A.2, A.3 e A.5, disponíveis no Apêndice A, apresentam-se as condições de entrada de cada experimento numérico do presente trabalho, sendo que o teste A_2 e A_7 foram apresentados na análise de sensibilidade.

Nas Tabs. 5.14 e 5.15 tem-se uma comparação da geometria da bolha e do número de Reynolds em regime estacionário obtido no presente trabalho com os resultados observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007). Para quantificar tal análise calculo-se a diferença relativa dada pela Eq. 5.28.

Na Tab. 5.14 são apresentados os testes realizados no presente trabalho para $\lambda = 2,0$ e $\gamma = 2,0$. Nos testes $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6$ e A_7 notam-se que o número de Reynolds terminal obtido no presente trabalho se aproxima do experimento de Clift, Grace and Weber (1978), mostrando que a metodologia está quantitativamente validada para baixa razões de propriedades físicas. Além disso, demonstrou melhores resultados que as simulações numérica de

Villar (2007) ao quantificar a diferença relativa. Cabe ressaltar que as simulações numéricas do presente trabalho e de Villar (2007) são bidimensionais, enquanto que o experimento de Clift, Grace and Weber (1978) é tridimensional.

Para validação qualitativa dos resultados apresentados no presente trabalho avaliou-se a geometria da bolha quando o escoamento atingiu o regime permanente. Na Tab. 5.14 tem-se a forma geométrica da bolha obtida no presente trabalho para diferentes regimes, e é notório que, de acordo com o diagrama de Clift, Grace and Weber (1978), que a bolha alcança o formato esperado, validando qualitativamente a metodologia proposta no presente trabalho para aplicação em escoamentos bifásicos com baixa razões de propriedades físicas. Os campos da função indicadora e da vorticidade para os testes A_5 e A_6 são encontrados no Apêndice A, Figs. A.1 e A.1 e Figs. A.3 e A.4, respectivamente.

É importante ressaltar que para os testes A_5 e A_7 é necessária a utilização de filtros para obter resultados satisfatórios, enquanto que os testes A_1 , A_2 , A_3 , A_4 e A_6 a utilização de filtros compromete a deformação da bolha e, conseqüentemente, o número de Reynolds terminal. O filtro utilizado para os testes A_5 e A_7 foi o filtro *Lanczos*.

Na Tab. 5.15 apresenta dois regime de bolhas com razão de massa específica $\lambda = 10,0$. Os resultados apresentados no presente trabalho, quando comparados com o experimento de Clift, Grace and Weber (1978), apresentaram boas aproximações. Portanto, a metodologia encontra-se validada qualitativamente e quantitativamente para simulações de escoamentos bifásicos com razão de massa específica $\lambda = 10,0$. Para estes testes utilizou-se o filtro *Lanczos*.

Wobbling

As bolhas elipsoidais comumente submetem-se à dilatações periódicas ou movimentos oscilantes caracterizam um caso particularmente complexo de regime de movimento de bolha, denominado regime *wobbling*. Este regime, portanto, é um regime de bolha em que esta apresenta sua forma e trajetória variando constantemente. A bolha neste regime está submetida às deformações permanentes resultantes da instabilidade e da assimetria na evolução da esteira.

Segundo Ellingsen and Risso (2001), este regime se desenvolve de dois modos. O primeiro modo leva a uma trajetória zigue-zague e o segundo modo a uma trajetória de hélice (VILLAR, 2007), Fig. 5.29. Em um problema bidimensional, ocorre o movimento

Tabela 5.14: Comparação da forma da bolha em regime permanente e do número de Reynolds observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007) com os resultados obtidos no presente trabalho para $\lambda = 2,0$.










Clift, Grace and Weber (1978)	Villar (2007)	Presente trabalho	
Teste A ₁			
$Eo = 5,0 \times 10^{-1}$ $M = 5,0 \times 10^{-3}$ $Re \approx 0,36$	$Re \approx 0,293$ $E_r = 18,61\%$		$Re \approx 0,5355$ $E_r = 40,92\%$
Teste A ₂			
$Eo = 10,0$ $M = 2,0 \times 10^{-2}$ $Re \approx 9,0$	-		$Re \approx 9,5$ $E_r = 5,6\%$
Teste A ₃			
$Eo = 20,0$ $M = 2,8 \times 10^{-2}$ $Re \approx 18,0$	-		$Re \approx 14,7$ $E_r = 22,23\%$
Teste A ₄			
$Eo = 1,0$ $M = 5,05 \times 10^{-7}$ $Re \approx 40,0$	-		$Re \approx 34,0$ $E_r = 17,64\%$
Teste A ₅			
$Eo = 50,0$ $M = 5,0 \times 10^{-4}$ $Re \approx 85,00$	$Re \approx 53,07$ $E_r = 60,16\%$		$Re \approx 77,53$ $E_r = 9,63\%$
Teste A ₆			
$Eo = 5,0$ $M = 5,0 \times 10^{-7}$ $Re \approx 125,00$	$Re \approx 69,14$ $E_r = 44,68\%$		$Re \approx 100,34$ $E_r = 19,72\%$
Teste A ₇			
$Eo = 410,0$ $M = 5,0 \times 10^{-6}$ $Re \approx 1050,00$	$Re \approx 641,15$ $E_r = 87,16\%$		$Re \approx 1252,09$ $E_r = 19,24\%$

Tabela 5.15: Comparação da forma da bolha em regime estacionário e do número de Reynolds observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) com os resultados obtidos no presente trabalho para $\lambda = 10,0$.

Clift, Grace and Weber (1978)	Presente trabalho	
Teste B_1		
$Eo = 0,88$		
$M = 8,8 \times 10^{-3}$		$Re \approx 0,96$
$Re \approx 0,8$		$E_r = 20,0\%$
Teste B_2		
$Eo = 18,0$		
$M = 3,6 \times 10^{-2}$		$Re \approx 25,0$
$Re \approx 15,0$		$E_r = 66,7\%$

zigue-zague por impossibilidade de se obter a trajetória em hélice. Liu, Zheng and Zhang (2005) mostram resultados de análises experimentais das estruturas induzidas no escoamento por uma bolha de gás em uma coluna retangular usando a técnica experimental do *Particle Image Velocimetry* (PIV). Estes autores observaram que além da trajetória em zigue-zague e hélice a bolha rotaciona sobre seu próprio eixo.

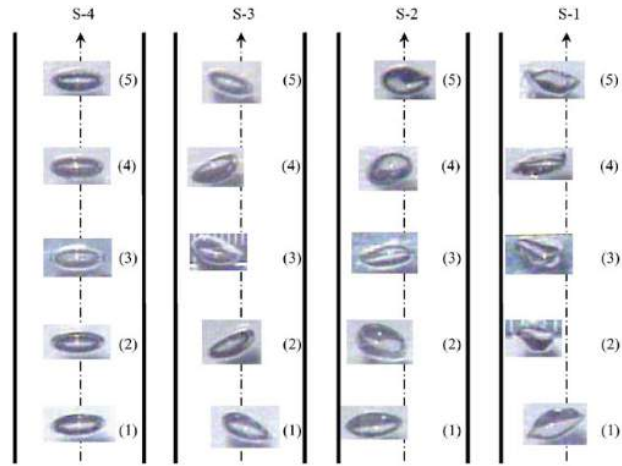


Figura 5.29: Trajetória da bolha em regime *wobbling* (ELLINGSEN; RISSO, 2001).

As condições de entrada para a simulação numérica do regime *wobbling* de movimento da bolha são encontrados na Tab. A.5 Apêndice A, teste C_1 . De acordo com a análise de sensibilidade, necessita-se que a dimensão do domínio seja $D = 6,7 \times d_b$ para que não tenha influência da condição de não-deslizamento sobre a bolha. Assim, para este caso o tamanho do domínio é de $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6] [m]$ e $d_b = 0,03 [m]$. Pela Fig. 5.30 (a) observa-se que a bolha apresentou dilatações periódicas, porém não estabeleceu uma trajetória zigue-zague.

Com o aumento do domínio para $D = [0,0;0,312] \times [0,0;1,872]$ [m], observa-se, Fig. 5.30 (b), o movimento zigue-zague, demonstrando que para esta simulação o tamanho do domínio estipulado na análise de sensibilidade altera os resultados. Na Fig. 5.31 visualiza-se tal observação de forma mais nítida. Além disso, comparou-se qualitativamente o resultado do presente trabalho com a simulação numérica de Villar (2007) e nota-se a semelhança da geometria e da trajetória da bolha.

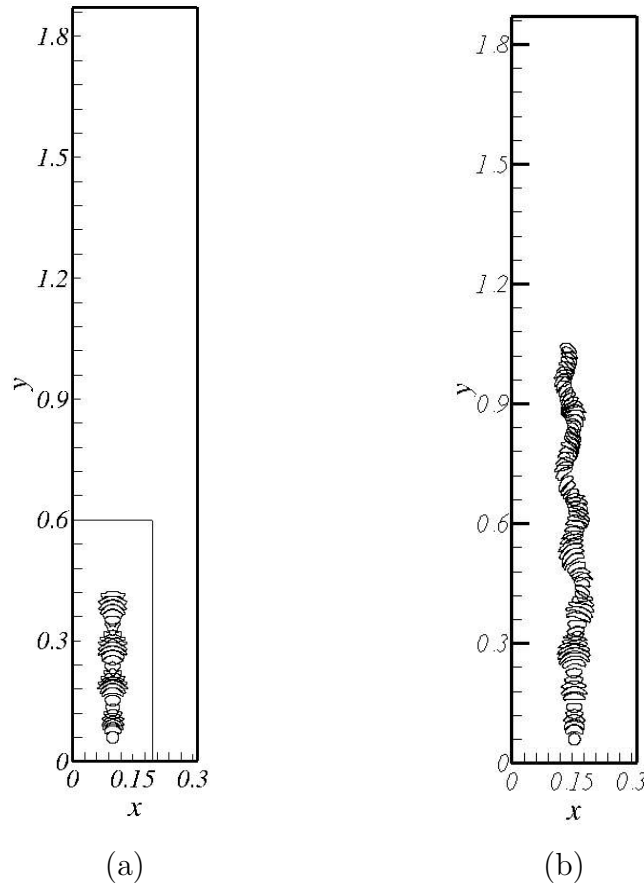


Figura 5.30: Vizualização do domínio de cálculo e da deformação da bolha ascendente ao longo do tempo do presente trabalho para o teste C_1 : (a) $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ (b) $D = [0,0;0,312] \times [0,0;1,872]$.

Na Fig. 5.32 tem-se a evolução do número de Re ao longo do tempo obtidos no trabalho de Villar (2007) e no presente trabalho para os domínios $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ e $D = [0,0;0,312] \times [0,0;1,872]$. Nota-se um comportamento oscilatório. Isso ocorre devido a mudanças na forma da bolha. Para calcular o número de Reynolds obtido no presente

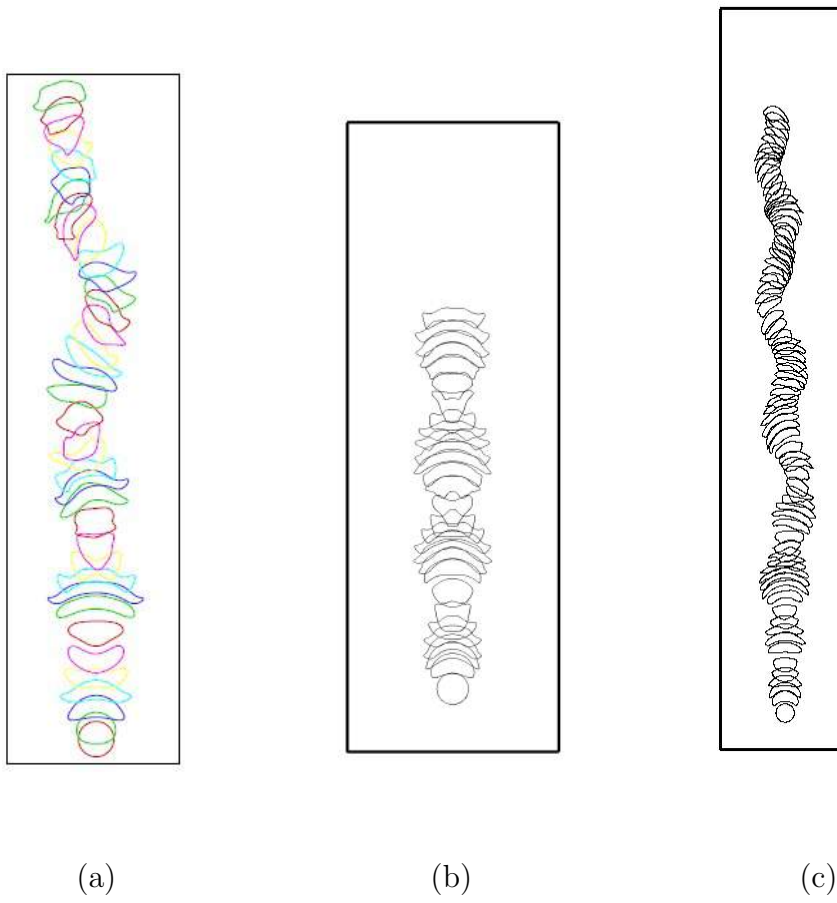


Figura 5.31: Deformação da bolha ascendente ao longo do tempo, teste C_1 : (a) Villar (2007), (b) presente trabalho - $D = [0, 0; 0, 2] \times [0, 0; 0, 6]$ e (c) presente trabalho - $D = [0, 0; 0, 312] \times [0, 0; 1, 872]$.

trabalho e de Villar (2007) para comparação com o experimento de Clift, Grace and Weber (1978) faz-se a média temporal, ou seja, $\overline{Re} = \frac{\sum_1^{t_f} Re}{t_f}$, onde t_f é o intervalo de tempo de amostragem sobre o qual foi calculado a média. Na Tab. 5.16 tem-se a comparação com o experimento de Clift, Grace and Weber (1978), demonstrando a boa aproximação do presente trabalho em relação ao trabalho Villar (2007).

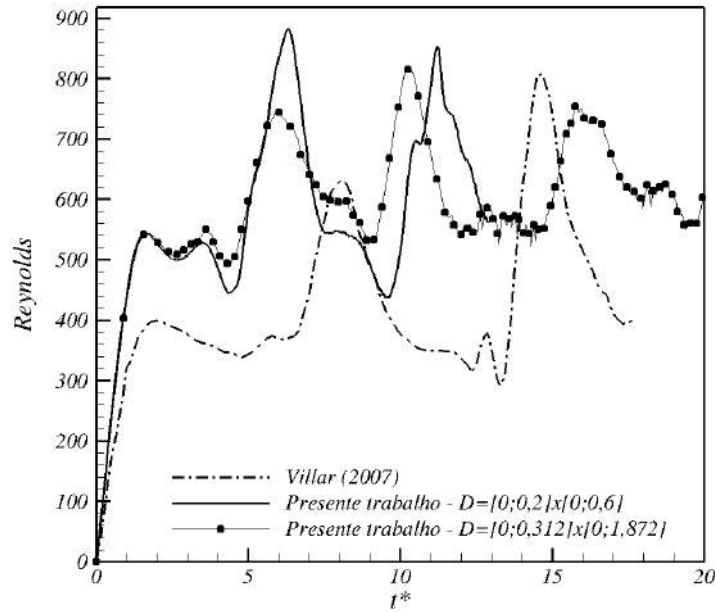


Figura 5.32: Evolução do Reynolds ao longo do tempo para $Eo = 5,09$ e $M = 5,10 \times 10^{-10}$ obtido no trabalho de Villar (2007) e no presente trabalho, teste C_1 .

A evolução do campo de vorticidade é apresentada na Fig. 5.33 (a)-(g). Nota-se que vórtices em fase são desprendidos da interface e a medida que a bolha se deforma, observa-se o desprendimento de vórtices não simétricos sendo liberados alterando sua trajetória, que por sua vez afetam novamente a vorticidade, ocasionando assim uma trajetória zigue-zague. Observa-se que a altíssima acurácia no cálculo das derivadas espaciais permite obter alta qualidade no campo de vorticidade.

Além disso, a análise qualitativa da forma da bolha com dados experimentais de Liu, Zheng and Zhang (2005) é apresentada. Nota-se, pelas Figs. 5.34 (a)-(f), dados experimentais de Liu, Zheng and Zhang (2005), e Figs. 5.35 (a)-(f), resultados do presente trabalho, semelhança entre as formas da bolha. É importante ressaltar que os resultados do presente

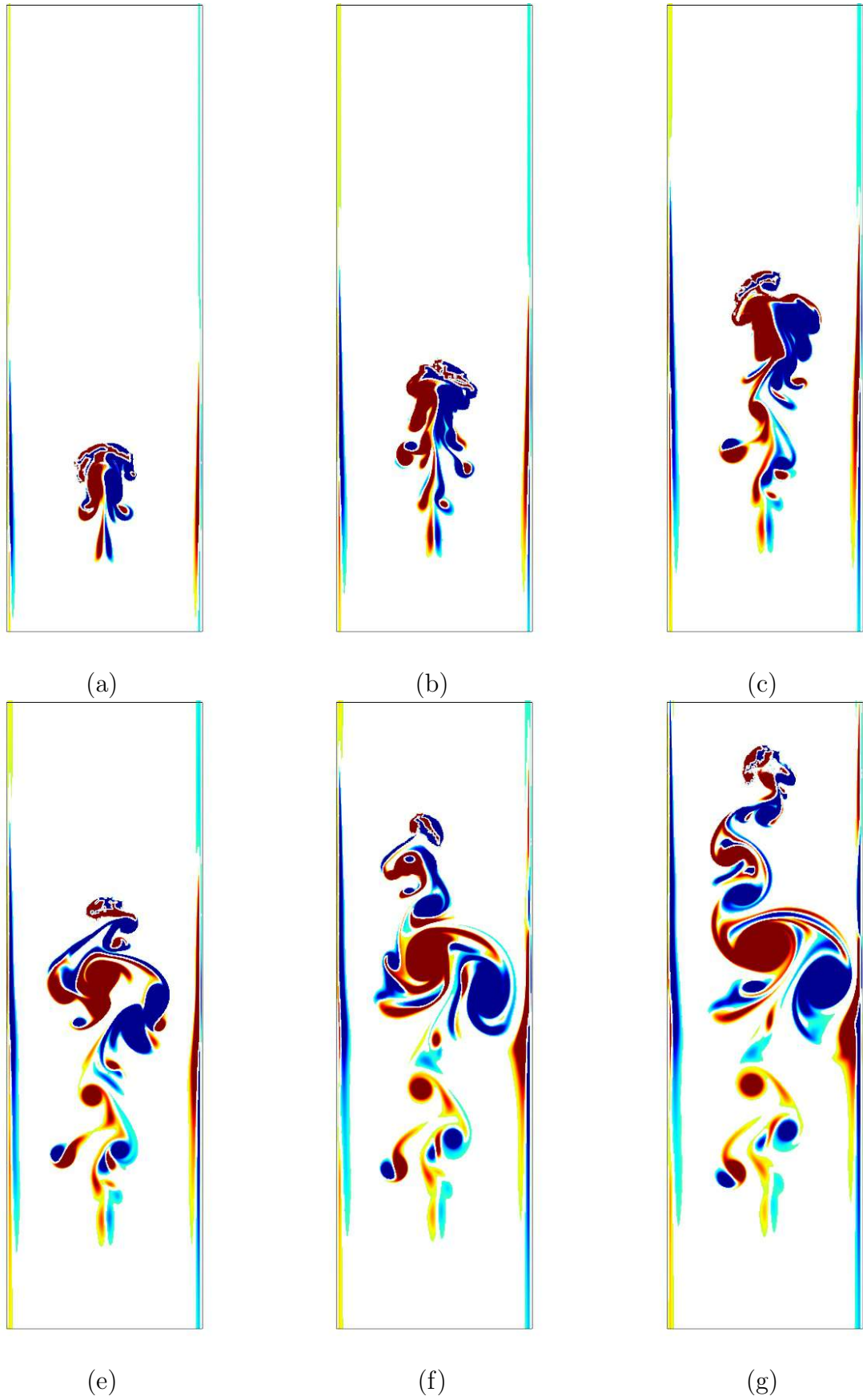


Figura 5.33: Campo de vorticidade do teste C_1 em: (a) $t^* = 17,63$; (b) $t^* = 24,90$; (c) $t^* = 32,36$; (d) $t^* = 39,63$; (e) $t^* = 47,27$; (f) $t^* = 54,54$.

Tabela 5.16: Comparação da forma da bolha em regime estacionário e do número de Reynolds observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007) com os resultados obtidos no presente trabalho, teste C_1 .

Caso C_1 $Eu = 5,09$ $M = 5,10 \times 10^{-10}$	Re	ϵ
Experimento Clift, Grace and Weber (1978)	900,00	-
Villar (2007) $\lambda = 2; \gamma = 2$	475,65	47,15%
Presente trabalho $\lambda = 2; \gamma = 2$	599,00	33,44%

trabalho apresentam oscilações na interface, e isso pode ser explicado devido à necessidade de refinamento dos pontos de colocação.

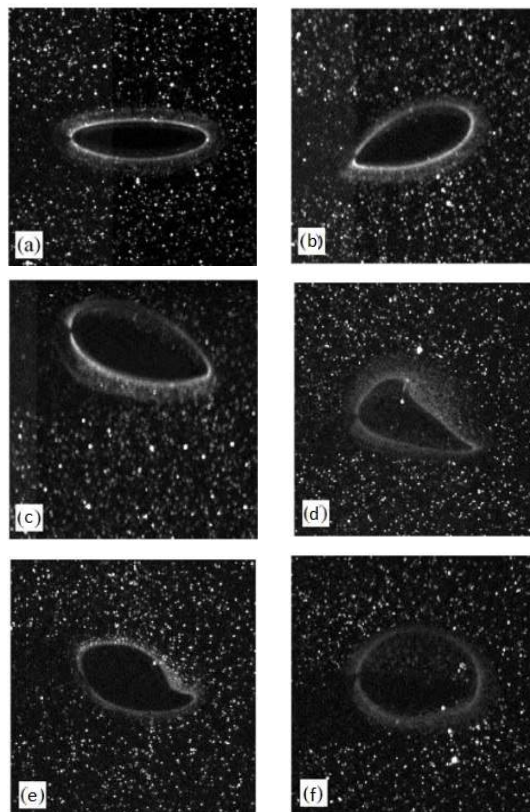


Figura 5.34: Dados experimentais de Liu, Zheng and Zhang (2005) da forma da bolha em regime *wobbling*, teste C_1 .

Altas razões de propriedades físicas

Devido à aproximação apresentada no Cap. 3, o termo $\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i}$ transformado é tratado

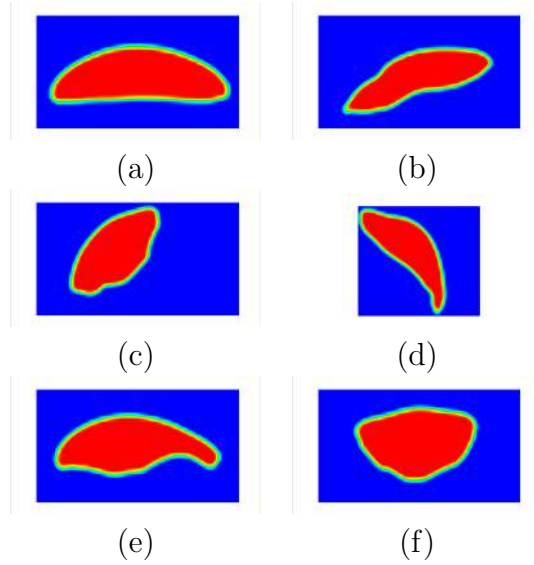


Figura 5.35: Campo da função indicadora. Resultados da simulação numérica do presente trabalho da forma da bolha em regime *wobbling*, teste C_1 .

como paralelo ao vetor número de onda \vec{k} em relação ao plano π , ou seja, a massa específica ρ é considerada constante. Dessa maneira, pelos resultados apresentados na seção 5.7, na qual foi realizado o cálculo da magnitude das correntes espúrias, sob influência da variação de propriedades físicas, é notório que, para $\lambda = \rho_c/\rho_d$ próximo de 1,0, ou seja, para pequenas variações de λ , as oscilações numéricas são menores. Para o teste apresentado foram testados dois filtros no Cap. 4, o filtro *Lanczos* e o filtro exponencial, e observou-se que para altas variações de propriedades físicas, as simulações utilizando o filtro exponencial obtiveram melhores resultados.

No anseio de resolver problemas com elevadas variações de propriedades físicas, testes com diferentes razões de massa específica para ascensão de uma bolha foram realizados. Com esse intuito, foi proposto o teste C_2 . As condições de entrada para a simulação numérica deste teste encontram-se na Tab. A.6 no Apêndice. A, teste C_2 , e neste teste, de acordo com o experimento de Bhaga and Weber (1981) a bolha se mantém esférica.

Para validação deste caso foi feita a comparação com o trabalho experimental de Bhaga and Weber (1981), que obteve um número de Reynolds em regime estacionário igual a $Re = 0,068$. Bhaga and Weber (1981) utilizaram uma razão de massa específica $\lambda = 1.367$. Nas Figs. 5.36 e 5.37 são ilustradas graficamente o número de Reynolds ao longo do tempo

para a simulação da ascensão da bolha com diferentes λ 's. Na Fig. 5.36 utilizou o filtro *Lanczos* e na Fig. 5.37 o filtro exponencial. Foram simulados para as razões λ : 100, 200 e 500. Nota-se que a medida que aumenta a razão de massa específica o Re distancia do dado experimental de Bhaga and Weber (1981). Na Fig. 5.37 foram simulados para as razões: 100, 200, 300, 500, 1.000 e 1.500. Observa-se que para este filtro, ao contrário do que foi evidenciado na Fig. 5.36, o Re obtido para as baixas razões distanciaram do Reynolds almejado. Para as razões 500 e 1.000 nota-se uma boa aproximação com o dado experimental de Bhaga and Weber (1981) como esperado, uma vez que o autor utilizou $\lambda = 1.367$.

Quantitativamente, tais afirmações são observadas através do cálculo do E_r na Tab. 5.17. Conclui-se que para altas razões de massa específica o filtro exponencial mostram-se mais acurado e aproxima melhor dos resultados experimentais, lembrando que o experimento é tridimensional e o presente trabalho é bidimensional.

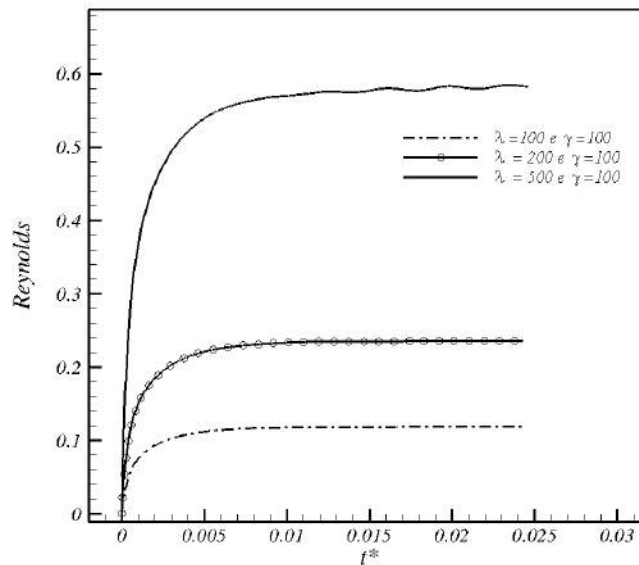


Figura 5.36: Evolução do número de Reynolds ao longo do tempo na simulação numérica do caso teste C_2 utilizando o filtro *Lanczos*.

Outra análise realizada foi a perda de área. Nas Figs. 5.38 e 5.39 tem-se a perda de área ao longo do tempo para as simulações numéricas utilizando os filtros *Lanczos* e exponencial, respectivamente. Nota-se que o filtro *Lanczos* apresentou uma perda de área maior, porém em ambos os casos, a perda de área foi independente das variações das razões

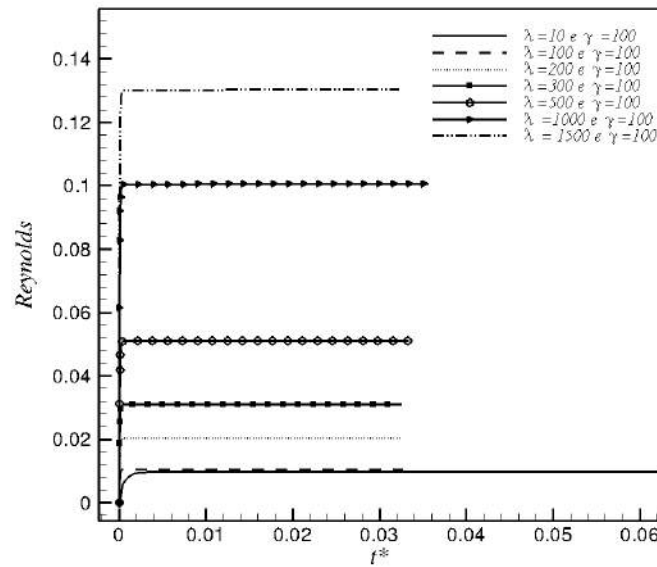


Figura 5.37: Evolução do número de Reynolds ao longo do tempo na simulação numérica do caso teste C_2 utilizando o filtro exponencial.

Tabela 5.17: Comparação do número de Reynolds observados no experimento de Bhaga and Weber (1981) e nas simulações numéricas do presente trabalho para os filtros *Lanczos* e exponencial, teste C_2 .

Razões	Presente trabalho Filtro <i>Lanczos</i>	Presente trabalho Filtro Exponencial
$\lambda = 100;$	$Re = 0,12$	$Re = 0,01$
$\gamma = 100$	$\varepsilon = 76,47\%$	$\varepsilon = 85,29\%$
$\lambda = 200;$	$Re = 0,23$	$Re = 0,02$
$\gamma = 100$	$\varepsilon = 238,00\%$	$\varepsilon = 70,58\%$
$\lambda = 300;$	-	$Re = 0,03$
$\gamma = 100$	-	$\varepsilon = 55,88\%$
$\lambda = 500;$	$Re = 0,58$	$Re = 0,05$
$\gamma = 100$	$\varepsilon = 752,94\%$	$\varepsilon = 26,47\%$
$\lambda = 1.000;$	-	$Re = 0,10$
$\gamma = 100$	-	$\varepsilon = 47,05\%$
$\lambda = 1.500;$	-	$Re = 0,13$
$\gamma = 100$	-	$\varepsilon = 91,17\%$

de massa específica.

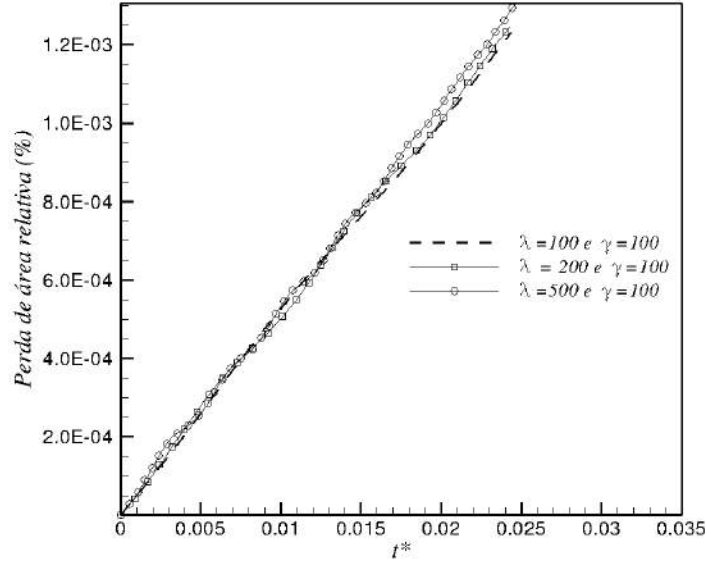


Figura 5.38: Evolução da perda de área ao longo do tempo na simulação numérica utilizando o filtro *Lanczos*, teste C_2 .

As figuras 5.40 e 5.41 ilustram o comportamento ao longo de x do salto de pressão. Para as simulações numéricas realizadas com o filtro *Lanczos* observa-se que somente para a razão $\lambda = 100$ obtém-se a curva esperada. Isso explica os valores de ε na Tab. 5.17 para as razões $\lambda = 200$ e $\lambda = 500$. Porém, na Fig. 5.41 nota-se que o comportamento do salto de pressão para as simulações numéricas com o filtro exponencial está qualitativamente mais adequado. Somente para $\lambda = 1.500$ observa-se um comportamento oscilatório não esperado.

Quantitativamente, para este caso tem-se o salto de pressão analítico $\Delta p_a = 3,58$ (lei de Yang Laplace, Eq. 5.24). Na Tab. 5.18 apresenta-se o erro relativo $E_p = ((|\Delta p_a - \Delta p|)/\Delta p_a) * 100$, entre a solução analítica e a solução numérica. Analisando os resultados apresentados nessa tabela conclui-se que as simulações numéricas com o filtro *Lanczos* não apresentaram bons resultados, evidenciando o que já foi observado nas Figs. 5.40 e 5.41.

Diante dos testes apresentados, foi simulado o caso C_3 para validação do método para altas razões de propriedades físicas. As condições de entrada para a simulação numérica deste caso são encontradas na Tab. A.7, no Apêndice. A. O filtro utilizado foi o exponencial.

Na Tab. 5.19 apresenta-se os números de Eo e M utilizados no teste. Nota-se a boa

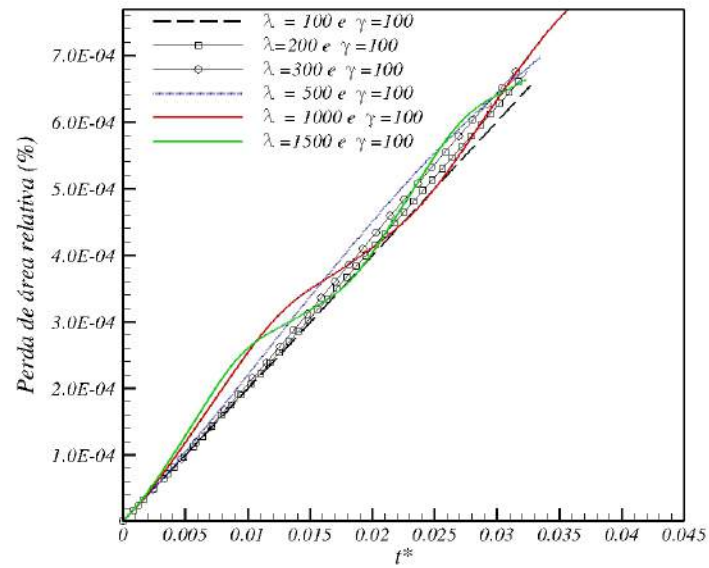


Figura 5.39: Evolução da perda de área ao longo do tempo na simulação numérica utilizando o filtro exponencial, teste C_2 .

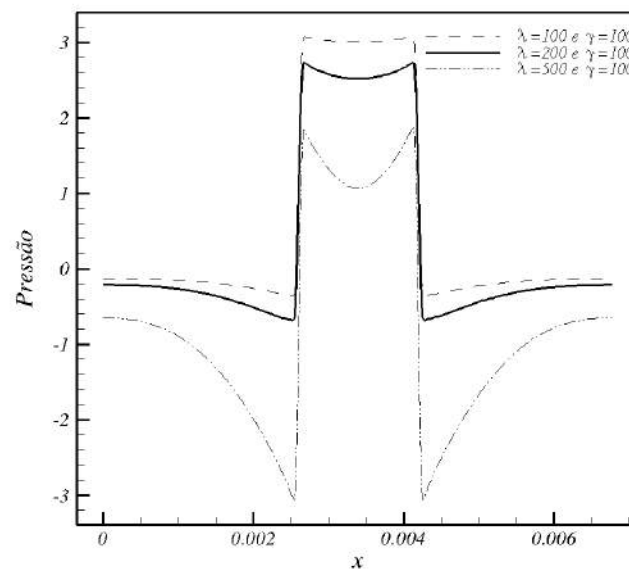


Figura 5.40: Salto de pressão ao longo de x utilizando o filtro *Lanczos*, teste C_2 .

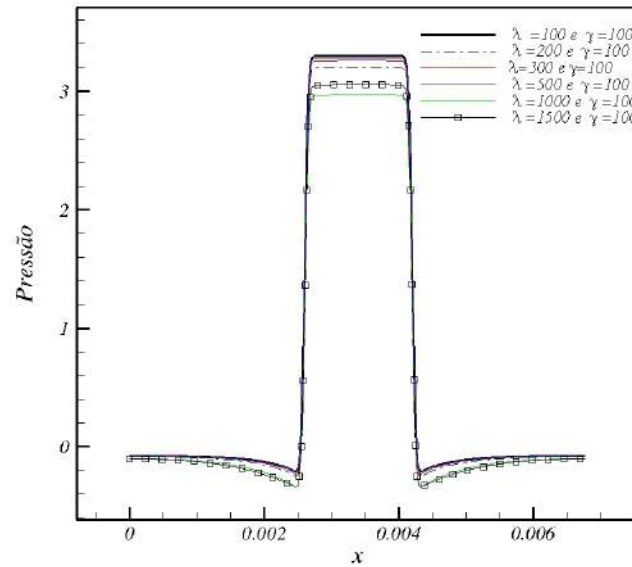
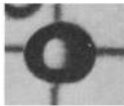




Figura 5.41: Salto de pressão ao longo de x utilizando o filtro exponencial, teste C_2 .

Tabela 5.18: Comparação do número de Reynolds terminal observados no experimento de Bhaga and Weber (1981) e nas simulações numéricas do presente trabalho, teste C_2 , para os filtros *Lanczos* e exponencial.

Razões	Presente trabalho Filtro <i>Lanczos</i>	Presente trabalho Filtro Exponencial
$\lambda = 100;$	$\Delta p = 3,15$	$\Delta p = 3,38$
$\gamma = 100$	$E_p = 12,01\%$	$E_p = 5,69\%$
$\lambda = 200;$	$\Delta p = 2,78$	$\Delta p = 3,29$
$\gamma = 100$	$E_p = 22,37\%$	$E_p = 8,24\%$
$\lambda = 300;$	-	$\Delta p = 3,34$
$\gamma = 100$	-	$E_p = 6,75\%$
$\lambda = 500;$	$\Delta p = 1,9638$	$\Delta p = 3,36$
$\gamma = 100$	$E_p = 45,25\%$	$E_p = 6,14\%$
$\lambda = 1000;$	-	$\Delta p = 3,09$
$\gamma = 100$	-	$E_p = 13,86\%$
$\lambda = 1500;$	-	$\Delta p = 3,18$
$\gamma = 100$	-	$E_p = 11,26\%$

Tabela 5.19: Comparação da forma da bolha em regime estacionário e do número de Reynolds observados no experimento de Bhaga and Weber (1981) e na simulação numérica de Hua and Lou (2007) com os resultados obtidos no presente trabalho, teste C_3 .

Caso C_3 $Eo = 17,70$ $M = 711,00$	Forma da bolha	Re	E_r
Experimento Bhaga and Weber (1981)		0,232	-
Hua and Lou (2007) $\lambda = 1000; \gamma = 100$		0,211	9,05%
Presente trabalho $\lambda = 1000; \gamma = 100$		0,294	26,72%

aproximação com os dados experimentais de Bhaga and Weber (1981) e com os dados da simulação numérica do trabalho de Hua and Lou (2007), os quais utilizaram o método dos volumes finitos para simular uma bolha axisimétrica em um domínio bidimensional. Além disso, a forma da bolha se manteve cilíndrica como se esperava. Nota-se que o presente trabalho apresentou uma diferença maior do Reynolds terminal em regime permanente do experimento de Bhaga and Weber (1981) e que a à simulação numérica do trabalho de Hua and Lou (2007). Isso pode ser explicado devido ao fato do presente trabalho ser bidimensional, o que despreza efeitos tridimensionais do escoamento.

O erro relativo da perda de área máxima foi de $7,8 \times 10^{-4}\%$. O salto de pressão analítico, para esta caso C_3 , é $\Delta p_a = 2,49$ e o salto de pressão obtido no presente trabalho foi de $\Delta p = 1,80$. Assim, o erro relativo em relação ao salto de pressão é $E_r = 27,71\%$.

5.8.3 IMERSPEC-VOF: Regime cilíndrico

Para validar a metodologia IMERSPEC-VOF foi simulado o caso A_1 mostrado na seção 5.8.2. O teste consiste em simular o movimento de uma bolha cilíndrico. As condições de entrada para a simulação numérica encontram-se no Apêndice. A, Tab. A.1, teste A_1 . No teste apresentado utilizou-se um tempo adimensional baseado no diâmetro da bolha, $t^* =$

$\frac{t}{\sqrt{d_b/g}}$. As condições de contorno utilizadas foram de não-deslizamento em x e periodicidade em y . O domínio de cálculo utilizado é apresentado na Fig. 5.19.

Na Fig. 5.42 tem-se a evolução temporal do número de Reynolds, onde se observa que a bolha atinge o regime permanente em $Re \approx 0,55$. Clift, Grace and Weber (1978) em seu experimento obteve para este teste um número de Reynolds $Re \approx 0,36$. Comparando, tem-se $E_r = 52,7\%$, lembrando que o experimento de Clift, Grace and Weber (1978) é tridimensional e a simulação numérica do presente trabalho é bidimensional.

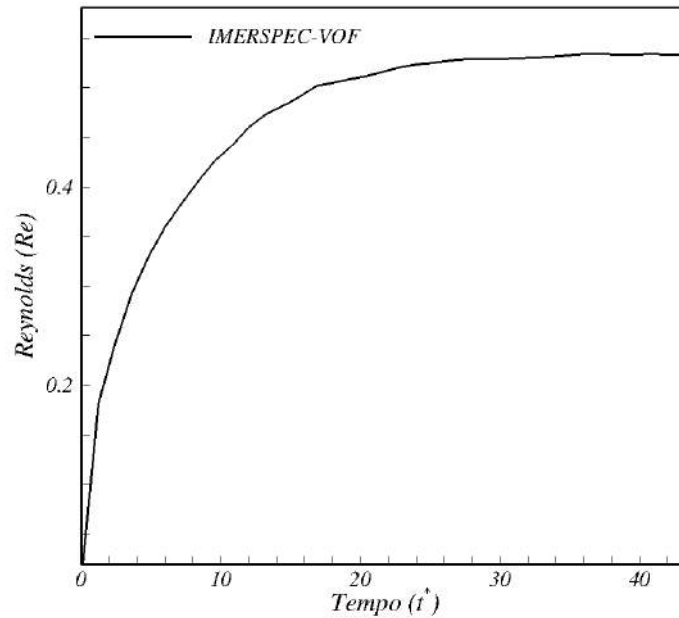


Figura 5.42: Evolução temporal do número de Reynolds do teste A_1 .

Na Fig. 5.43 tem a evolução temporal da ascensão da bolha. Nota-se que a bolha manteve o regime cilíndrico, porém apresenta uma pequena deformação na bolha, a qual a geometria aproxima da forma cilíndrica, aceitável pois bolhas neste regime usualmente aproximam-se de uma elipse desde que a proporção do raio menor para o maior seja menor que 10%.

Na Fig. 5.44 tem-se o perfil do campo de pressão traçado no centro da interface evidenciando o salto de pressão. Para uma curva cilíndrica temos o salto de pressão analítico dado pela lei de Young Laplace (Eq. 5.24, Δp_a). Para este teste, $\Delta p_a = 600 [N/m^2]$. Comparando com o salto de pressão obtidos da simulação numérica em $t^* = 0,0$ e $t^* = 36,36$

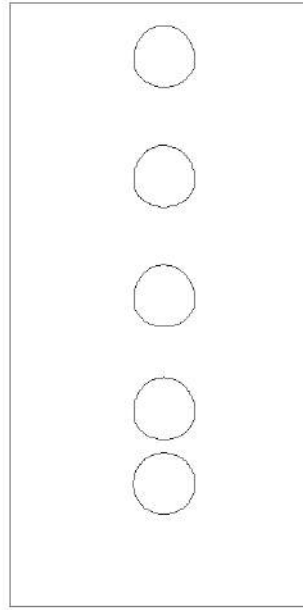


Figura 5.43: Representação gráfica da forma da bolha para o teste A_1 .

tem-se um $\Delta p = 597,40 \text{ [N/m}^2\text{]}$ e $\Delta p = 592,81 \text{ [N/m}^2\text{]}$, respectivamente. O erro relativo $E_p = ((|\Delta p_a - \Delta p|)/\Delta p_a) * 100$ calculado é 0,43% para $t^* = 0,0$ e 1,19% para $t^* = 36,36$, podendo concluir que o salto de pressão apresenta-se de acordo com o que se espera.

5.9 Comparação entre metodologias para a bolha em regime cilíndrico: IMERSPEC-FT x IMERSPEC-VOF

Nesta seção é realizada a comparação entre as metodologias IMERSPEC-VOF e IMERSPEC-FT para a simulação numérica da ascensão de uma bolha em regime cilíndrico. As condições de entrada para este teste são as mesmas em ambos os códigos e encontram-se no Apêndice. A, Tab. A.1, teste A_1 . Na Fig. 5.45 apresenta-se a evolução temporal do número de Reynolds para ambas as metodologias e nota-se a semelhança no comportamento dos perfis. Na Tab. 5.20 é realizada a comparação do número de Reynolds em regime estacionário observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007) com os resultados obtidos nas metodologias IMERSPEC-FT e IMERSPEC-

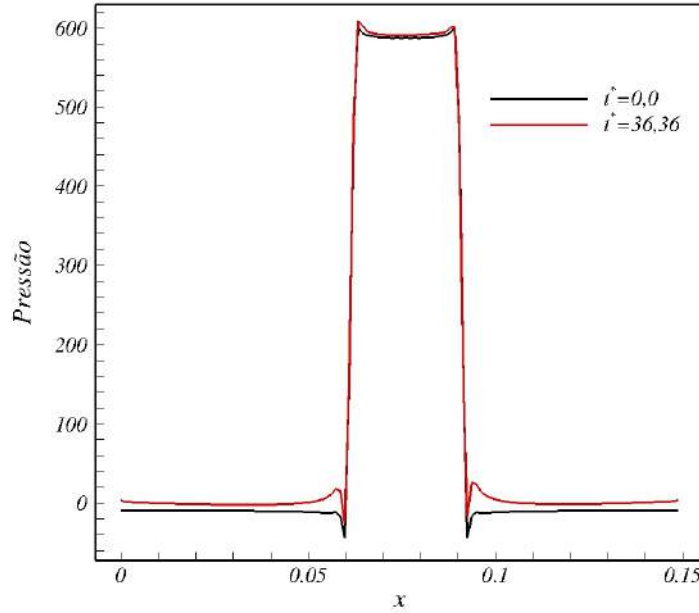


Figura 5.44: Perfil do campo de pressão traçado no centro da interface para o teste A_1 utilizando a metodologia IMERSPEC-VOF em $t^* = 0,0$ e $t^* = 36,36$.

VOF. Nota-se que o presente trabalho apresentou um E_r mais elevado quando comparado com o resultado apresentado por Villar (2007). Além disso, é notória a aproximação do número de Reynolds obtido em ambas as metodologias, evidenciando que a metodologia IMERSPEC-VOF está validada para o regime de bolhas cilíndricas sem deformação.

Na Fig. 5.46 tem-se o perfil do campo de pressão onde observa-se o salto de pressão. Para este regime de bolha, pela lei de Yang-Laplace tem-se o salto de pressão analítico, que para este teste é $\Delta p_a = 600 \text{ [N/m}^2\text{]}$. Comparando com os saltos de pressão obtidos da simulação numérica em $t^* = 36,36$ para as metodologias IMERSPEC-VOF e IMERSPEC-FT tem-se um $\Delta p = 592,81 \text{ [N/m}^2\text{]}$ e $\Delta p = 596,30 \text{ [N/m}^2\text{]}$, respectivamente. O erro relativo $E_p = ((|\Delta p_a - \Delta p|)/\Delta p_a) * 100$ calculado é de 1,19% para a metodologia IMERSPEC-VOF e 0,61% para a metodologia IMERSPEC-FT, podendo concluir-se que o salto de pressão está próximo do valor esperado.

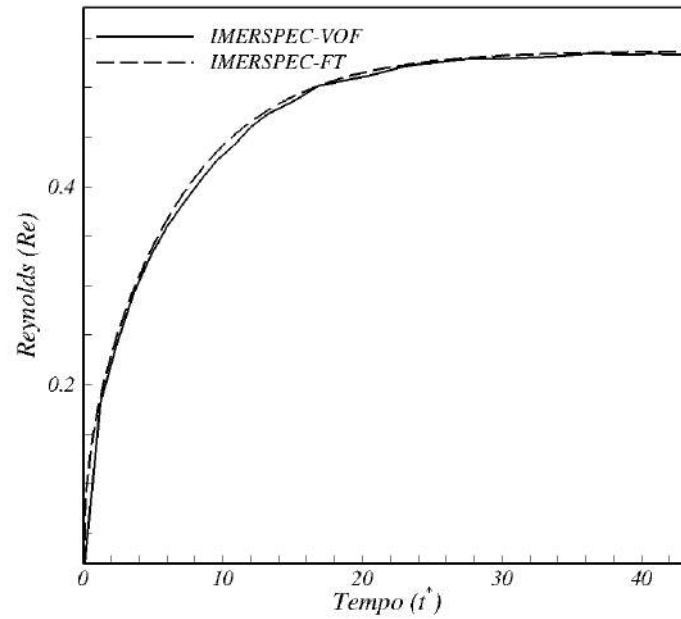


Figura 5.45: Evolução temporal do número de Reynolds do teste A_1 .

Tabela 5.20: Comparação do número de Reynolds em regime estacionário observados no experimento de Clift, Grace and Weber (1978) e na simulação numérica de Villar (2007) com os resultados obtidos nas metodologias IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF, teste A_1 .

Caso A_1 $Eu = 5,0 \times 10^{-1}$ $M = 5,0 \times 10^{-3}$	Re	E_r
Experimento Clift, Grace and Weber (1978)	0,38	-
Villar (2007) $\lambda = 2; \gamma = 2$	0,293	22,9%
Presente trabalho - IMERSPEC-FT $\lambda = 2; \gamma = 2$	0,5355	40,92%
Presente trabalho - IMERSPEC-VOF $\lambda = 2; \gamma = 2$	0,5338	40,47%

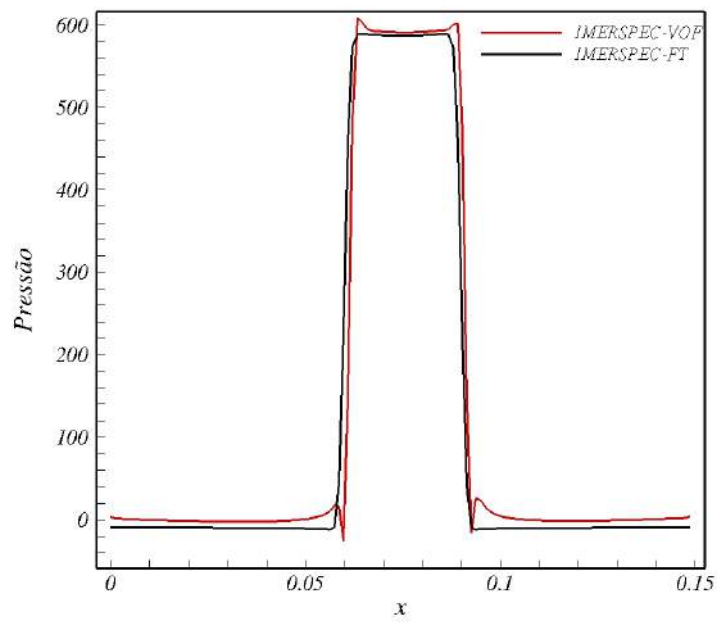


Figura 5.46: Perfil do campo de pressão traçado no centro da interface para o teste A_1 utilizando a metodologia IMERSPEC-VOF e IMERSPEC-FT em $t^* = 36,36$.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

6.1 Conclusões

A extensão da metodologia IMERSPEC para propriedades físicas variáveis foi desenvolvida e implementada. De acordo com os resultados observados na verificação, erros de arredondamento de máquina foram atingidos, mostrando a alta acurácia da metodologia.

A simplificação realizada na modelagem matemática em relação ao termo $\frac{1}{\rho} \nabla p$ foi estudada através da técnica de solução manufaturada para propriedades físicas variáveis. Mostrou-se a sensibilidade da metodologia proposta em relação ao aumento da amplitude de variação dessas propriedades, e resultados demonstraram que para amplitudes elevadas a metodologia proposta não converge.

Dois métodos para representação da interface móvel e deformável foram acoplados a metodologia IMERSPEC para propriedades físicas variáveis: *Front-tracking* (FT) e Volume of fluid (VOF).

A metodologia IMERSPEC-FT trabalha com uma malha euleriana para o cálculo do escoamento e uma malha lagrangiana para representar a interface. Para uma boa representação da interface é necessário que os pontos pertencentes a malha lagrangiana sejam redistribuídos a medida que a interface deforma. Para avaliar o procedimento de redistribuição dos pontos lagrangianos submeteu-se a interface a um campo de velocidade cisalhante, e, resultados da medida de dispersão em relação ao espaçamento inicial demonstraram a boa

eficiência do procedimento proposto.

A verificação do algoritmo implementado para inicialização da função coloração para a curva tipo circunferência e elipse na metodologia IMERSPEC-VOF foi realizada e evidenciaram bons resultados. Além disso, avaliou-se o cálculo da normal necessário para a reconstrução da interface e comparou-se com o trabalho de Gueyffier et al. (1999), mostrando que os resultados do presente trabalho estão de acordo com a literatura.

Além disso, verificou-se através do teste do disco de Zalesak o método de advecção PLIC e comparou-se com o trabalho de Gopala and Wachem (2008). Notou-se a boa acurácia da metodologia IMERSPEC-VOF.

Para avaliar a perda de massa de ambas as metodologias propostas no presente trabalho, foi realizado o teste *vortex flow*. Pelos resultados apresentados a metodologia IMERSPEC-VOF é mais conservativa que a metodologia IMERSPEC-FT. Além disso, comparou-se com os trabalhos de Silveira Neto et al. (2010) e Ceniceros et al. (2010) demonstrando que os resultados apresentados em ambos os métodos estão de acordo com a literatura.

Outra importante verificação é apresentada o cálculo da curvatura. Para avaliação deste cálculo em ambas as metodologias propostas no presente trabalho comparou-se com o cálculo da curvatura de uma circunferência, uma vez que conhece-se o seu valor exato. Notou-se, diante dos resultados apresentados, taxa de convergência da ordem de Δx para o método CELESTE implementado na metodologia IMERSPEC-VOF e quarta ordem de convergência para a metodologia IMERSPEC-FT, como esperado.

O teste das correntes espúrias para verificação da implementação da força interfacial para as metodologias IMERSPEC-FT e IMERSPEC-VOF apresentaram bons resultados. A metodologia IMERSPEC-FT foi comparada com os trabalhos de Ceniceros et al. (2010) e Marchandise et al. (2007), e alcançou resultados consistentes com os autores, mostrando novamente a alta acurácia do método proposto.

Além disso, devido à limitação apresentada na seção 3.5.3, que tem consequência nas simulações numéricas com altas razões de propriedades físicas, testes de correntes espúrias na metodologia IMERSPEC-FT para diferentes razões de propriedades físicas foram realizados utilizando dois tipos de filtro, *Lanczos* e exponencial. Com os resultados apresentados pode-se observar que para uma bolha estática a utilização do filtro exponencial foi robusto

para simulações numéricas de razões $\lambda = 13.000$ e $\gamma = 13.000$, com magnitudes de correntes espúrias na mesma ordem que as razões $\lambda = 1$ e $\gamma = 1$, o que demonstra que as correntes espúrias tem pouca influência ao tratar altas razões de propriedades físicas na simulação numérica utilizando o filtro exponencial. Porém, a simulação numérica com o filtro *Lanczos* foi robusto apenas razões de massa específica e viscosidade, respectivamente, $\lambda = 100$ e $\gamma = 100$, para outras razões o código numérico divergiu.

No teste de correntes espúrias foi verificado o salto de pressão, uma vez que pela lei de Yang Laplace tem-se o salto de pressão analítico para uma bolha cilíndrica. A verificação foi realizada nas simulações numéricas para diferentes razões de propriedades físicas, mostrando mais uma vez a robustez da utilização do filtro exponencial.

Para a metodologia IMERSPEC-VOF as correntes espúrias foram realizadas tanto para o cálculo da curvatura analítico quanto para curvatura calculada pelo método CELESTE. Para verificação da força de interface com curvatura analítica, os resultados apresentados e comparados com o trabalho de Francois et al. (2009) demonstra que a metodologia IMERSPEC-VOF se mostrou mais acurada.

O teste de correntes espúrias com a curvatura calculada pelo método CELESTE na metodologia IMERSPEC-VOF apresentou resultados consistentes, porém observou-se sensibilidade da metodologia para altas razões, assim como ocorreu para a metodologia IMERSPEC-FT.

Por fim, buscou-se validar ambas metodologias proposta no presente trabalho com a ascensão de bolhas e comparou com os dados experimentais de Clift, Grace and Weber (1978) e Bhaga (1976) e com os métodos numéricos de Villar (2007) e Hua and Lou (2007).

A validação da metodologia IMERSPEC-FT foi realizada através da simulação numérica da ascensão de bolhas para diferentes regimes. No presente trabalho foram simulados testes para baixas e altas razões de propriedades físicas. As simulações numéricas com baixas razões de propriedades físicas foram comparadas com a experimentação numérica de Villar (2007) e com o experimento de Clift, Grace and Weber (1978). Tanto qualitativamente, o qual se baseia na análise da forma da bolha, quanto quantitativamente através dos valores do número Reynolds terminal, os resultados apresentados no presente trabalho está em concordância com a literatura.

Para a bolha em regime cilíndrico, caso A1 apresentado no presente trabalho, tem-se um escoamento de Stokes devido ao baixo Re ($Re < 1,0$). Este tipo de escoamento apresenta, perante os modelos numéricos clássicos utilizados para simular escoamentos bifásicos, dificuldades de ser simulado numericamente. A metodologia proposta no presente trabalho não apresentou limitação ao simular este tipo de escoamento e apresentou bons resultados.

Já para as simulações com altas razões de propriedades físicas foram comparados com a simulação numérica de Hua and Lou (2007) e com o experimento de Bhaga and Weber (1981). Testes para a bolha em movimento em regime cilíndrico foram apresentados para averiguar o melhor filtro a ser utilizado na busca de contornar uma limitação existente na presente metodologia. Resultados dos testes apresentados demonstraram que, para altas razões de propriedades físicas, o filtro exponencial se mostrou mais adequado. Por fim, apresentou-se resultados para simulação numérica de uma bolha em ascensão no regime cilíndrico com alta razão de propriedades físicas e evidenciou-se bons resultados quando comparados com a literatura.

De forma geral, a metodologia IMERSPEC-FT está validada para a simulação numérica de ascensão de bolha com baixas razões de propriedades físicas em diferentes regimes de movimentação da bolha. Para altas razões de propriedades físicas, a bolha em regime cilíndrico apresentou bons resultados, porém investigações serão necessárias para validar a metodologia para outros regimes de bolhas.

A validação para a metodologia IMERSPEC-VOF foi apresentada para o regime cilíndrico. Resultados demonstraram concordância com o experimento de Clift, Grace and Weber (1978). Além disso, comparou-se com a metodologia IMERSPEC-FT, os quais se mostraram equivalentes.

6.2 Trabalhos futuros

Diante dos resultados apresentados dois importantes avanços são necessários para obtenção de resultados com altas razões de propriedades físicas em ambas metodologias propostas no presente trabalho: estudo de novos filtros para resolver problemas causados pelo fenômeno de Gibbs, devido as soluções descontínuas, e uma nova formulação matemática de modo a levar em conta a variação de ρ ao tratar o termo $\frac{1}{\rho} \cdot \nabla p$ nas equações de Navier-

Stokes. Propõe-se o tratamento do escoamento como compressível utilizando a metodologia IMERSPEC.

A metodologia IMERSPEC-VOF foi validada para bolhas em regime cilíndrico. Logo, como trabalho futuro, é necessário a validação para outros regimes de movimentação de bolhas. Por fim, iniciar a extensão para a terceira dimensão, com o intuito de aplicar a metodologia IMERSPEC-VOF em problemas industriais.

Referências Bibliográficas

- ALLAMPALLI, V.; HIXON, R.; NALLASAMY, M.; SAWYER, S. D. High-accuracy large-step explicit Runge-Kutta (HALE-RK) schemes for computational aeroacoustics. *J. Comput. Phys.*, v. 228, n. 10, p. 3837–3850, 2009.
- ANSARI, M. R.; GHIASI, N. Hydrodynamical instability initiation in two-phase stratified flow using spectral method. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, v. 16, n. 2, p. 741–751, 2011.
- AULISA, E.; MANSERVISI, S.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional cartesian geometry. *Journal of Computational Physics*, v. 225, p. 2301–2319, 2007.
- BHAGA, D. *Bubbles in viscous liquids: shapes, wakes and velocities*. (Ph.D. Thesis) — Department of Chemical Engineering, McGill University, Montreal, 1976.
- BHAGA, D.; WEBER, M. E. Bubbles in viscous liquids: shapes, wakes and velocities. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 105, p. 61–85, 1981.
- BOLDRINI, J. *Álgebra Linear*. São Paulo: Harbra, 1980.
- BORIS, J. P.; BOOK, D. L. Flux-corrected transport. I. SHASTA, a fluid transport algorithm that works. *Journal of Computational Physics*, v. 11, n. 1, p. 38–69, 1973. ISSN 0021-9991.
- BOTELLA, O. On the solution of the Navier-Stokes equations using Chebyshev projection schemes with third-order accuracy in time. *Computers & Fluids*, v. 26, n. 2, p. 107–116, 1997.
- BOWER-AMAYA, L.; LEE, T. Single bubble rising dynamics for moderate reynolds number using lattice boltzmann method. *Computers and Fluids*, v. 39, p. 1191–1207, 2010. ISSN 0045-7930.
- BOYD, J. P. *Chebyshev and Fourier spectral methods*. 2. ed. New York: Dover Publications, Inc., 2000. 594 p. ISBN 978-0486411835.
- BRACKBILL, J. U.; KOTHE, D. B.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, v. 100, n. 2, p. 335–354, 1992. ISSN 0021-9991.
- BRERETON, G.; KOROTNEY, D. Coaxial and oblique coalescence of two rising bubbles. In: SAHIN, I.; TRYGGVASON, G. (Ed.). *Dynamics of bubbles and vortices near a free surface*. New York, NY, USA: ASME, 1991, (AMD, v. 119).

- BRIGGS, W. L.; HENSON, V. E. *The DFT: an owner's manual for the discrete Fourier transform*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1995. 450 p. ISBN 0-89871-342-0.
- BUNNER, B.; TRYGGVASON, G. Dynamics of homogeneous bubbly flows Part 1. Rise velocity and microstructure of the bubbles. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 466, p. 17–52, 2002.
- BUNNER, B.; TRYGGVASON, G. Effect of bubble deformation on the properties of bubbly flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 495, p. 77–118, 2003.
- CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG Jr., T. A. *Spectral methods in fluid dynamics*. 1. ed. Berlin: Springer, 1987. 568 p. (Scientific Computation). ISBN 978-3-540-52205-8.
- CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG JR., T. A. *Spectral methods: fundamentals in single domains*. New York: Springer, 2006. 563 p. (Scientific Computation). ISBN 978-3-540-30725-9.
- CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG JR., T. A. *Spectral methods: evolution to complex geometries and applications to fluid dynamics*. New York: Springer, 2007. 596 p. (Scientific Computation). ISBN 978-3-540-30727-3.
- CENICEROS, H. D.; ROMA, A. M.; SILVEIRA NETO, A.; VILLAR, M. M. A robust, fully adaptive hybrid level-set/front-tracking method for two-phase flows with an accurate surface tension computation. *Communications in Computational Physics*, v. 8, n. 1, p. 51–94, 2010. ISSN 18152406.
- CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. *Numerical Methods for Engineers*. New York: McGraw-Hill, 1985. 570 p. ISBN 978-0070106642.
- CHEN, S.; JOHNSON, D. B.; RAAD, P. E.; FADDA, D. The surface marker and micro cell method. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 25, n. 7, p. 749–778, 1997. ISSN 1097-0363.
- CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. *Bubbles, drops, and particles*. New York: Academic Press, 1978. 380 p. ISBN 978-0121769505.
- COOLEY, J. W.; TUKEY, J. W. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Mathematics of Computation*, American Mathematical Society, v. 19, n. 90, p. 297–301, 1965.
- CUMMINS, S. J.; FRANCOIS, M. M.; KOTHE, D. B. Estimating curvature from volume fractions. *Computers and Structures*, v. 83, p. 425–434, 2004.
- DATTA, R. L.; NAPIER, D. H.; NEWITT, D. M. The properties and behaviour of gas bubbles formed at circular orifices. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 28, p. 14–26, 1950.
- DAVIDSON, J. F.; SCHÜLER, B. O. G. Bubble formation at an orifice in a viscous liquid. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 38, p. 144–154, 1960.

- DENNER, F.; HEUL, D. R. Van der; OUD, T. G.; VILLAR, M.; SILVEIRA-NETO, A.; WACHEN, B. G. M. van. Comparative study of mass-conserving interface capturing frameworks for two-phase flows with surface tension. *International Journal of Multiphase Flow*, Elsevier, v. 61, p. 37–47, 2014.
- DENNER F.; WACHEM, B. G. M. v. Fully-coupled balanced-force vof framework for arbitrary meshes with least-squares curvature evaluation from volume fractions. *Numerical Heat Transfer*, v. 65, n. 3, p. 218–255, 2014. ISSN 1040-7790.
- DEVILLE, M.; MUND, E. Chebyshev pseudospectral solution of second-order elliptic equations with finite element preconditioning. *Journal of Computational Physics*, v. 60, n. 3, p. 517–533, 1985.
- ELLINGSEN, K.; RISSO, F. On the rise of an ellipsoidal bubble in water: oscillatory paths and liquid-induced velocity. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 440, p. 235–268, 8 2001. ISSN 1469-7645.
- ESMAEELI, A.; TRYGGVASON, G. An inverse energy cascade in two-dimensional low Reynolds number bubbly flows. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 314, p. 315–330, 1996.
- ESMAEELI, A.; TRYGGVASON, G. Direct numerical simulations of bubbly flows. Part 1. Low Reynolds number arrays. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 377, p. 313–345, 1998.
- ESMAEELI, A.; TRYGGVASON, G. Direct numerical simulations of bubbly flows. Part 2. Moderate Reynolds number arrays. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 385, p. 325–358, 1999.
- ESMAEELI, A.; TRYGGVASON, G. A direct numerical simulation study of the buoyant rise of bubbles at $O(100)$ Reynolds number. *Physics of Fluids*, AIP, v. 17, n. 9, p. 093303, 2005.
- FENG, W. M.; YU, P.; HU, S. Y.; LIU, Z. K.; DU, Q.; CHEN, L. Q. Spectral implementation of an adaptive moving mesh method for phase-field equations. *Journal of Computational Physics*, v. 220, n. 1, p. 498–510, 2006. ISSN 0021-9991.
- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. *Computational methods for fluid dynamics*. 2. ed. Berlin: Springer, 1996. 356 p. ISBN 3-540-59434-5.
- DE FIGUEIREDO, D. G. *Análise de Fourier e equações diferenciais parciais*. Rio de Janeiro, RJ: Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 2000. 274 p. (Projeto Euclides). ISBN 978-8524401206.
- FRANCOIS, M. M.; CUMMINS, S. J.; DENDY, E. D.; KOTHE, D. B.; SICILIAN, J. M.; WILLIAMS, M. W. A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. *Journal of Computational Physics*, v. 213, n. 16, p. 141–173, 2009.
- GOPALA, V. R.; WACHEM, B. G. M. Volume of fluid methods for immiscible-fluid and free-surface flows. *Chemical Engineering Journal*, v. 141, p. 204–221, 2008.
- GOTTLIEB, D.; ORSZAG, S. A. *Numerical analysis of spectral methods*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1977. 166 p. (CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, v. 26).

- GUEYFFIER, D.; LI, J.; NADIM, A.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *Journal of Computational Physics*, v. 152, n. 2, p. 423–456, 1999. ISSN 0021-9991.
- HAN, J.; TRYGGVASON, G. Secondary breakup of axisymmetric liquid drops. I. Acceleration by a constant body force. *Physics of Fluids*, v. 11, n. 12, p. 3650–3667, 1999.
- HARPER, J. F. The motion of bubbles and drops through liquids. *Advances in Applied Mechanics*, v. 12, p. 59–129, 1972.
- HENDERSON, R. D.; KARNIADAKIS, G. E. Unstructured spectral element methods for simulation of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, v. 122, n. 2, p. 191–217, 1995. ISSN 0021-9991.
- HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, v. 39, n. 1, p. 201–225, 1981. ISSN 0021-9991.
- HUA, J.; LOU, J. Numerical simulation of bubble rising in viscous liquid. *Journal of Computational Physics*, v. 222, n. 2, p. 769–795, 2007. ISSN 0021-9991.
- HYMAN, J. M. Numerical methods for tracking interfaces. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 12, n. 1–3, p. 396–407, 1984. ISSN 0167-2789.
- JACQMIN, D. Calculation of two-phase Navier–Stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics*, v. 155, n. 1, p. 96 – 127, 1999. ISSN 0021-9991.
- JASAK, H.; WELLER, H. G. *Interface tracking capabilities of the InterGamma differencing scheme*. Imperial College of London, 2002.
- KHURANA, A. K.; KUMAR, R. Studies in bubble formation – III. *Chemical Engineering Science*, v. 24, n. 11, p. 1711–1723, 1969. ISSN 0009-2509.
- KINOSHITA, D. *Desenvolvimento e implementação da metodologia combinada Fronteira-imersa térmica e pesuedespectral de Fourier*. 136 p. (Tese de doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2015.
- KOPRIVA, D. A. A spectral multidomain method for the solution of hyperbolic systems. *Appl. Numer. Math.*, Elsevier Science Publishers B. V., v. 2, n. 3–5, p. 221–241, 1986. ISSN 0168-9274.
- LAFaurie, B.; NARDONE, C.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *Journal of Computational Physics*, v. 113, n. 1, p. 134–147, 1994. ISSN 0021-9991.
- LAI, M.-C.; PESKIN, C. S. An immersed boundary method with formal second-order accuracy and reduced numerical viscosity. *Journal of Computational Physics*, v. 160, n. 2, p. 705–719, 2000. ISSN 0021-9991.
- DE LIMA E SILVA, A. L. F. *Desenvolvimento e implementação de uma nova metodologia para modelagem de escoamentos sobre geometrias complexas: método da fronteira imersa com modelo físico virtual*. 142 p. (Ph.D. Thesis) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2002.

- DE LIMA E SILVA, A. L. F.; SILVEIRA NETO, A.; DAMASCENO, J. J. R. Numerical simulation of two-dimensional flows over a circular cylinder using the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, v. 189, n. 2, p. 351–370, 2003. ISSN 0021-9991.
- LISITA, R. *Mathematical modelling of annular two-phase flows*. 235 p. (Ph.D. Thesis) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015.
- LIU, C.; SHEN, J. A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a Fourier-spectral method. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 179, n. 3–4, p. 211–228, 2003. ISSN 0167-2789.
- LIU, Z.; ZHENG, Y.; ZHANG, Q. Study of bubble flow structure using piv. *Chemical Engineering Journal*, v. 60, p. 3537–3552, 2005.
- MAGNAUDET, J.; EAMES, I. The motion of high-Reynolds-number bubbles in inhomogeneous flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 32, n. 1, p. 659–708, 2000.
- MARCHANDISE, E.; GEUZAIN, P.; CHEVAUGEON, N.; REMACLE, J.-F. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for the computation of bubble dynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 225, n. 1, p. 949–974, 2007. ISSN 0021-9991.
- MARIANO, F. P. *Simulação de escoamentos não-periódicos utilizando as metodologias pseudo-espectral de Fourier e da fronteira imersa acopladas*. 136 p. (Dissertação (Mestrado)) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2007.
- MARIANO, F. P. *Solução numérica de Navier-Stokes usando uma hibridação das metodologias fronteira imersa e pseudo-espectral de Fourier*. 151 p. (Ph.D. Thesis) — Universidade Federal de Uberlândia, 2011.
- MARIANO, F. P.; MOREIRA, L. de Q.; SILVEIRA NETO, A.; DA SILVA, C. F. N. B.; PEREIRA, J. C. F. A new incompressible Navier-Stokes solver combining Fourier pseudo-spectral and immersed boundary method. *CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences*, v. 59, n. 2, p. 181–216, 2010.
- MIRANDA, F. C. *Modelagem matemática e simulação computacional de escoamentos bifásicos com a presença de surfactante insolúvel*. 144 p. (Dissertação (Mestrado)) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2010.
- MORCHOISNE, Y. *Inhomogeneous flow calculations by spectral methods – Mono-domain and multi-domain techniques*. Chatillon-sous-Bagneux, Hauts-de-Seine, FR, 1982.
- MOREIRA, L. de Q. *Simulação de grandes escalas de escoamentos cisalhantes livres em transição e turbulentos*. (Relatório de Qualificação) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2010.
- MOREIRA, L. de Q. *Modelagem matemática de jatos em desenvolvimento espacial usando a metodologia pseudoespectral de Fourier*. 202 p. (Ph.D. Thesis) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2011.
- MURADOGLU, M.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for computation of interfacial flows with soluble surfactants. *Journal of Computational Physics*, v. 227, n. 4, p. 2238–2262, 2008. ISSN 0021-9991.

- NAGARAJAN, S.; LELE, S. K.; FERZIGER, J. H. A robust high-order compact method for large eddy simulation. *Journal of Computational Physics*, v. 191, n. 2, p. 392–419, 2003. ISSN 0021-9991.
- NAVARRA, A.; STERN, W. F.; MIYAKODA, K. Reduction of the Gibbs oscillation in spectral model simulations. *Journal of Climate*, American Meteorological Society, v. 7, n. 8, p. 1169–1183, 1994.
- NOH, W.; WOODWARD, P. Slic (simple line interface calculation) method. *Lecture Notes in Physics*, p. 330–340, 1976. ISSN 0075-8450.
- NÓS, R. L. *Simulações de escoamentos tridimensionais bifásicos empregando métodos adaptativos e modelos de campo de fase*. (Ph.D. Thesis) — Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, 2007.
- ORSZAG, S. A. Spectral methods for problems in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, v. 37, n. 1, p. 70–92, 1980. ISSN 0021-9991.
- PATERA, A. T. A spectral element method for fluid dynamics: Laminar flow in a channel expansion. *Journal of Computational Physics*, v. 54, n. 3, p. 468–488, 1984. ISSN 0021-9991.
- PEEBLES, F.; GARBER, H. Studies on the motion of gas bubbles in liquid. *Chem. Eng. Prog.*, n. 49, p. 88–97, 1953.
- PESKIN, C. S. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *Journal of Computational Physics*, v. 10, n. 2, p. 252–271, 1972. ISSN 0021-9991.
- PESKIN, C. S. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, v. 25, n. 3, p. 220–252, 1977. ISSN 0021-9991.
- PESKIN, C. S. The immersed boundary method. *Acta Numerica*, v. 11, p. 479–517, 2002.
- PILLIOD JR., J. E.; PUCKETT, E. G. Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, v. 199, n. 2, p. 465–502, 2004.
- PIVELLO, M. R. *A fully adaptive front-tracking method for the simulation of 3D two-phase flows*. 131 p. (Ph.D. Thesis) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2012.
- PIVELLO, M. R.; VILLAR, M. M.; SERFATY, R.; ROMA, A. M.; SILVEIRA NETO, A. A fully adaptive front tracking method for the simulation of two phase flows. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 58, p. 72–82, 2014.
- POPE, S. B. *Turbulent flows*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000. 802 p. ISBN 978-0521598866.
- POPINET, S. An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 228, n. 16, p. 5838–5866, 2009.
- POPINET, S.; ZALESKI, S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd., v. 30, n. 6, p. 775–793, 1999. ISSN 1097-0363.

RAMAKRISHNAN, S.; KUMAR, R.; KULLOOR, N. R. Studies in bubble formation – I bubble formation under constant flow conditions. *Chemical Engineering Science*, v. 24, n. 4, p. 731–747, 1969. ISSN 0009-2509.

RENARDY, Y.; RENARDY, M. Prost: A parabolic reconstruction of surface tension for the volume of fluid. *Journal of Computational Physics*, v. 183, p. 400–421, 2002.

RIDER, W. J.; KOTHE, D. B. Reconstructing volume tracking. *Journal of Computational Physics*, v. 141, n. 2, p. 112–152, 1998.

RUDMAN, M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, John Wiley & Sons, Ltd, v. 24, n. 7, p. 671–691, 1997. ISSN 1097-0363.

SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 31, n. 1, p. 567–603, 1999.

SHEN, J.; WANG, L. L. Some recent advances on spectral methods for unbounded domains. *Communications in Computational Physics*, v. 5, p. 195–241, 2009.

DA SILVA, C. F. N. B. *The role of coherent structures in the control and interscale interactions of round, plane and coaxial jets*. 207 p. (Ph.D. Thesis) — Institut National Polytechnique de Grenoble, Grenoble, 2001.

DA SILVA, H. G.; VILLAR, M. M. Verificação e validação de códigos computacionais. In: MANSUR, S. S.; VIEIRA, E. del R.; SILVEIRA NETO, A. (Ed.). *Proceedings...* Rio de Janeiro, RJ: ABCM – Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas, 2010. (Coleção Cadernos de Turbulência), p. 51–94. ISBN 978-85-85769-45-1.

SILVEIRA NETO, A. *Turbulência nos fluidos aplicada*. Uberlândia, MG: [s.n.], 2002. Apostila da disciplina de mecânica dos fluidos do curso de pós-graduação da Universidade Federal de Uberlândia.

SILVEIRA NETO, A.; ROMA, A. M.; MOREIRA, L. de Q.; PIVELLO, M. R.; VILLAR, M. M.; DE LIMA, R. S.; LISITA, R.; FERREIRA, V. M. V. *Desenvolvimento de Modelagem Matemática e Simulação Numérica para a Análise de Escoamentos Bifásicos Anulares*. Uberlândia, MG, 2010. Convênio n. 0050.0022712.06.4, relatório parcial 4.

SINT ANNALAND, M. van; DEEN, N. G.; KUIPERS, J. A. M. Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method. *Chemical Engineering Science*, v. 60, n. 11, p. 2999–3011, 2005. ISSN 0009-2509.

DE SOUZA, A. M. *Análise numérica da transição à turbulência em escoamentos de jatos circulares livres*. 180 p. (Ph.D. Thesis) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, 2005.

STENE, J. F. *Numerical simulation of interfacial and multiphase flows using the front tracking method*. 138 p. (Ph.D. Thesis) — Department of Mathematics, National University of Singapore, Singapore, SG, 2010.

SUSSMAN, M. A second order coupled level set and volume of fluid method for computing growth and collapse of vapor bubbles. *Journal of Computational Physics*, v. 187, p. 110–136, 2003.

- SUSSMAN, M.; ALMGREN, A. S.; BELL, J. B.; COLELLA, P.; HOWELL, L. H.; WELCOME, M. L. An adaptive level set approach for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, v. 148, n. 1, p. 81–124, 1999. ISSN 0021-9991.
- TAEIBI-RAHNI, M.; LOTH, E.; TRYGGVASON, G. Flow modulation of a planar free shear layer with large bubbles—direct numerical simulations. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 20, n. 6, p. 1109–1128, 1994. ISSN 0301-9322.
- TAKAHASHI, D. A hybrid MPI/OpenMP implementation of a parallel 3-D FFT on SMP clusters. In: WYRZYKOWSKI, R.; DONGARRA, J.; MEYER, N.; WASNIEWSKI, J. (Ed.). *Parallel Processing and Applied Mathematics*. [S.l.]: Springer Berlin / Heidelberg, 2006, (Lecture Notes in Computer Science, v. 3911). p. 970–977. ISBN 978-3-540-34141-3.
- TREFETHEN, L. N. *Spectral methods in MATLAB*. Philadelphia, PA, USA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001. 184 p. (Software, Environments and Tools). ISBN 978-0-89871-465-4.
- TRYGGVASON, G.; BUNNER, B.; ESMAEELI, A.; JURIC, D.; AL-RAWAHI, N.; TAUBER, W.; HAN, J.; NAS, S.; JAN, Y.-J. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, v. 169, n. 2, p. 708–759, 2001. ISSN 0021-9991.
- TRYGGVASON, G.; ESMAEELI, A.; LU, J.; BISWAS, S. Direct numerical simulations of gas/liquid multiphase flows. *Fluid Dynamics Research*, v. 38, n. 9, p. 660–681, 2006.
- UBBINK, O. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*. (Tese de doutorado) — Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, UK, 1997.
- UHLMANN, M. An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *Journal of Computational Physics*, v. 209, p. 448–476, 2005.
- UNVERDI, S. O.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, v. 100, n. 1, p. 25–37, 1992. ISSN 0021-9991.
- UZUN, A. *3-D large eddy simulation for jet aeroacoustics*. (Ph.D. Thesis) — Purdue University, West Lafayette, IN, USA, 2003.
- VILLAR, M. M. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. 277 p. (Ph.D. Thesis) — Universidade Federal de Uberlândia, 2007.
- VILLELA, M. F. dos S. *Modelagem matemática de escoamentos bifásicos usando o método espectral de Fourier*. 101 p. (Dissertação (Mestrado)) — Universidade Federal de Uberlândia, 2011.
- WACHEN, B. G. M. van; SHOUTEN, J. C. Experimental validation of 3-d lagrangian vof model: Bubble shape and rise velocity. *AIChE*, v. 48, p. 2744–2753, 2002.
- WANG, Z.; FAN, J.; LUO, K.; CEN, K. Immersed boundary method for the simulation of flows with heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 52, n. 19–20, p. 4510–4518, 2009. ISSN 0017-9310.
- WHITE, F. M. *Viscous fluid flow*. 2. ed. New York, NY, USA: McGraw-Hill, 1991. 614 p. (McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering). ISBN 0-07-100995-7.

YABE, T.; XIAO, F.; UTSUMI, T. The constrained interpolation profile method for multiphase analysis. *Journal of Computational Physics*, v. 169, n. 2, p. 556–593, 2001. ISSN 0021-9991.

YEOH, G. H.; TU, J. *Computational techniques for multiphase flows*. 1. ed. Oxford, UK: Elsevier, 2010. 664 p. ISBN 978-0-08-046733-7.

YOUNGS, D. L. Time dependent multi-material flow with large fluid distortion. In: MORTON, K.; BAINES, M. (Ed.). London, UK: Academic Press, 1982. p. 273–285. ISBN 9780125083607.

ZALESAK, S. T. Fully multi-dimensional flux corrected transport algorithm for fluid flow. *Journal computational Physics*, Elsevier, v. 31, p. 335–362, 1979.

APÊNDICE A -- Informações numéricas complementares

Neste capítulo apresenta os dados de entrada para as simulações numérica da ascensão de bolhas para os testes A_1 , A_2 , A_3 , A_4 , A_5 , A_6 , A_7 , B_1 , B_2 , C_1 , C_2 e C_3 . Além disso, representação gráfica da ascensão da bolha para os teste A_5 e A_6 foram mostrados.

A.1 Condição de entrada e figuras complementares das simulações numéricas

Tabela A.1: Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste A_1 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste A_1	$Eu = 5,0 \times 10^{-1}$ $M = 5,0 \times 10^{-3}$ $D = [0, 0; 0, 2] \times [0, 0; 0, 6]$ $\sigma = 9,0 \text{ [N/m]}$ $d_b = 3,0 \times 10^{-2} \text{ [m]}$ $\lambda = 2,0$ $\gamma = 2,0$ $N = 128 \times 256$ $\mu_c = 5,1961 \text{ [Pa.s]}$ $CFL = 0,1$

Tabela A.2: Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho A_2 , A_3 e A_4 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste A_2	$Eu = 10,0$ $M = 2,0 \times 10^{-2}$ $D = [0,0;4,1] \times [0,0;8,2]$ $\sigma = 0,072 \text{ [N/m]}$ $d_b = 1,0 \text{ [m]}$ $\lambda = 2,0$ $\gamma = 2,0$ $N = 320 \times 640$ $\mu_c = 2,17 \times 10^{-2} \text{ [Pa.s]}$ $CFL = 0,01$
Teste A_3	$Eu = 20,0$ $M = 2,8 \times 10^{-2}$ $D = [0,0;0,15] \times [0,0;0,3]$ $\sigma = 0,1 \text{ [N/m]}$ $d_b = 2,0 \times 10^{-2} \text{ [m]}$ $\lambda = 2,0$ $\gamma = 2,0$ $N = 320 \times 640$ $\mu_c = 2,73 \times 10^{-1} \text{ [Pa.s]}$ $CFL = 0,01$
Teste A_4	$Eu = 1,0$ $M = 5,05 \times 10^{-7}$ $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ $\sigma = 9,0 \text{ [N/m]}$ $d_b = 3,0 \times 10^{-2} \text{ [m]}$ $\lambda = 2,0$ $\gamma = 2,0$ $N = 256 \times 768$ $\mu_c = 6,22 \times 10^{-1} \text{ [Pa.s]}$ $CFL = 0,01$

Tabela A.3: Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho A_5 , A_6 e A_7 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste A_5	$Eu = 50,0$ $M = 5,0 \times 10^{-4}$ $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ $\sigma = 9,0 [N/m]$ $d_b = 3,0 \times 10^{-2} [m]$ $\lambda = 2,0$ $\gamma = 2,0$ $N = 512 \times 1536$ $\mu_c = 9,24 [Pa.s]$ $CFL = 0,01$
Teste A_6	$Eu = 5,0$ $M = 5,0 \times 10^{-7}$ $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ $\sigma = 9,0 [N/m]$ $d_b = 3,0 \times 10^{-2} [m]$ $\lambda = 2,0$ $\gamma = 2,0$ $N = 512 \times 1536$ $\mu_c = 9,24 \times 10^{-1} [Pa.s]$ $CFL = 0,01$
Teste A_7	$Eu = 410,0$ $M = 5,0 \times 10^{-6}$ $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ $\sigma = 9,0 [N/m]$ $d_b = 3,0 \times 10^{-2} [m]$ $\lambda = 2,0$ $\gamma = 2,0$ $N = 512 \times 1536$ $\mu_c = 4,96 [Pa.s]$ $CFL = 0,01$

Tabela A.4: Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para os testes B_1 e B_2 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste B_1	$Eu = 0,88$ $M = 8,8 \times 10^{-3}$ $D = [0,0;0,25] \times [0,0;0,75]$ $\sigma = 9,0 [N/m]$ $d_b = 3,0 \times 10^{-2} [m]$ $\lambda = 10,0$ $\gamma = 1,0$ $N = 128 \times 384$ $\mu_c = 5,1961 [Pa.s]$ $CFL = 0,01$
Teste B_2	$Eu = 18,0$ $M = 3,6 \times 10^{-3}$ $D = [0,0;6,1] \times [0,0;18,2]$ $\sigma = 0,072 [N/m]$ $d_b = 1,0 [m]$ $\lambda = 10,0$ $\gamma = 10,0$ $N = 240 \times 720$ $\mu_c = 2,17 \times 10^{-2} [Pa.s]$ $CFL = 0,01$

Tabela A.5: Condição de entrada para a simulação numérica da bolha *wobbling* em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_1 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste C_1	$Eu = 5,09$ $M = 5,10 \times 10^{-10}$ $\sigma = 9,0 [N/m]$ $d_b = 3,0 \times 10^{-2} [m]$ $\lambda = 10,0$ $\gamma = 1,0$ $\mu_c = 1,66 \times 10^{-1} [Pa.s]$ $CFL = 0,01$

Tabela A.6: Condição de entrada para simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_2 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste C_2	$Eo = 7,67$ $M = 711,00$ $D = [0,0;0,2] \times [0,0;0,6]$ $\sigma = 0,00287 [N/m]$ $d_b = 1,6 \times 10^{-3} [m]$ $N = 256 \times 768$ $\mu_c = 0,204 [Pa.s]$ $CFL = 0,01$

Tabela A.7: Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_3 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste C_3	$Eo = 17,70$ $M = 711,00$ $D = [0,0;0,0092] \times [0,0;0,0276]$ $\sigma = 0,00287 [N/m]$ $d_b = 2,3 \times 10^{-3} [m]$ $\lambda = 1000,0$ $\gamma = 100,0$ $N = 256 \times 768$ $\mu_c = 0,204 [Pa.s]$ $CFL = 0,01$

Tabela A.8: Condição de entrada para a simulação numérica da bolha em ascensão realizada no presente trabalho para o teste C_4 .

Simulação numérica	Condição de entrada
Teste C_4	$Eu = 17,70$ $M = 711,00$ $D = [0,0;0,0938] \times [0,0;1,9698]$ $\sigma = 0,0188 \text{ [N/m]}$ $d_b = 1,34 \times 10^{-2} \text{ [m]}$ $\lambda = 1000,0$ $\gamma = 100,0$ $N = 512 \times 1536$ $\mu_c = 0,204 \text{ [Pa.s]}$ $CFL = 0,01$

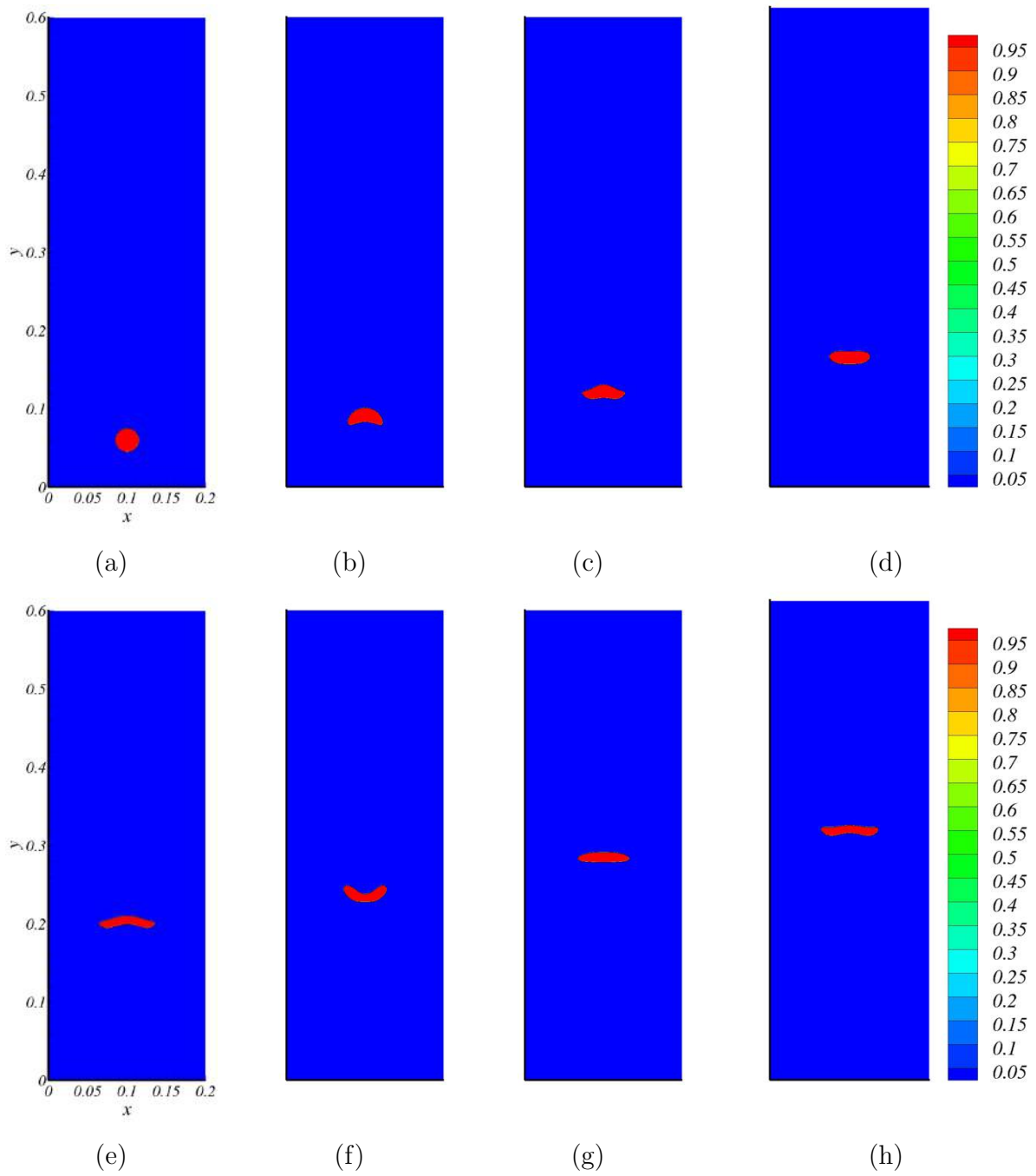


Figura A.1: Campo da função indicadora do teste A_{A6} em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 2,18$; (c) $t^* = 4,36$; (d) $t^* = 6,72$; (e) $t^* = 8,90$; (f) $t^* = 11,27$; (g) $t^* = 13,81$; (h) $t^* = 15,00$.

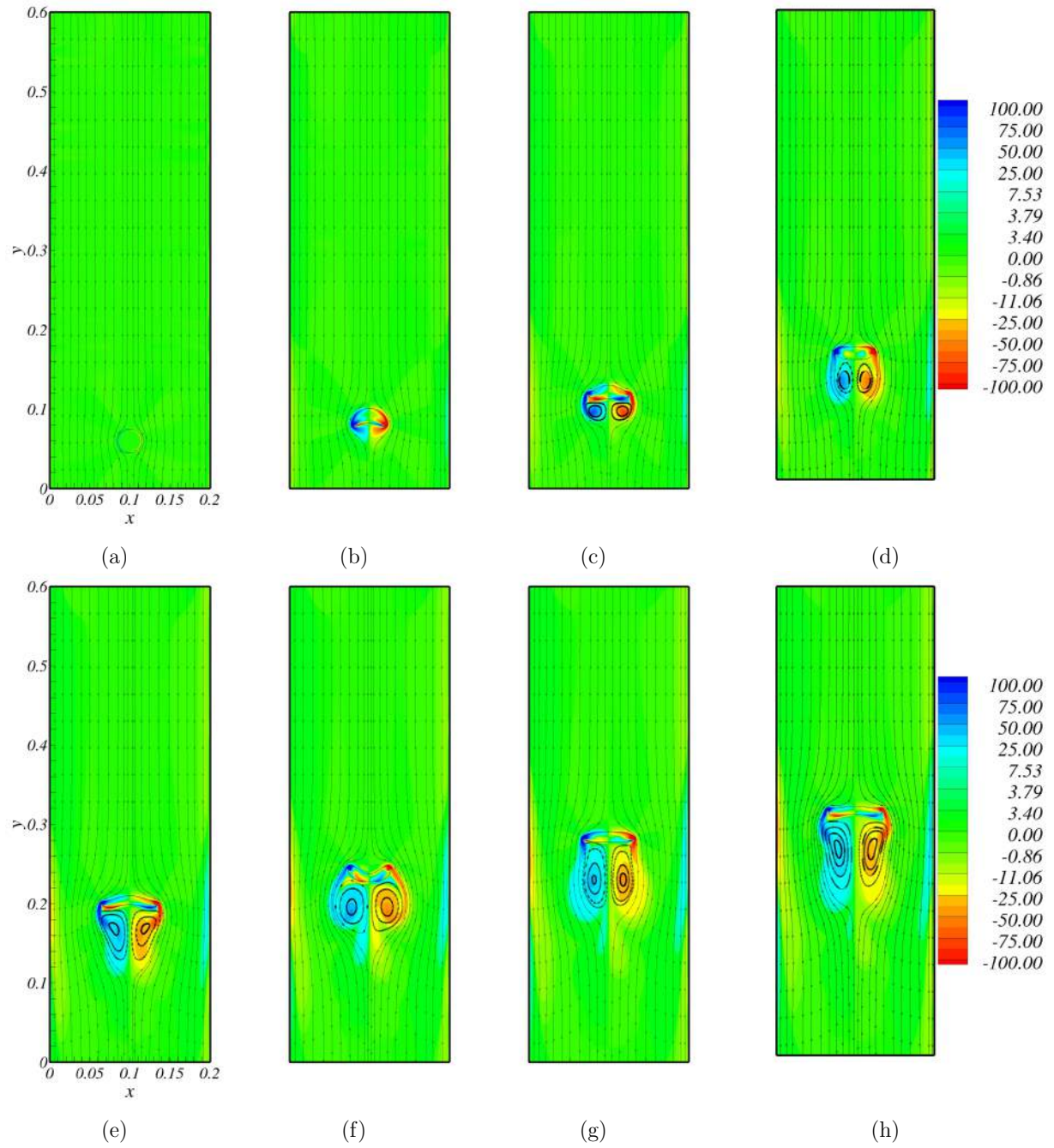


Figura A.2: Campo de vorticidade do teste A_6 em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 2,18$; (c) $t^* = 4,36$; (d) $t^* = 6,72$; (e) $t^* = 8,90$; (f) $t^* = 11,27$; (g) $t^* = 13,81$; (h) $t^* = 15,00$.

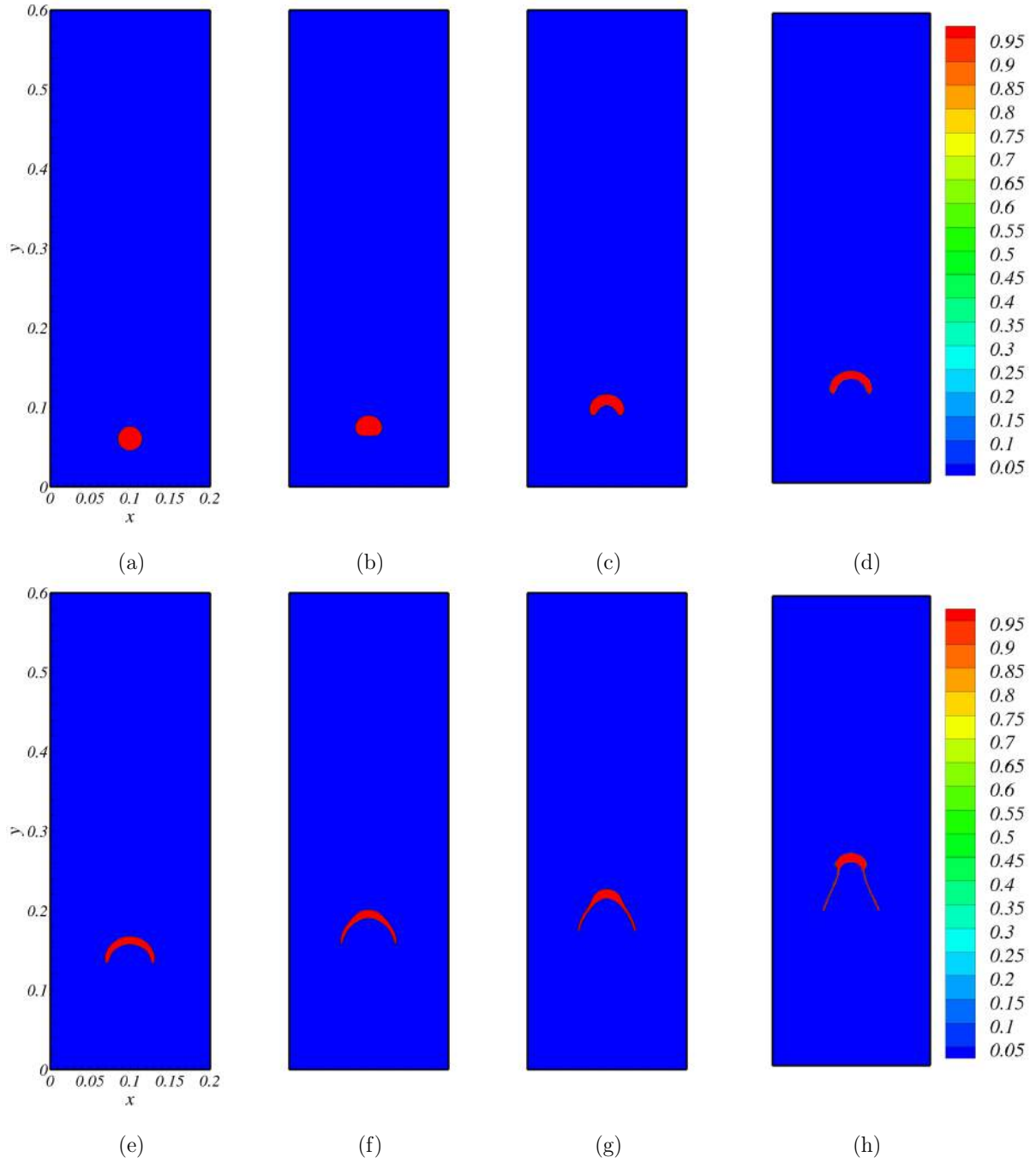


Figura A.3: Campo da função indicadora para o teste C1, em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 1,86$; (c) $t^* = 3,73$; (d) $t^* = 5,60$; (e) $t^* = 7,46$; (f) $t^* = 10,07$; (g) $t^* = 11,94$; (h) $t^* = 14,92$.

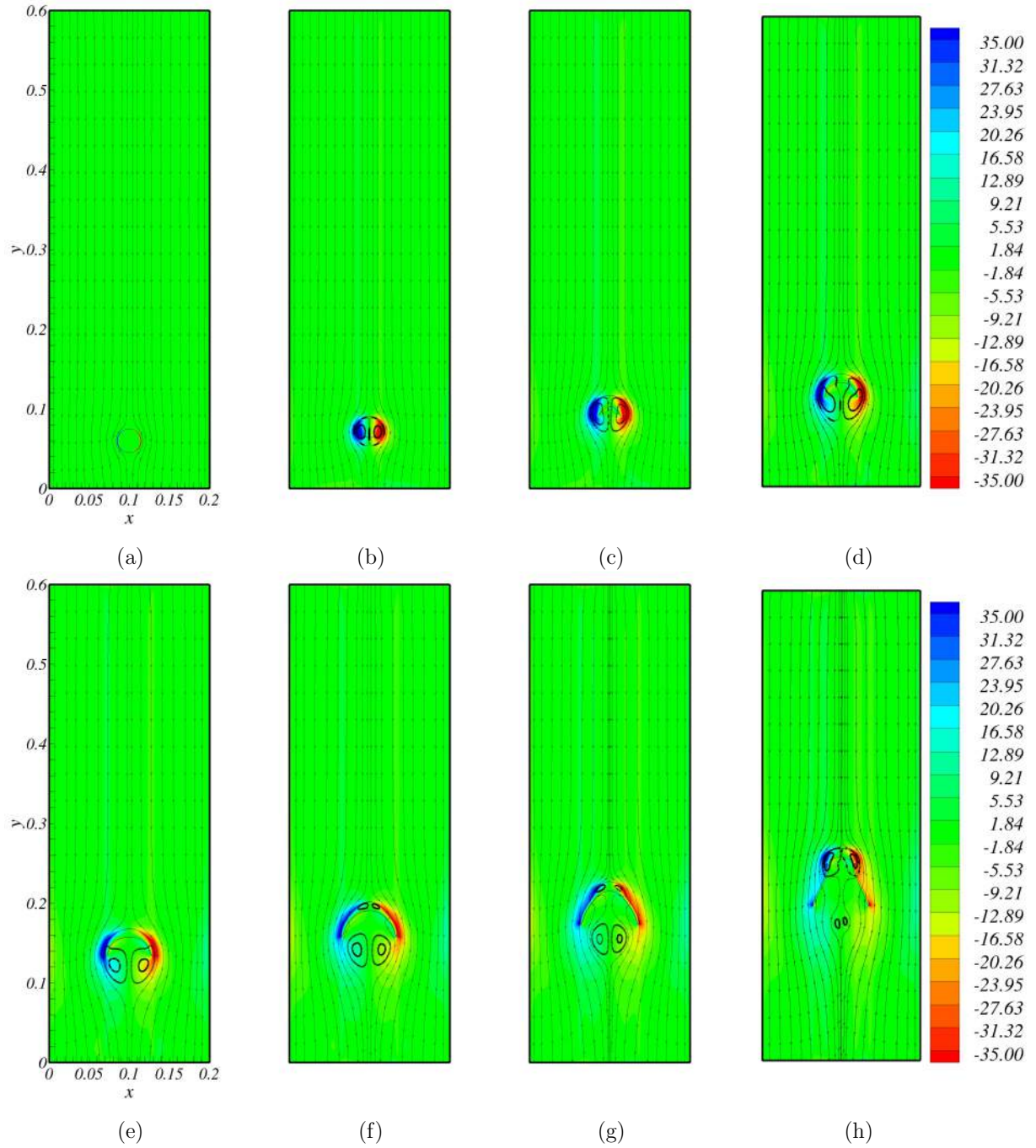


Figura A.4: Campo da função indicadora para o teste C1, em: (a) $t^* = 0$; (b) $t^* = 1,86$; (c) $t^* = 3,73$; (d) $t^* = 5,60$; (e) $t^* = 7,46$; (f) $t^* = 10,07$; (g) $t^* = 11,94$; (h) $t^* = 14,92$.