

FLÁVIA CAVALCANTI MIRANDA

**MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS
COM A PRESENÇA DE SURFACTANTE INSOLÚVEL**



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

2010

FLÁVIA CAVALCANTI MIRANDA

**MODELAGEM MATEMÁTICA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL
DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS COM A PRESENÇA DE
SURFACTANTE INSOLÚVEL**

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

Área de concentração: Mecânica dos Fluidos.

Orientador: Prof. Aristeu da Silveira Neto

Co-orientador: Prof. Alexandre Roma

Uberlândia - MG

2010

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

M672m Miranda, Flávia Cavalcanti, 1985-
Modelagem matemática e simulação computacional de escoamentos
bifásicos com a presença de surfactante insolúvel [manuscrito] / Flávia
Cavalcanti Miranda. - 2010.
144 f. : il.

Orientador: Aristeu da Silveira Neto.
Co-orientador: Alexandre Roma.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Uberlândia, Pro-
grama de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.
Inclui bibliografia.

1. Escoamento bifásico - Teses. 2. Agentes ativos de superfícies - Te-
ses. I. Silveira Neto, Aristeu da, 1965- II. Roma, Alexandre. III. Univer-
sidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Engenha-
ria Mecânica. IV. Título.

CDU: 532.529

"O único lugar onde sucesso vem antes do trabalho é no dicionário"

Albert Einstein

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a meus pais e minha irmã pelo carinho, compreensão e apoio incondicional. A presença de vocês é mais que importante, é fundamental, em todos os passos da minha vida.

Ao meu namorado David, pelo companheirismo, apoio, paciência e ajuda, nos momentos em que mais precisei.

Ao meu orientador Prof. Aristeu da Silveira Neto pela oportunidade, por acreditar em mim, pelo incentivo, paciência, ensinamentos e conselhos dados a mim ao longo dessa jornada.

Ao meu co-orientador Prof. Alexandre Megiorin Roma, pela ajuda, compreensão e ensinamento conferidos a mim durante as inúmeras reuniões que tivemos, sempre proveitosas e motivadoras.

Ao Prof. Clodoaldo Grotta Ragazzo pelos valiosos ensinamentos transmitidos e cooperação.

Agradeço de maneira especial à Dra. Millena Martins Villar, pela paciência, dedicação e ensinamentos, sempre disposta a me ajudar.

Minha gratidão também ao Prof. Carlos Roberto Ribeiro pela ajuda nos momentos de dificuldades.

Aos meus amigos do MFLab, que foram indispensáveis para a realização deste trabalho, ajudando para a compreensão de algum assunto e proporcionado um ambiente de trabalho agradável.

Ao IME/USP-SP e MFLab/UFU-MG pelo suporte computacional.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) por financiar este trabalho e ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (POSMEC/UFU) pelo suporte e oportunidade de realizar este curso

Miranda, F. C., **Modelagem Matemática e Simulação Computacional de Escoamentos Bifásicos com a Presença de Surfactante Insolúvel**. 2010. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

Quando se trata de escoamentos bifásicos, torna-se inevitável falar de surfactantes. Surfactantes são agentes ativos de superfície que podem estar presentes em sistemas, tanto na forma de impurezas quanto na forma de substâncias químicas adicionadas propositalmente à misturas para controlar efeitos físicos interfaciais. Os surfactantes são amplamente usados em numerosas aplicações de engenharia, como por exemplo, eles são usados na produção de emulsões, ou para manipular bolhas e gotas em microcanais, para estabilizar gotas suspensas em um meio imiscível, também usados no processo de purificação de água, etc. As funções principais do surfactante são diminuir a tensão superficial e prevenir a coalescência. A presença destes agentes ativos pode afetar criticamente a dinâmica interfacial dos escoamentos bifásicos. Surfactantes aderidos à interface resultam em uma diminuição não uniforme de tensão superficial, isso torna a força de capilaridade não linear a introduz a força de Marangoni. Utilizando o método *Front-Tracking* e malhas adaptativas refinadas localmente, o presente trabalho tem como objetivo estudar o efeito de surfactantes insolúveis em escoamentos interfaciais bidimensionais. O surfactante dito insolúvel é aquele que se mantém na interface e não há fluxo de massa de surfactante entre a interface e o fluido ambiente. Portanto, o transporte de surfactante é feito somente sobre a interface e para tal, a equação de transporte para a concentração de surfactante é resolvida na malha lagrangiana. As implementações foram feitas no código AMR2D desenvolvido por Villar (2007). Num primeiro momento, fez-se a validação do código numérico através de uma expressão desenvolvida para o cálculo do coeficiente de arrasto para bolhas bidimensionais, onde são comparados os resultados numérico e analítico. Fez-se também a verificação das implementações feitas, sobre a equação de surfactante, por intermédio da análise de convergência por referência de malha. Buscando fazer a comparação entre interface limpa e contaminada, simulou-se uma e duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante com o interesse de verificar os efeitos do

surfactante na dinâmica desses escoamentos e para o caso de duas bolhas, investigar também os efeitos do surfactante na interação entre as bolhas. Em seguida, fez-se um teste para evidenciar a presença do efeito Marangoni em escoamentos contaminados. Neste teste, a interface se movimenta devido somente à força de Marangoni. Por último, apresenta-se um estudo de problemas de linhas de contato dinâmicas. Este estudo trata-se da modelagem do ponto triplo de contato, onde se tem a interação das três fases presentes no escoamento e, neste contexto, o surfactante presente age modificando o valor do ângulo de contato. Este também é um problema de grande importância industrial. Ele aparece em processos de umedecimento, revestimento e em muitas aplicações biológicas e tem sido objeto de estudo de muitos pesquisadores desde várias décadas.

Palavras Chave: Escoamento bifásico, Front-Tracking, Surfactante, efeito Marangoni, Ponto triplo de contato.

Miranda, F. C., **Mathematical Modeling and Computational Simulation of two-phase flows with Insoluble Surfactant**. 2010. M. Sc. Dissertation, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

ABSTRACT

When it comes to two-phase flows, it is inevitable to talk about surfactants. Surfactants are surface-active agents that may be present in systems, as impurities, or deliberately added to the mixture to control interfacial physical effects. Surfactants are widely used in many engineering applications; for instance, they are used to generate emulsions, to handle drops and bubbles in microchannels, or to stabilize droplets suspended in an immiscible medium, they are also used in the process of water purification, etc. The main functions of surfactants are to reduce surface tension and prevent coalescence. The presence of these active agents can critically affect the dynamics of interfacial two-phase flows. Surfactants adhered to the interface result in a decrease, in a non-uniform way, of the surface tension; which makes the capillary force non-linear and introduces the Marangoni force. By using the front-tracking method and adaptive meshes locally refined, this work aims to study the effect of insoluble surfactant in interfacial two-dimensional flows. Since the surfactant is assumed to be insoluble, there is no net mass transport between the interface and the bulk fluid. Therefore, the transport of surfactant is only done on the interface and for that, the transport equation for the surfactant concentration is solved in the Lagrangian mesh. This equation was implemented in the AMR2D code developed by Villar (2007). In the first step, the numerical code was validated by an analytical expression developed to calculate the drag coefficient for two-dimensional bubbles, then, the analytical and numerical results were compared. The implementation of surfactant concentration equation was verified through convergence analysis. It was simulated one and two bubbles immersed in a shear flow seeking to make a comparison between clean and contaminated interfaces. For that, it was evaluated the effects of surfactant on the dynamics of these flows. Moreover, for the case of two bubbles, the effects of surfactant in the interaction between bubbles were also investigated. After that, it was demonstrated the presence of the Marangoni effect in contaminated flows through a test

in which the interface moves only because of the Marangoni force. Finally, a study of moving contact lines is presented. This study is about the modeling of the contact point, where there is the interaction of the three phases present in the flow and, in this context, the surfactant acts by modifying the value of contact angle. This is also a problem of great industrial interest. It appears in the processes of wetting, coating and many biological applications and it has been in the focus of study by many researchers for several decades.

Keywords: Two-phase flow, Front-tracking, Surfactant, Marangoni force, Moving contact point.

Lista de Figuras

1.1	Exemplo de escoamento gás-sólido. Leito fluidizado com resfriador de sólidos (RHODES, 2010).	2
1.2	Exemplo de escoamento líquido-sólido. Esquematização de um escoamento em um hidrociclone. Adaptado de Salvo (2009).	2
1.3	Exemplo de escoamento gás-líquido. Diagrama de uma caldeira (KILLEEN, 2010).	3
1.4	Exemplo de escoamento gás-líquido-sólido. Desenho esquemático de uma coluna de flotação (ULOSoy, 2010).	3
1.5	Classificação dos escoamentos gás-líquido em um tubo vertical. Adaptado de Yeoh e Tu (2010).	4
1.6	Representação esquemática de uma molécula de surfactante.	5
1.7	Molécula de dodecil sulfato de sódio em uma interface fluida (EDWARDS; BREN- NER; WASAN, 1991).	5
1.8	Polistireno (1 micrômetro) que estabiliza uma bolha de óleo em água (TARIMALA; DAI, 2004).	7
1.9	Interface em contato com uma superfície sólida.	8
1.10	Escoamento anular água e ar (ISHII; HIBIKI, 2006).	8
1.11	Impacto, espalhamento e ebulição de uma gota de n-heptano em uma superfície de aço inoxidável (SAMIMY et al., 2004).	9
3.1	Representação das malhas euleriana e lagrangiana para um corpo imerso de ge- ometria arbitrária.	20

3.2	Linhas de corrente ao redor de uma interface, onde ρ_c é a massa específica da fase contínua e ρ_d é a massa específica da fase dispersa, $\rho(\phi)$ identifica a massa específica variável na interface estendida.	23
3.3	Variação de massa. Interfaces nos instantes $t = t_o$ e $t = t_1$	23
3.4	Parâmetro s para uma interface representada por uma curva aberta.	26
3.5	Modelagem da densidade de força lagrangiana. Esquema representativo da interface Σ no domínio Ω	26
3.6	Representação de uma interface com uma concentração de surfactante não uniforme.	28
3.7	Representação de uma interface com o elemento de comprimento de arco dl	29
4.1	Localização das variáveis da célula de MAC.	42
4.2	Exemplo de uma malha composta com 3 níveis de refinamento (a) e perfis de malha para uma malha com 5 níveis de refinamento (b).	43
4.3	Exemplo de malha adaptativa. Evolução da remalhagem ao longo do tempo (VILLAR, 2007).	44
4.4	Interface Σ com banda T_γ de largura 2γ	45
4.5	Representação esquemática da malha lagrangiana.	47
5.1	Configuração geométrica para as simulações de bolhas em ascensão, visando no cálculo de coeficiente de arrasto. Dimensões $[m]$	58
5.2	Representação esquemática de uma interface Σ imersa no domínio Ω	59
5.3	Posição dos pontos para a interpolação da pressão para o cálculo do coeficiente de arrasto.	60
5.4	Coeficiente de arrasto em função número de Reynolds para as simulações de uma bolha em ascensão.	64
5.5	Distribuição de surfactante ao longo da interface para o teste de difusão.	67
5.6	Configuração geométrica para as simulações de uma bolha imersa em um escoamento cisalhante.	70
5.7	Evolução temporal do campo da componente u de velocidade para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante.	71

5.8	Evolução temporal do campo da componente v de velocidade para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante.	71
5.9	Evolução temporal do campo de pressão para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante.	72
5.10	Evolução temporal do campo de vorticidade para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante.	72
5.11	Componentes de velocidade u (a) e v (b), campo de pressão (c) e vorticidade (d) para o tempo final $t = 12$ para simulação de uma bolha contaminada e $\beta = 0,25$ submetida à um escoamento cisalhante.	73
5.12	Componentes de velocidade u (a) e v (b), campo de pressão (c) e vorticidade (d) para o tempo final $t = 12$ para simulação de uma bolha contaminada e $\beta = 0,5$ submetida à um escoamento cisalhante.	73
5.13	Evolução temporal da interface para uma bolha submetida à um escoamento cisalhante com e sem surfactante. Resultados do presente trabalho: interface limpa $\beta = 0$ (· · · · ·), interface contaminada com $\beta = 0,25$ (—) e com $\beta = 0,50$ (—).	75
5.14	Evolução temporal da interface para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) (· · · · ·).	75
5.15	Evolução temporal da interface para uma bolha submetida à um escoamento cisalhante com surfactante ($\beta = 0,25$). Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) (· · · · ·).	76
5.16	Distribuição de concentração de surfactante para uma bolha submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho. A linha tracejada corresponde à interface contaminada com $\beta = 0,25$, e a linha contínua corresponde à interface contaminada e $\beta = 0,5$	77
5.17	Origem adotada para o comprimento de arco (s) nos teste onde se tem uma bolha submetida à um escoamento cisalhante.	77

5.18	Distribuição de concentração de surfactante para uma bolha contaminada ($\beta = 0,25$) submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) (—).	77
5.19	Distribuição tensão superficial para uma bolha submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho. Linha pontilhada corresponde a interface limpa, a linha tracejada corresponde à interface contaminada com $\beta = 0,25$, e a linha contínua corresponde à interface contaminada e $\beta = 0,5$.	78
5.20	Distribuição tensão superficial para uma bolha contaminada ($\beta = 0,25$) submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) (—).	78
5.21	Configuração geométrica para o teste de efeito Marangoni.	79
5.22	Teste de efeito Marangoni. Distribuição de (a) concentração de surfactante e (b) tensão superficial ao longo da interface para os tempos $t = 0, 1, 2, 3, 4$ e 5 .	81
5.23	Teste de efeito Marangoni, (a) localização da bolha para os tempos $t = 0$ e $t = 5$, (b) Interface e linhas de corrente para o tempo final $t = 5$.	81
5.24	Teste de efeito Marangoni. Campo para a componente (a) u e (b) v de velocidade para $t = 5$.	82
5.25	Configuração geométrica para as simulações de duas bolhas submetidas a um escoamento cisalhante.	82
5.26	Evolução das interfaces em um fluido cisalhante. Linha pontilhada corresponde a bolha livre de surfactante e linha contínua corresponde a bolha contaminada.	84
5.27	Campo da componente horizontal u de velocidade para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.	85
5.28	Campo da componente vertical v de velocidade para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.	85
5.29	Campo de pressão para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.	86
5.30	Campo de vorticidade para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.	86

5.31	Componentes de velocidade u (a) e v (b), campo de pressão (c) e vorticidade (d) para o tempo final $t = 12$ para a simulação de duas bolhas contaminadas submetida à um escoamento cisalhante.	87
5.32	Distribuição de concentração de surfactante para simulação de duas bolhas contaminadas imersas em um escoamento cisalhante. Bolha localizada inicialmente no ponto $(-1,7; 0,25)$ - coluna da direita - e bolha inicialmente localizada no ponto $(1,7; -0,25)$ - coluna da esquerda	89
5.33	Distribuição de tensão superficial para simulação de duas bolhas contaminadas imersas em um escoamento cisalhante. Bolha localizada inicialmente no ponto $(-1,7; 0,25)$ - coluna da direita - e para bolha inicialmente localizada no ponto $(1,7; -0,25)$ - coluna da esquerda para os tempos	90
5.34	Diagrama esquemático de uma gota líquida em contato com uma superfície sólida.	91
5.35	Possíveis ângulos de contato entre uma gota em contato com uma superfície sólida.	91
5.36	Interpretação do comprimento de escorregamento η . Adaptado de Ganesan e Tobiska, (2009).	92
5.37	Configuração geométrica para as simulações de uma meia gota apoiada em uma superfície sólida.	93
5.38	Evolução da interface para as simulações de uma meia gota limpa ($\beta = 0$, linha pontilhada) e contaminada ($\beta = 0.3$, linha contínua) apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho.	96
5.39	Evolução da interface para as simulações de uma meia gota limpa ($\beta = 0$) apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho(——) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (——).	96
5.40	Evolução da interface para as simulações de uma meia gota contaminada ($\beta = 0.3$) apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho(——) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (——).	97
5.41	Variação do ângulo de contato para as simulações de uma meia gota limpa e contaminada apoiada em uma superfície sólida.	97

5.42	Distribuição de concentração de surfactante ao longo da interface para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (—).	98
5.43	Distribuição de tensão superficial ao longo da interface para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (—).	99
5.44	Evolução temporal do campo da componente de velocidade u para a simulação de uma gota limpa apoiada em uma superfície sólida.	100
5.45	Evolução temporal do campo da componente de velocidade u para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida.	100
5.46	Evolução temporal do campo da componente de velocidade v para a simulação de uma gota limpa apoiada em uma superfície sólida.	101
5.47	Evolução temporal do campo da componente de velocidade v para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida.	101
5.48	Evolução temporal do campo de vorticidade para a simulação de uma gota limpa apoiada em uma superfície sólida.	102
5.49	Evolução temporal do campo de vorticidade para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida.	102
8.1	Representação esquemática de uma interface Σ imersa no domínio Ω .	114

Lista de Tabelas

5.1	Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 105$	62
5.2	Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 139$	62
5.3	Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 162$	63
5.4	Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 175$	63
5.5	Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 191$	63
5.6	Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 201$	63
5.7	Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 216$	64
5.8	Diferença entre os raios máximos e mínimos finais em relação ao raio inicial de uma bolha em ascensão para os testes de avaliação do coeficiente de arrasto. . .	65
5.9	Norma dos erros para o teste de difusão para o tempo final de simulação usando o esquema de discretização temporal SBDF.	68
5.10	Norma dos erros para o teste de difusão para o tempo final de simulação usando o esquema de discretização temporal Crank-Nicolson.	68
5.11	Norma dos erros para o teste de convergência para equação de concentração de surfactante completa e usando o esquema de discretização temporal SBDF. . . .	69

- 5.12 Norma dos erros para o teste de convergência para equação de concentração de surfactante completa e usando o esquema de discretização temporal Crank Nicolson. 69

Lista de Símbolos

Letras Latinas

$\mathbf{Vb}$	-	vetor velocidade do centróide da bolha
$\mathbf{f}$	-	vetor força euleriano
$\mathbf{F}$	-	vetor força interfacial lagrangiano
$\mathbf{g}$	-	vetor aceleração gravitacional
$\mathbf{n}$	-	vetor normal unitário
$\mathbf{t}$	-	vetor tangente unitário
$\mathbf{u}$	-	vetor velocidade euleriano
$\mathbf{U}$	-	vetor velocidade lagrangiano
$\mathbf{x}$	-	vetor posição euleriano
$\mathbf{X}$	-	vetor posição lagrangiano
A	-	área da bolha
C_D	-	Coefficiente de arrasto
D	-	Diâmetro da bolha
D_s	-	Difusividade superficial
f_D	-	força de arrasto
f_L	-	força de sustentação
L_b	-	comprimento total da interface
m	-	massa de surfactante
n_l	-	número de pontos lagrangianos
p	-	pressão
q	-	correção de pressão
R	-	constante ideal dos gases
s	-	parâmetro de parametrização da interface que corresponde ao comprimento de arco
S_x	-	fator de alongamento
t	-	tempo
T	-	temperatura absoluta
H	-	função Heaviside
u_a	-	velocidade auxiliar

- Re - número de Reynolds
 Ca - número de capilaridade
 Pe - número de Peclet

Letras Gregas

- α_i - constantes do método Gear
 β - número de elasticidade
 β_i - constantes do método Gear
 ρ - densidade
 ρ_c - densidade da fase contínua
 ρ_d - densidade da fase dispersa
 μ - viscosidade
 μ_c - viscosidade da fase contínua
 μ_d - viscosidade da fase dispersa
 δ - delta de kronecher
 Ω - domínio euleriano
 Σ - domínio lagrangiano
 Δx - espaçamento da malha computacional na direção x
 Δy - espaçamento da malha computacional na direção y
 Δs - espaçamento da malha lagrangiana
 Δt - passo de tempo
 ϕ - função indicadora
 σ - tensão superficial fluido-fluido
 σ_c - tensão superficial para bolha limpa
 σ_{s1} - tensão superficial entre o sólido e o fluido 1
 σ_{s1} - tensão superficial entre o sólido e o fluido 2
 κ - curvatura da interface
 Γ - concentração de surfactante
 Γ_∞ - concentração de surfactante máxima
 η - comprimento de deslizamento
 θ_e - ângulo de contato de equilíbrio

Índices

- k - ponto lagrangiano
 o - parâmetros para adimensionalização

Superíndices

- $*$ - grandeza adimensional
- n - iteração

Operadores Matemáticos

- ∂ - derivada parcial
- ∇ - gradiente
- ∇^2 - laplaciano

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	x
LISTA DE TABELAS	xv
1 INTRODUÇÃO	1
1.0.1 Objetivos	8
1.0.2 Organização do trabalho	11
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	12
2.1 Escoamentos Bifásicos	12
2.2 Escoamentos na Presença de Surfactantes	15
3 MODELAGEM MATEMÁTICA	19
3.1 Modelagem matemática da dinâmica do fluido	20
3.2 Modelagem matemática da dinâmica da interface	24
3.3 Modelagem matemática da dinâmica de surfactantes	27
3.3.1 Equação de concentração de surfactante para pontos equidistribuídos . .	33
3.4 Adimensionalização das equações	34
3.5 Resumo do modelo matemático	35
4 METODOLOGIA NUMÉRICA	37
4.1 Discretização Temporal das Equações do fluido e da interface	37
4.2 Discretização do Domínio Euleriano	42
4.2.1 Refinamento Local Adaptativo	42
4.2.2 Função indicadora	44

	1
4.3 Discretização do Domínio Lagrangiano	46
4.3.1 Discretização das Equações para a Velocidade Auxiliar u_a	49
4.4 Discretização da Equação de Concentração de Surfactante	50
4.5 Resumo dos passos da solução numérica	53
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	55
5.1 Validação do código numérico	56
5.2 Verificação e validação da implementação da equação de concentração de surfac- tante insolúvel	66
5.2.1 Teste de difusão do surfactante	66
5.2.2 Estudo de uma bolha submetida a um escoamento cisalhante: interface limpa × contaminada	69
5.3 Teste de efeito Marangoni	79
5.4 Simulações para duas bolhas submetidas a um escoamento cisalhante: interface limpa x contaminada	80
5.5 Estudo de linhas de contato	88
6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	103
7 REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	105
8 APÊNDICES	114
8.1 APÊNDICE I - Cálculo do coeficiente de arrasto analítico	114
8.1.1 Força de arrasto	115
8.1.2 Coeficiente de arrasto	119
8.1.3 Coeficiente de arrasto em bolhas a alto Reynolds	120

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Os chamados escoamentos multifásicos são aqueles que apresentam mais de uma fase ou componente escoando simultaneamente. Este tipo de escoamento pode ser encontrado em vários processos industriais como também na natureza. Os escoamentos multifásicos podem existir em diversas formas: escoamentos gás-sólido, líquido-sólido, gás-líquido ou em uma forma mais complexa gás-líquido-sólido.

Os escoamentos gás-sólidos são aqueles em que as partículas sólidas estão suspensas na fase gasosa. Este tipo de escoamento pode ser encontrado em fenômenos naturais como tempestades de areia, avalanches ou em aplicações industriais como, por exemplo, em um leito fluidizado de um resfriador de sólidos como mostra a Fig 1.1. Na figura, o escoamento presente no interior deste resfriador é formado pela mistura ar mais partículas sólidas.

Os escoamentos líquido-sólidos consistem no transporte de partículas sólidas em um líquido. Este tipo de escoamento também ocorre com abundância na natureza como, por exemplo, erosão do solo ou o transporte de areia pelo mar. Como aplicação industrial pode-se citar o escoamento em um hidrociclone, Fig. 1.2. Neste equipamento, tem-se na entrada a mistura líquido mais partículas de diferentes dimensões e através da rotação e dinâmica do escoamento essas partículas são separadas de acordo com suas dimensões.

Os escoamentos gás-líquido podem ser aqueles, por exemplo, em que se tem o movimento de bolhas em um líquido ou gotas líquidas em um gás. Na natureza, o movimento das ondas no oceano, ou gotas de chuva na atmosfera são exemplos onde este tipo de escoamento

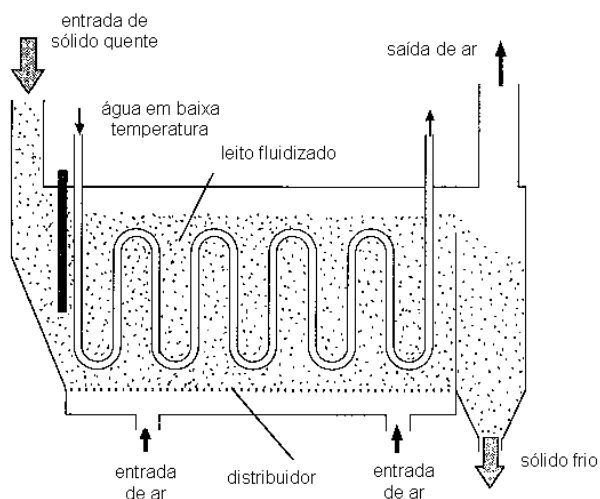


Figura 1.1 – Exemplo de escoamento gás-sólido. Leito fluidizado com resfriador de sólidos (RHODES, 2010).

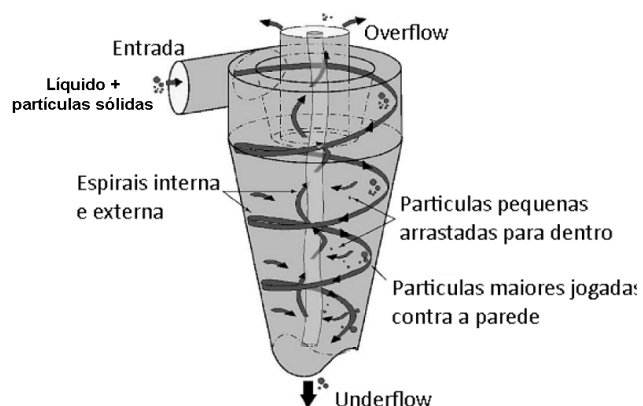


Figura 1.2 – Exemplo de escoamento líquido-sólido. Esquematização de um escoamento em um hidrociclone. Adaptado de Salvo (2009).

acontece. Dentre as aplicações industriais, pode-se citar o escoamento que acontece dentro das caldeiras, Fig. 1.3, onde, no interior do reservatório, a água é aquecida e tem-se a mistura água mais bolhas de vapor.

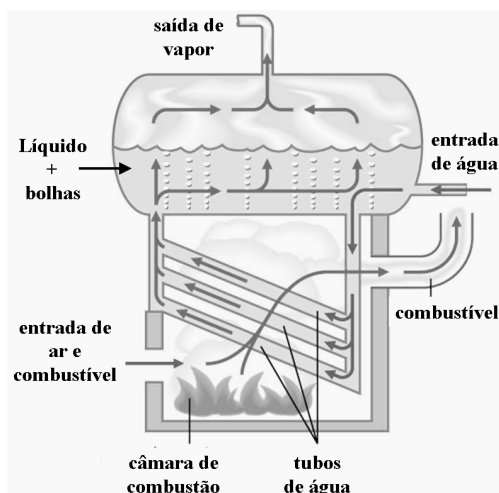


Figura 1.3 – Exemplo de escoamento gás-líquido. Diagrama de uma caldeira (KILLEEN, 2010).

Os escoamentos envolvendo três fases, gás-líquido-sólido, também são encontrados em inúmeras aplicações de engenharia. Como exemplo, cita-se o escoamento que ocorre nas colunas de flotação, Fig. 1.4. Estes equipamentos são usados para fazer separação entre o fluido e as partículas nele presentes. Como pode ser observado na figura, no interior da coluna tem-se líquido com bolhas e partículas sólidas.

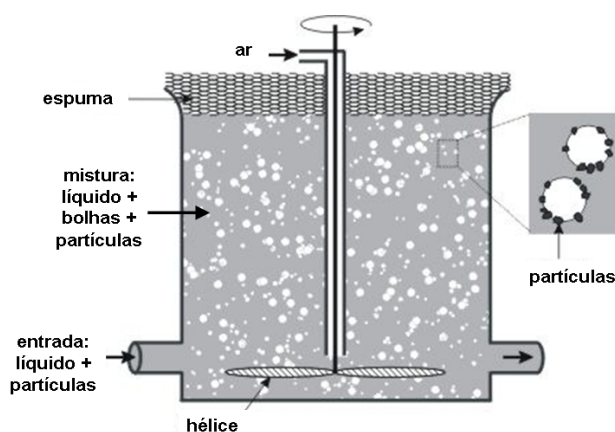


Figura 1.4 – Exemplo de escoamento gás-líquido-sólido. Desenho esquemático de uma coluna de flotação (ULOSY, 2010).

Referindo-se especificamente aos escoamentos gás-líquido, eles são constituídos de um fluido ambiente chamado de fase contínua, e a fase dispersa, que são as bolhas ou gotas presentes no escoamento. As bolhas e gotas se deformam livremente dentro da fase contínua e podem

assumir diferentes formas como esférica, elíptica, calotas, etc. Além dos escoamentos dispersos, os escoamentos gás-líquido também apresentam outras estruturas interfaciais complexas, chamados escoamentos separados, misturas e escoamentos transicionais. Por exemplo, num tubo vertical, as várias configurações dos escoamentos gás-líquidos estão mostradas na Fig. 1.5.

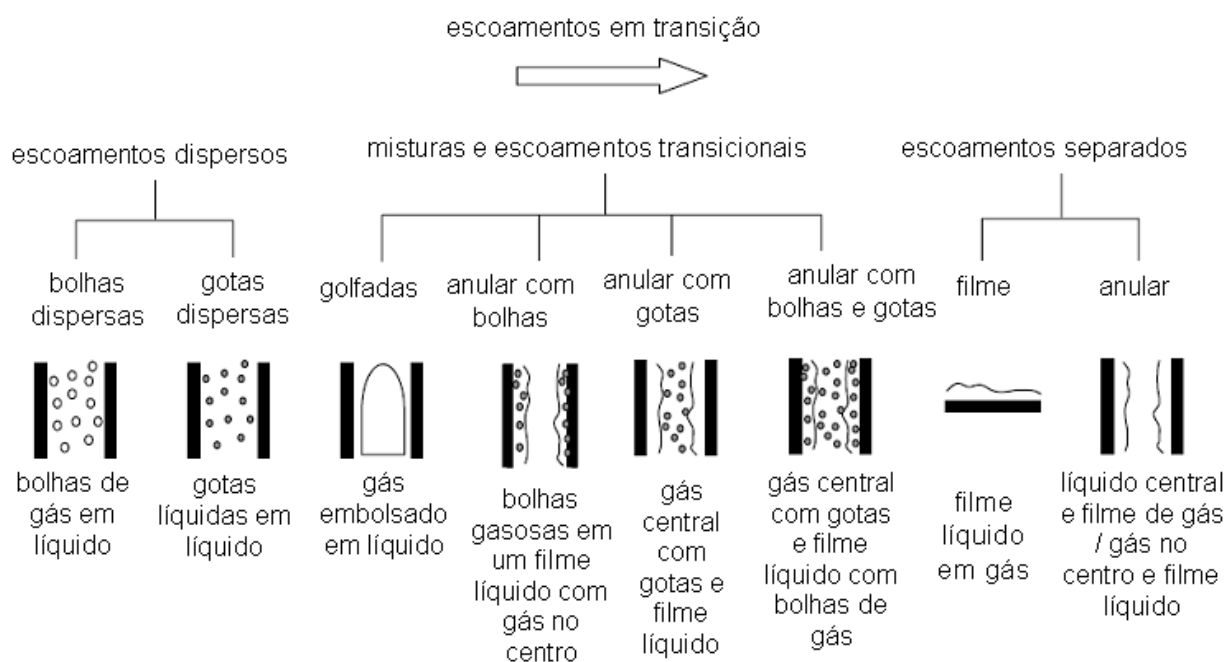


Figura 1.5 – Classificação dos escoamentos gás-líquido em um tubo vertical. Adaptado de Yeoh e Tu (2010).

No contexto de escoamentos bifásicos, comumente encontram-se aqueles nos quais há surfactantes. Surfactantes são agentes químicos ativos que podem estar presentes em sistemas, tanto na forma de impurezas ou substâncias adicionadas à mistura para manipular escoamentos interfaciais. Devido ao fato que, em sistemas reais, surfactantes estão quase sempre presentes, o estudo de escoamentos com presença de contaminantes é de prática e fundamental importância.

Surfactante é uma palavra derivada da contração da expressão “*surface active agent*”, termo que significa, literalmente, “agente ativo na superfície”. As moléculas de surfactantes consistem de uma cabeça hidrofílica (polar) e uma cauda hidrofóbica (apolar), Fig. 1.6. Esta dupla natureza físico-química faz com que a molécula procure a zona de transição entre as fases em um ambiente bifásico. Como exemplo de surfactante, observe a molécula de dodecil sulfato de sódio, Fig. 1.7. A cabeça polar é absorvida pela fase aquosa enquanto que a cauda tem maior afinidade com a fase não aquosa.

Surfactantes são amplamente usados e encontrados em um grande número de apli-

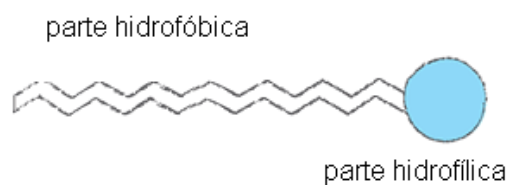


Figura 1.6 – Representação esquemática de uma molécula de surfactante.

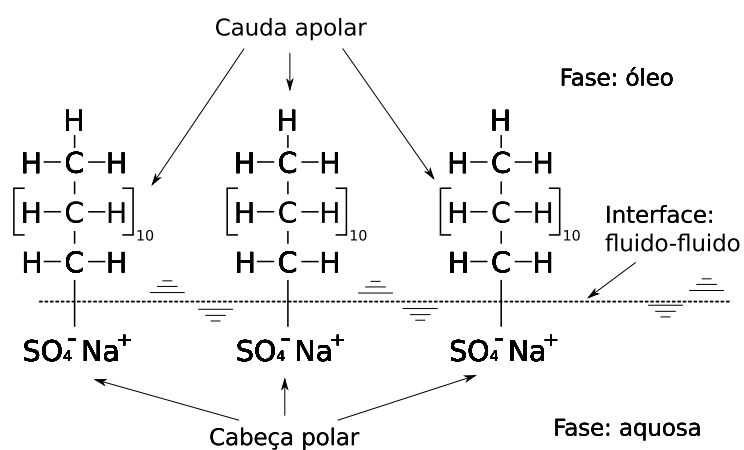


Figura 1.7 – Molécula de dodecil sulfato de sódio em uma interface fluida (EDWARDS; BRENNER; WASAN, 1991).

cações por causa de sua considerável habilidade de influenciar as propriedades de superfícies e interfaces. Como exemplos de surfactantes podemos citar: sabões, detergentes, germicidas, fungicidas ou mesmo surfactantes naturais como a proteína caseína presente no leite ou a proteína lecitina presente na gema do ovo. São empregados desde aplicações industriais a biomédicas. No último caso, em particular, eles têm um papel vital em reduzir o trabalho requerido para expandir os pulmões durante a respiração ao diminuir a tensão superficial do líquido dos alvéolos e linhas respiratórias (MURADOGLU; TRYGGVASON, 2008). Em aplicações de engenharia, eles são usados para fazer emulsões, para manipular bolhas e gotas em microcanais, para estabilizar gotas suspensas em um meio imiscível, usados no processo de purificação de água, etc. Esses agentes ativos também têm um importante papel na indústria de petróleo, onde são aplicados ou encontrados em todos os estágios de extração e processamento do petróleo, da perfuração, injeção, produção, até oleodutos e transporte de emulsão de petróleo.

A presença destes agentes ativos pode afetar criticamente a dinâmica de sistemas de escoamentos multifásicos (MURADOGLU; TRYGGVASON, 2008). Contaminantes podem eliminar as circulações internas de bolhas ou gotas e, conseqüentemente, aumentar significativamente o arrasto. Calcular a influência desses agentes ativos pode não ser simples devido ao fato de tanto a quantidade quanto a natureza dos contaminantes serem importantes na determinação de seus efeitos (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978).

Os surfactantes são coletados pela interface formando uma zona entre o fluido contínuo e o fluido disperso. Para ilustrar este comportamento, apresenta-se na Fig. 1.8, partículas de surfactante aderidas à uma interface. Há dois modelos de camada de surfactante absorvida pela interface: insolúvel e solúvel. Se a convecção de surfactante no fluido ambiente for muito baixa comparada com a convecção na superfície, o surfactante na bolha se comporta como uma camada insolúvel. No caso contrário, o surfactante é dito solúvel e há uma contínua troca de surfactante entre o fluido ambiente e a camada de surfactante junto a interface.

Surfactantes aderidos à superfície resultam em uma diminuição, não uniforme, de tensão superficial junto à interface. Regiões de alta concentração de surfactante tem uma baixa tensão superficial. Isso torna a força capilar (normal) não linear e introduz a força de Marangoni (tangencial). A força de Marangoni aparece devido à um gradiente de tensão superficial, sendo esta propriedade afetada pela presença de surfactante ou por variação de temperatura. Esta

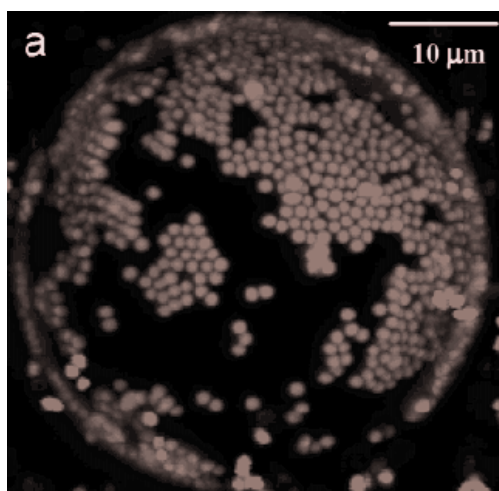


Figura 1.8 – Polistireno (1 micrômetro) que estabiliza uma bolha de óleo em água (TARIMALA; DAI, 2004).

força é responsável por incorporar à dinâmica da bolha a influência dos agentes ativos presentes no fluido ambiente e na interface. Quando se tem um sistema livre de surfactantes, a força de Marangoni desaparece devido a uniformidade da tensão superficial ao longo da interface.

Como apontado por Stone e Leal (1990), há dois principais efeitos competitivos associados com a presença de agentes ativos na superfície: (i) a concentração de surfactante, por advecção, reduz a tensão superficial e tende a produzir grandes deformações interfaciais e (ii) a diluição de surfactante devido a extensa área interfacial aumenta a tensão superficial e, por isso, atua de maneira contrária a advecção de surfactante.

O problema de linhas de contato se dá quando se tem dois fluidos imiscíveis em contato com um sólido, como mostra a Fig. 1.9, e as linhas onde a interface mantém contato com o sólido são chamadas de linhas de contato. Observe que nas linhas de contato, para caso tridimensional, ou nos pontos de contato, para caso bidimensional, têm-se uma interação tripla: fluido1, fluido2 e sólido. A presença de agentes ativos neste problema atuaria de forma a modificar o valor do ângulo de contato entre a interface e o sólido. Este problema também é de grande importância industrial. Ele aparece em processos de umedecimento, revestimento e em muitas aplicações biológicas. As linhas de contato ou pontos de contato têm sido objeto de intensa investigação de muitos pesquisadores há várias décadas devido à dificuldade de se tratar numericamente e matematicamente, com consistência física, a condição de contorno nos pontos triplos de contato (QIAN, WANG e SHENG, 2003 e REN e E, 2007). A análise desse tipo de problema possibilita um maior entendimento de processos que envolvem interações das fases com superfícies sólidas.

Na Figura 1.10, tem-se um escoamento anular em transição do regime laminar para o regime turbulento. Observa-se que existem vários pontos onde se tem o contato triplo: parede, ar e água. Outro exemplo pode ser visualizado na Fig. 1.11 onde se tem a colisão de uma gota com uma superfície sólida em diferentes temperaturas. As forças existentes nos pontos triplos de contato têm papel essencial no espalhamento ou equilíbrio da mesma.

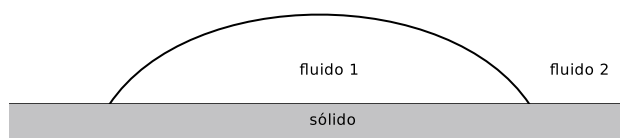


Figura 1.9 – Interface em contato com uma superfície sólida.



Figura 1.10 – Escoamento anular água e ar (ISHII; HIBIKI, 2006).

1.0.1 Objetivos

Um melhor entendimento dos escoamentos multifásicos proporciona um aumento de performance, reduz os custos e melhora a segurança nas várias áreas de aplicação. A interação entre as várias entidades como bolhas, gotas, partículas e surfactantes, imersas em um fluido, faz dos escoamentos multifásicos problemas muito complexos. Isto limita o uso de ferramentas analíticas e experimentais, onde o controle do experimento é dificultado devido aos vários graus de liberdade existentes. Medidas finas para investigar o escoamento interno de uma bolha ou escoamentos perto da superfície de uma bolha não são fáceis de se realizar (MALISKA et al.,

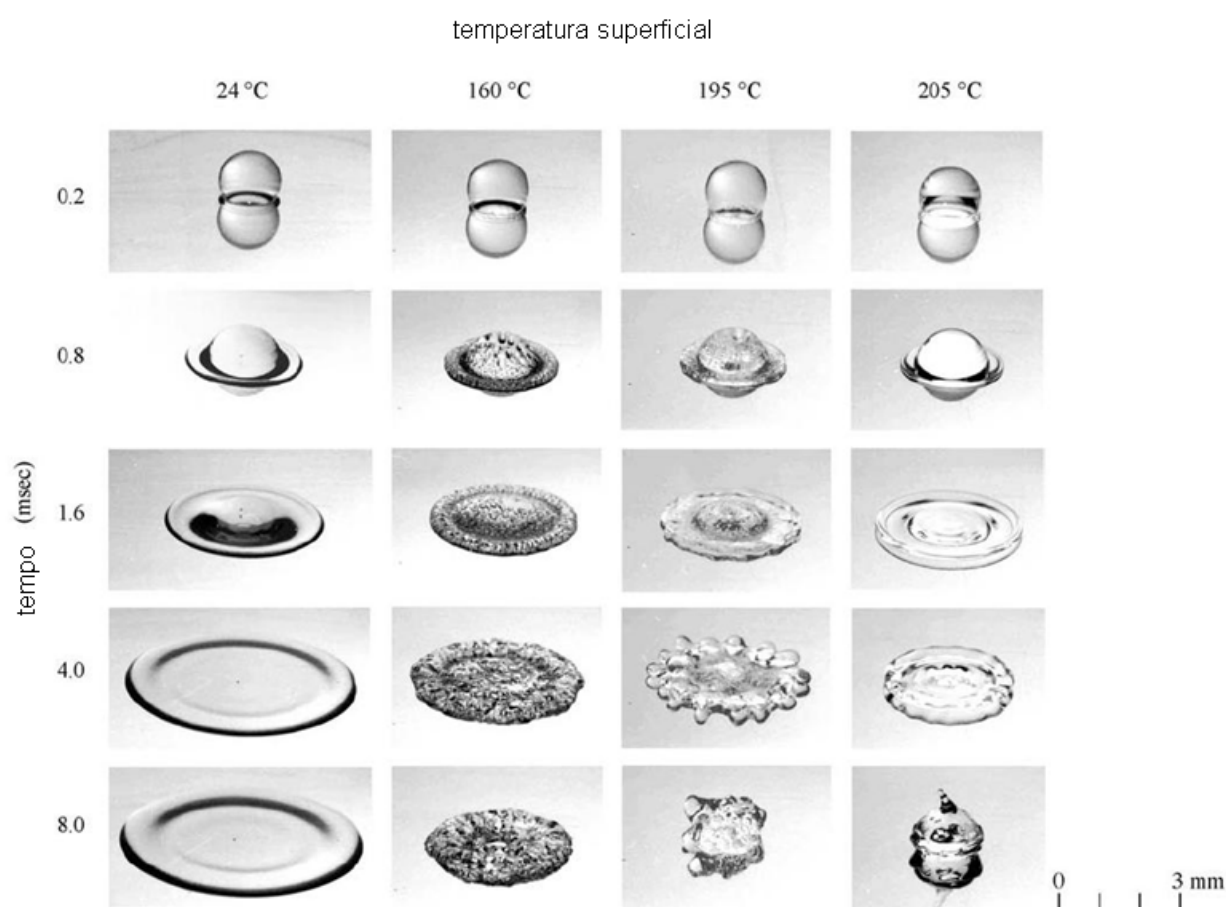


Figura 1.11 – Impacto, espalhamento e ebulição de uma gota de n-heptano em uma superfície de aço inoxidável (SAMIMY et al., 2004).

2008). Por outro lado, simulações computacionais permitem modificar, incluir ou desconsiderar parâmetros e variáveis. Por isso, as simulações numéricas têm importância essencial no estudo destes escoamentos.

Assim, os objetivos almejados no presente trabalho consistem em:

- Estudar e implementar um modelo matemático para concentração de surfactante insolúvel para escoamentos bidimensionais para interface móveis e deformáveis;
- Estudar e simular problemas que envolvem pontos triplos de contato buscando uma comparação entre um sistema livre de surfactantes e contaminado.

As simulações numéricas destes problemas envolvem a análise de escoamentos ao redor de geometrias móveis que podem ou não se deformar. Existem basicamente duas metodologias empregadas nos estudos destes problemas: (i) métodos de captura de interface, e. g. Método *Level-Set* e *Volume of Fluid*, e (ii) métodos de acompanhamento de interface, e. g. método da Fronteira Imersa (do inglês *Immersed Boundary Method*). No presente trabalho, optou-se em empregar esta última metodologia pela vantagem que ela apresenta em possibilitar a simulação de geometria complexas em malhas cartesianas e sua habilidade de calcular as quantidades geométricas (normal e curvatura) e, portanto, as forças de tensão interfacial de maneira eficiente e garantindo segunda ordem de convergência. Além disso, aqui se utilizam malhas bloco-estruturadas refinadas localmente as quais, devido à mobilidade da interface, o refinamento é dinâmico ao longo do tempo. O método *Front-Tracking* aqui empregado é um método híbrido pois utiliza uma função *Level-Set* como uma função indicadora de fluido, a qual será vista com mais detalhes no Capítulo III.

As implementações computacionais foram feitas no código AMR2D desenvolvido originalmente por Villar (2007). Este código é resultado de um trabalho em conjunto do Laboratório de Mecânica dos Fluidos (MFLab) da Universidade Federal de Uberlândia (UFU) e o Laboratório de Matemática Aplicada (LabMAP) da Universidade de São Paulo (USP) e foi desenvolvido para estudos de escoamentos bifásicos bidimensionais.

Em um primeiro momento realiza-se a validação do código numérico utilizado por intermédio da análise de coeficiente de arrasto, onde são comparados os resultados analíticos e numéricos. Em seguida, faz-se a verificação e validação das implementações feitas para a

incorporação da presença do surfactante no código. Por último, estuda-se o problema de pontos triplos de contato, verificando a influência da presença de surfactantes nestes problemas.

1.0.2 Organização do trabalho

A redação da presente dissertação é dividida em seis capítulos, sendo que no Capítulo I apresentam-se as motivações que levaram ao seu desenvolvimento. No Capítulo II, é apresentado um levantamento bibliográfico sobre os temas relevantes ao desenvolvimento do trabalho principalmente em temas ligados à métodos numéricos em escoamentos multifásicos limpos e com presença de agentes ativos. A modelagem matemática da fase dispersa e da fase contínua, bem como a modelagem do surfactante, são apresentados no Capítulo III. O Capítulo IV apresenta uma descrição da metodologia numérica empregada mostrando também as equações discretizadas. A validação do código, das implementações feitas e os resultados referentes aos problemas estudados podem ser encontradas no Capítulo V. O capítulo VI conclui o presente trabalho e apresenta sugestões para desenvolvimentos futuros.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, apresenta-se uma breve revisão bibliográfica sobre as metodologias empregadas para modelagem e simulação de escoamentos bifásicos, abordando os principais métodos empregados com um enfoque especial à modelagem híbrida *Front-Tracking/Level-Set*. Em seguida, apresenta-se uma revisão mais detalhada sobre a modelagem com a presença de surfactante, abordando os principais trabalhos de estudo deste problema. Também apresenta-se aqui uma revisão sobre os trabalhos que tratam do problema de linhas de contato com a presença de surfactante.

2.1 Escoamentos Bifásicos

A forma de modelar matematicamente os escoamentos bifásicos depende fortemente do regime de escoamento (VILLAR, 2007; WÖRNER, 2003; YEOH e TU, 2010). Portanto, existem diferentes maneiras para a modelagem de escoamentos bifásicos: uma primeira utiliza modelos baseados nas equações médias de Navier-Stokes e uma segunda maneira envolve a solução detalhada das equações de Navier-Stokes que, aqui, serão chamadas de modelos a “um fluido” (NIECKELE, 2010). A modelagem de um escoamento bifásico empregando as equações médias faz-se necessária quando a solução direta das equações de Navier-Stokes não é praticável por requerer um alto esforço computacional. Na literatura, muitos tipos de médias são usadas: médias temporais (ISHII e HIBIKI, 2006), médias volumétricas (WHITAKER, 1998) e médias de

conjunto (DREW e PASSMAN, 1999). Estas equações, obtidas através do processo de média, não são fechadas e, por isso, modelos adicionais devem ser usados. Há três principais modelos que se diferenciam pela complexidade e aplicabilidade: modelo homogêneo, modelo de difusão e modelo a dois fluidos (ou modelo Euler-Euler (WÖRNER, 2003)). O modelo homogêneo pressupõe que ambas as fases se movimentam com a mesma velocidade e o equacionamento é similar ao caso monofásico com propriedades físicas calculadas a partir de médias ponderadas pelas frações volumétricas das diferentes fases. O modelo de difusão pode ser considerado como uma generalização do modelo homogêneo. Neste caso, assume-se que as fases estão em equilíbrio mecânico. Desta forma, as velocidades das fases se diferem uma das outras. A principal suposição do modelo de difusão é que a velocidade relativa entre as fases pode ser aproximada por uma expressão algébrica. Finalmente, o modelo a dois fluidos modela cada fase separadamente junto com as condições de transferência interfacial ponto a ponto. Assim, matematicamente tem-se uma equação de conservação de massa e uma equação de balanço de quantidade de movimento para cada fase.

A segunda forma de modelar os escoamentos bifásicos, denominada de modelos a “um fluido”, envolvem a solução de um único conjunto de equações de conservação em todo o domínio, e os diferentes fluidos são identificados por algum tipo de marcador, o qual é advectado pelo escoamento. Na modelagem a “um fluido” tem-se uma descrição detalhada da deformação e evolução topológica da interface que separa as fases. A principal dificuldade na simulação da interface é que sua forma móvel é parte da solução. Em adição, quantidades físicas como densidade, viscosidade e pressão são descontínuas na interface. Existem basicamente duas técnicas usadas pertencentes a esta forma de modelagem: captura (*capturing*) e acompanhamento (*tracking*). Em captura de interface, a interface é implicitamente definida por intermédio de uma função escalar global (e. g. densidade, função distância ou fração volumétrica) que age como uma função indicadora. Estes métodos capturam o movimento da interface em uma malha euleriana e tratam automaticamente de mudanças topológicas da interface. Esta é a principal vantagem destes métodos, pois, não são introduzidos nenhuma hipótese sobre a conectividade da interface, isto é, não é necessário a intervenção quando ocorre alguma transição topológica na interface que separa as fases, como por exemplo, coalescência ou fragmentação de bolhas/gotas. A desvantagem é que há uma difusão da interface sobre várias células, resultando em uma perda

de precisão. Dentro da técnica de captura destacam-se os métodos *Volume-of-Fluid* (PUCKETT et al., 1997) e *Level-Set* (OSHER e SETHIAN, 1988 e SUSSMAN, SMERKA e OSHER, 1994).

Em acompanhamento de interface, a interface é discretizada diretamente (malha lagrangiana), a qual se move de forma independente sobre a malha euleriana na qual está sobreposta. Esta técnica oferece uma melhor precisão quanto aos parâmetros geométricos ao se comparar com os métodos anteriores, mas há um custo maior de complexidade computacional. Dentre os métodos que empregam esta técnica destacam-se os métodos *Volume Tracking* (RUDMAN, 1997), *Boundary Integral* (ZALOSH, 1976; HOU, LOWENGRUB e SHELLEYZ, 2001) e *Immersed Boundary* (PESKIN, 1977; MITTAL e IACCARINO, 2005).

Um método derivado do Método da Fronteira Imersa foi desenvolvido por Unverdi e Tryggvason (1992). A principal idéia deste método é avaliar o campo de velocidade da solução das equações de momento em uma malha cartesiana fixa, enquanto a interface é representada por um conjunto de pontos. Esses pontos são advectados com velocidade local, interpolada da malha fixa para as posições dos pontos da interface. Depois que este passo é completado, a interface é novamente reestruturada e pontos são adicionados ou removidos para assegurar uma resolução localmente adequada da interface (WÖRNER, 2003). Como a interface é tratada de forma direta e tem-se também a presença de uma função indicadora que permite atualizar as propriedades do fluido à medida que a interface se desloca e sendo esta interface tratada de maneira estendida, esta metodologia se enquadra dentro dos modelos híbridos *Front-Tracking/ Front-Capturing* ou também chamados de *Front-Tracking/Level-Set*. Segundo Unverdi e Tryggvason (1992), este método evita difusão numérica e oscilações, e permite que a tensão superficial seja incorporada de uma forma natural.

A modelagem de escoamentos interfaciais com a presença de surfactantes é uma tarefa ainda mais desafiadora. Isso porque o surfactante é transportado e difundido ao longo da interface e, conseqüentemente, a equação de transporte para o surfactante tem que ser resolvida sobre a interface móvel. A equação de evolução de concentração de surfactante deve ser resolvida acoplada com as equações do escoamento. Devido à isso, a interface precisa ser capturada ou acompanhada com precisão, ou seja, o estudo dos efeitos de surfactantes em um escoamento é fortemente dependente da acurácia do esquema numérico usado para resolver, simultaneamente, as equações do escoamento e de transporte de surfactante em um domínio móvel. Para tal, no

presente trabalho, optou-se em empregar o método híbrido *Front-Tracking/ Front-Capturing* de Unverdi e Tryggvason (1992), devido as vantagens de representar de maneira eficiente a interface como uma superfície contínua e sua habilidade de calcular as quantidades geométricas (normal e curvatura) e, portanto, as forças de tensão interfacial de maneira eficiente e garantindo segunda ordem de convergência.

2.2 Escoamentos na Presença de Surfactantes

A partir da observação de Boussinesq (1913) que impurezas atuam reduzindo a velocidade de uma gota viscosa, o efeito de surfactantes tem sido investigado sistematicamente para uma variedade de escoamentos. Os trabalhos iniciais sobre o estudo de surfactantes consideravam que o tensor deformação superficial poderia ser descrito adequadamente em termos de uma tensão isotrópica que é função da temperatura e da concentração local de surfactante (LI e POZRIKIDIS, 1997). A partir de então, equações constitutivas mais sofisticadas foram empregadas. Nestes modelos, as moléculas de surfactantes são transportadas e difundidas sobre a interface, como também, em alguns casos, podem ser absorvidas e desabsorvidas para a fase contínua de acordo com uma lei cinética. Estudos iniciais de efeito de surfactantes são revisados por Levich e Krylov (1969), Clift, Grace e Weber (1974) e Harper (1982).

Recentemente, o interesse em escoamentos interfaciais com surfactantes foi renovado. No contexto do estudo numérico de escoamentos com interfaces não deformáveis contaminados, entre outros, cita-se aqui o trabalho de Fdhila e Duineveld (1996) que estudaram a ascensão de bolhas na presença de um surfactante solúvel, investigando a velocidade terminal das bolhas após atingir o regime permanente. Eles observaram que a velocidade terminal é reduzida quando se tem presença de surfactante. Também para interfaces não deformáveis, Cuenot, Magnaudet e Spennato (1997) estudaram bolhas em ascensão buscando comparar o coeficiente de arrasto para bolhas contaminadas e livres de contaminantes. Eles mostram que uma bolha em um escoamento contaminado tem seu coeficiente de arrasto drasticamente maior e, em alguns casos, alcançando o valor correspondente ao de uma esfera rígida.

Para o estudo de escoamentos com interfaces deformáveis, há relativamente poucos trabalhos que incorporam os efeitos de surfactantes. Muitos dos primeiros trabalhos para in-

terfaces deformáveis e com presença de surfactante focaram suas investigações no escoamento de Stokes baseando-se na Formulação Integral de Contorno (LI e POZRIKIDIS, 1997). Neste método, as condições interfaciais cinemáticas e dinâmicas são convenientemente incorporadas na representação integral. Especificamente, o salto na interface devido a tensão superficial, consistindo nas contribuições de Laplace (normal) e Marangoni (tangencial), serve como uma densidade de força da camada hidrodinâmica do escoamento de Stokes. O método numérico envolve a solução de uma equação integral de segunda espécie para a velocidade interfacial, enquanto, simultaneamente, integra-se a equação de transporte de surfactante usando métodos como volumes finitos, diferenças finitas ou elementos finitos. Neste contexto, para o escoamento de Stokes axisimétrico, Stone e Leal (1990) investigaram o efeito de surfactante insolúvel na fragmentação de gotas. Eles concluíram que o grau de deformação é influenciado pelo acúmulo de surfactante nos pólos da gota, deformada devido ao escoamento externo. Milliken, Stone e Leal (1993) investigaram o efeito da razão de viscosidade gota/fluido ambiente e a equação de estado não linear que relaciona a tensão superficial à concentração de surfactante. Pawar e Stebe (1996) estudaram os efeitos de saturação e interação interfacial. Para escoamentos completamente tridimensionais, Li e Pozrikidis (1997) e Yon e Pozrikidis (1998) investigaram os efeitos de surfactantes insolúveis na dinâmica de uma gota em um escoamento de Stokes.

Formulações contínuas utilizando as técnicas de captura e acompanhamento da interface têm sido primeiramente implementadas para gotas/bolhas limpas. Recentemente, entretanto, há alguns trabalhos onde os efeitos de surfactantes são incorporados. Empregando a técnica de captura da interface, Renardy, Renardy e Cristini (2002) propuseram um esquema numérico baseado no método *Volume-of-Fluid* para a simulação de escoamentos interfaciais com surfactantes. A formulação do esquema numérico depende de uma equação linear de estado que relaciona a tensão superficial e o surfactante. Um outro esquema numérico baseado no método de *Volume-of-Fluid* foi desenvolvido para escoamentos com surfactante insolúvel por James e Lowengrub (2004), onde uma equação de estado arbitrária poderia ser usada. Além disso, os autores não determinaram a concentração de surfactante diretamente, mas através de cálculos da área interfacial e da massa de surfactante e, separadamente, a concentração de surfactante era obtida. Eles aplicaram este método para o estudo de uma gota em um escoamento cisalhante e sua subsequente retração e fragmentação. Xu et al. (2006) estudaram escoamentos interfaci-

ais com presença de surfactante insolúvel por intermédio do método *Level-Set* e aplicaram este estudo para escoamentos de Stokes cisalhantes com uma, duas e múltiplas bolhas deformáveis. Eles mostraram que a presença de surfactantes resulta em grandes deformações e seus efeitos são mais acentuados no escoamento com múltiplas bolhas.

Utilizando a técnica híbrida de captura/acompanhamento da interface (*Front-Tracking* / *Front-Capturing*), Jan e Tryggvason (1991) estudaram o efeito de surfactantes na ascensão de bolhas utilizando um método, já mencionado, derivado do Método da Fronteira Imersa. Através desta mesma metodologia, Tasoglu, Demirci e Muradoglu (2008) apresentaram um estudo do efeito de surfactante solúvel em uma bolha em ascensão em um tubo axisimétrico, onde os regimes esférico, elipsoidal e calota-elipsoidal foram examinados. Eles observaram que, para o regime esférico, a redução da velocidade terminal para os escoamentos contaminados é mais acentuada. Também empregando este método, Zhang, Eckmann e Ayyaswamy (2006) apresentaram simulações de uma bolha deformável movendo-se em um escoamento de Poiseulli na presença de surfactante solúvel e insolúvel. Muradoglu e Tryggvason (2008) utilizaram este método para estudar a fragmentação de gotas na presença de surfactante solúvel. Ceniceros (2003) empregou esta técnica para estudar os efeitos de surfactantes na formação de ondas capilares.

A equação básica de transporte de surfactante sobre uma interface deformável foi derivada por Scriven (1960), Aris (1962) e Waxman (1984). Porém, nestes trabalhos, ela é descrita empregando-se complexas operações de Geometria Diferencial. Lai, Tseng e Huang (2008), seguindo as idéias de Stone (1990), apresentaram uma dedução parametrizada da equação de transporte de surfactante sobre uma superfície deformável, a qual é baseada na formulação lagrangiana da interface. A equação de surfactante, neste caso, tornou-se mais simples e a discretização é feita de maneira que a conservação de massa de surfactante é perfeitamente satisfeita. Empregando esta equação, os autores realizaram um estudo detalhado, através do Método da Fronteira Imersa, de uma gota deformável em um escoamento cisalhante com a presença de surfactante insolúvel. Para o presente estudo, a equação de Lai, Tseng e Huang (2008) foi empregada devido a sua facilidade de implementação e incorporação no código AMR2D, onde o tratamento da interface é feito através do método *Front-Tracking*.

Como mencionado na introdução, o problema de linhas de contato aparece quando dois fluidos imiscíveis estão em contato com uma superfície sólida e, neste caso, existe uma linha móvel

onde se tem a interação das três fases presentes. Existem poucos artigos na literatura que tratam deste assunto abordando-o para escoamentos com a presença de surfactantes. Pasandideh-Fard et al. (1996) estudaram a influência da tensão superficial e ângulo de contato no impacto de uma gota de água em uma superfície de aço, usando modelagem numérica via método *Volume of Fluid* e experimental. Eles investigaram a influência da adição de surfactantes e os resultados mostram que a gota contaminada tinha sua forma alterada durante a fase de contração quando comparada com a gota limpa. Via teoria de lubrificação, Clay e Miksis (2004) e Chan e Borhan (2005) estudaram o espalhamento axissimétrico de uma gota apoiada em uma superfície sólida, coberta por um surfactante insolúvel. Eles mostram que o surfactante age aumentando a taxa de espalhamento da gota. Mais recentemente, Lai, Tseng e Huang (2010), dando continuidade aos estudos de escoamentos contaminados, apresentaram um estudo sobre linhas de contato, com surfactante insolúvel, utilizando o Método da Fronteira Imersa. Eles investigaram o efeito do surfactante no ângulo de contato de gotas e mostraram que o surfactante tem influência significativa nos movimentos de espalhamento e contração de uma gota, em adição à propriedade de umedecimento de substratos sólidos. Seguindo a idéia de Lai, Tseng e Huang (2010), neste trabalho fez-se um estudo e comparação da dinâmica de uma meia gota limpa e contaminada apoiada sobre uma superfície sólida.

CAPÍTULO III

MODELAGEM MATEMÁTICA

Este capítulo descreve a formulação matemática de escoamentos newtonianos incompressíveis isotérmicos com a presença de dois ou mais fluidos imiscíveis com propriedades materiais distintas. Esta formulação baseia-se na mecânica do contínuo, onde a modelagem matemática abrange as equações de balanço de massa e de quantidade de movimento.

Os problemas aqui estudados são tratados por intermédio da metodologia de fronteira imersa desenvolvida por Peskin (1977). Neste caso, o fluido, como um todo, é representado por uma malha euleriana fixa e a interface é representada por uma malha lagrangiana que se desloca. Como pode ser observado na Fig. 3.1, os dois domínios são independentes e a formulação matemática é responsável por fazer o acoplamento entre as duas malhas. Isso é feito de modo que o campo euleriano será afetado pela presença da interface por intermédio de um termo fonte de força interfacial.

As equações de Navier-Stokes são responsáveis por modelar e descrever a dinâmica do fluido que abrange todo o domínio euleriano e a formulação lagrangiana modela a dinâmica da interface. Para alguns dos casos em estudo, além do fluido e da interface presente existe também a presença de surfactantes. Esses agentes ativos são tratados como insolúveis, ou seja, não há transferência de massa de surfactante entre a camada de surfactante da interface e o fluido ambiente e por esse motivo são também tratados via formulação lagrangiana.

A formulação para o domínio euleriano é tratada na Seção 3.1 e a formulação para descrever a dinâmica da interface é tratada na Seção 3.2. A equação governante para a concen-

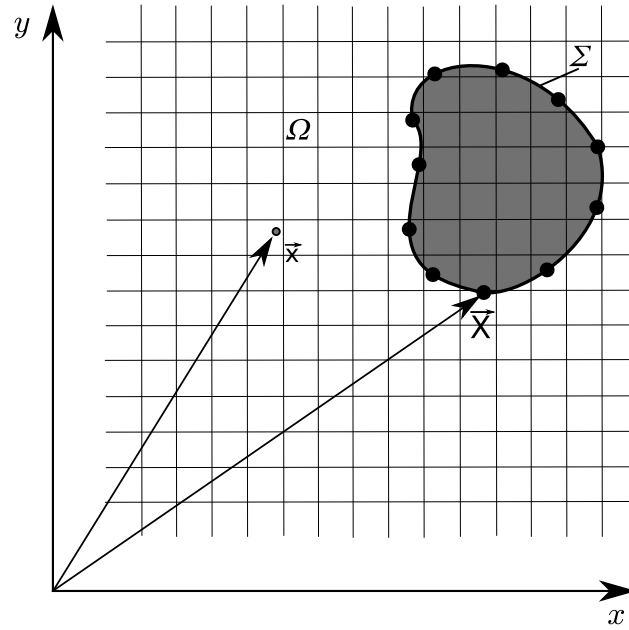


Figura 3.1 – Representação das malhas euleriana e lagrangiana para um corpo imerso de geometria arbitrária.

tração de surfactante é apresentada na Seção 3.3. Na Seção 3.4, tem-se as equações empregadas na forma adimensional. Por último, tem-se na Seção 3.5 um resumo do modelo matemático aqui empregado.

3.1 Modelagem matemática da dinâmica do fluido

Considere um escoamento bifásico incompressível em um domínio retangular fixo contendo uma fase contínua e uma fase dispersa. As equações governantes para este caso são:

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

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (3.2)$$

onde $\mathbf{u}$ é o vetor velocidade, ρ e μ são a densidade e viscosidade dinâmica de cada fase presente do escoamento, p corresponde à pressão, $\mathbf{g}$ é a aceleração gravitacional e o termo fonte $\mathbf{f}$ é uma variável euleriana que, na ausência de outras forças externas, é calculada a partir da força lagrangiana $\mathbf{F}$. O termo fonte $\mathbf{f}$ permite a comunicação entre as equações de Navier-Stokes e as equações para o movimento da interface (PESKIN, 1997). Este termo apresenta valor diferente

de zero sobre a interface e valor nulo fora da interface, a representação deste comportamento é feita empregando-se a função delta de Dirac δ ,

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

onde o vetor $\mathbf{x}$ é a posição de um ponto no domínio euleriano, o vetor $\mathbf{X}$ é a posição de um ponto sobre a interface lagrangiana e $\mathbf{F}$ é uma densidade de força singular definida apenas sobre a interface. A interface é representada na forma paramétrica por $\mathbf{X}(s, t) = (X(s, t), Y(s, t))$, $0 \leq s \leq L_b$, onde s é o parâmetro lagrangiano e L_b o comprimento da interface.

A função δ , no processo de discretização, é substituída por uma função suave δ_h como em Peskin (1977), dada, por exemplo, por

$$\delta_h(\mathbf{x}) = d_h(x) d_h(y), \quad (3.4)$$

$$d_h(\xi) = \begin{cases} 0.5 [1 + \cos(\frac{\pi}{h} \xi)]/h, & \text{for } |\xi| \leq h, \\ 0, & \text{for } |\xi| > h, \end{cases} \quad (3.5)$$

onde h é um parâmetro numérico dependente do tamanho da malha euleriana Δx e Δy . Para os testes aqui reportados, $h = 2\Delta x$ e admitiu-se $\Delta x = \Delta y$. A escolha deste d_h é devida à suas boas propriedades de regularização junto à interface e é motivada por um conjunto de propriedades de compatibilidade descrito por Peskin (1977).

Uma função indicadora ϕ é usada para determinar qual é a distribuição de propriedades eulerianas como ρ e μ . Esta função é computada direta e localmente usando um algoritmo rápido que usa Geometria Computacional. Com esta aproximação ϕ assinala-se a distância até uma representação linear por partes da interface em todo instante de tempo.

Dado ϕ , as propriedades do fluido ρ e μ são calculadas através de uma função Heaviside $H(\phi)$,

$$\rho(\phi) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c) H(\phi), \quad (3.6)$$

$$\mu(\phi) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c) H(\phi), \quad (3.7)$$

onde ρ_c e μ_c correspondem à densidade e viscosidade da fase contínua; ρ_d e μ_d referem-se à fase

dispersa e $H(\phi)$ é a função Heaviside é definida por,

$$H(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{para } \phi < -h \\ 0.5 [1 + \phi/h + \sin(\frac{\pi}{h} \phi)/\pi], & \text{para } |\phi| \leq h \\ 1, & \text{para } \phi > h. \end{cases} \quad (3.8)$$

Observe que para a função Heaviside tem-se

$$\frac{dH(\phi)}{d\phi} = d_h(\phi),$$

onde $d_h(\phi)$ é dado pela Eq. (3.5).

As propriedades físicas ρ e μ são consideradas constantes em cada fase. Para que isso seja possível, admite-se que a massa específica permanece constante sobre uma linha de corrente (VILLAR, 2007).

Reescrevendo a equação de continuidade, Eq. (3.1), tem-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0. \quad (3.9)$$

Como o escoamento é incompressível,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.10)$$

e para que valha a Eq. (3.9) é necessário que ρ seja constante sobre uma linha de corrente.

Assim,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho = 0. \quad (3.11)$$

É importante observar que ao se discretizar a função delta de Dirac por intermédio das Eq. (3.4) e (3.5), a interface acaba se difundindo e se estendendo por algumas células com espessura da ordem de h , na qual a Eq. (3.11) deixa de valer. Isso porque, as linhas de corrente que cruzam esta região sofrem variação de massa específica. Na Fig. 3.2 tem-se o desenvolvimento das linhas de corrente ao redor de uma interface. Observa-se que a região ao longo das linhas de corrente que cruzam a interface estendida sofrem variação de massa específica, por isso, nessa região a conservação de massa não é garantida.

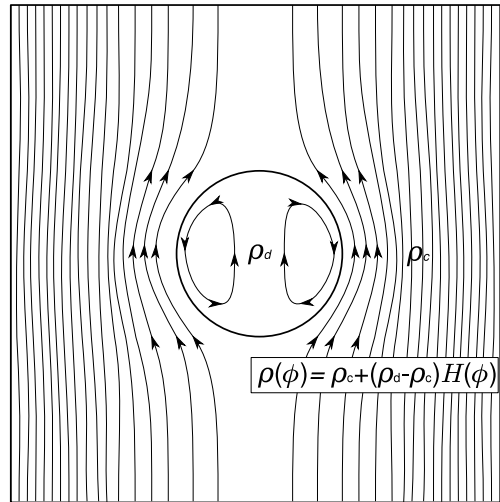


Figura 3.2 – Linhas de corrente ao redor de uma interface, onde ρ_c é a massa específica da fase contínua e ρ_d é a massa específica da fase dispersa, $\rho(\phi)$ identifica a massa específica variável na interface estendida.

Como observado por Villar (2207), esta variação de massa é da ordem da espessura da interface estendida. Uma análise matemática pode ser feita sobre a interface nos instantes $t = t_o$ e $t = t_1$, como mostra a Fig. 3.3, sendo que no instante $t = t_1$ sua geometria é alterada.

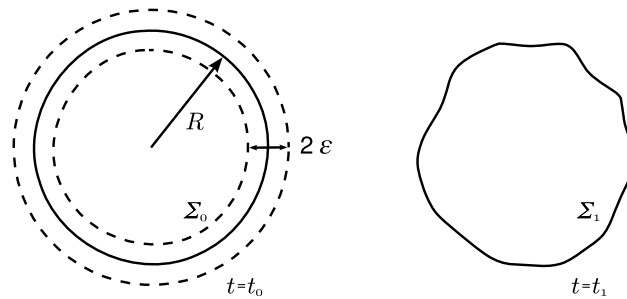


Figura 3.3 – Variação de massa. Interfaces nos instantes $t = t_o$ e $t = t_1$.

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Sigma_1} dx &= \int_{\Sigma_o} (\nabla \cdot \mathbf{u}) dx, \\ &= \int_0^{2\pi} \int_{R-\varepsilon}^{R+\varepsilon} (\nabla \cdot \mathbf{u}) r d\theta dr, \end{aligned} \quad (3.12)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Sigma_1} dx &= \overline{\nabla \cdot \mathbf{u}} \int_0^{2\pi} \int_{R-\varepsilon}^{R+\varepsilon} r \, d\theta \, dr, \\ &= \overline{\nabla \cdot \mathbf{u}} 4\pi^2 \varepsilon. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Assim, conclui-se que a variação da área $A(t)$ em um dado instante de tempo $t = t_1$ é da ordem de ε , ou seja,

$$\frac{d}{dt} A(t) = \mathcal{O}(\varepsilon). \quad (3.14)$$

3.2 Modelagem matemática da dinâmica da interface

A interface Σ foi representada pela forma paramétrica $(X(s, t), Y(s, t))$, $0 \leq s \leq L_b$, onde s é o parâmetro de configuração inicial da interface, que neste estudo, corresponde ao comprimento de arco inicial.

A evolução ou transporte da interface são modelados a partir da velocidade do fluido, utilizando a condição de não deslizamento que pode ser expressa matematicamente por

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \mathbf{u}(\mathbf{X}, t), \quad (3.15)$$

onde $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ corresponde ao vetor velocidade para os pontos lagrangianos, calculada interpolando-se as velocidade eulerianas para os pontos lagrangianos. Assim, define-se uma velocidade lagrangiana da forma

$$\mathbf{U}(s, t) \equiv \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds, \quad (3.16)$$

onde Ω representa o domínio euleriano. Substituindo a Eq. (3.16) na Eq. (3.15) tem-se

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \mathbf{U}(s, t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds. \quad (3.17)$$

Durante o escoamento, a interface pode se deformar afetando diretamente a posição

dos pontos lagrangianos $\mathbf{X}_k$. 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, 2003). Para manter a precisão e a boa qualidade dos cálculos, é necessário um controle da distância entre esses pontos, buscando mantê-los uniformemente distribuídos. Para tal, utiliza-se uma velocidade auxiliar tangencial que permite uma alteração da posição dos pontos lagrangianos, mas que preserve a forma da interface. Desta forma, a física do problema não é alterada. Assim, a Eq. (3.17) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t}, \quad (3.18)$$

onde u_a é velocidade auxiliar, definida tal que os pontos lagrangianos fiquem equidistribuídos e $\mathbf{t} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|$ é o vetor tangente unitário. Para os casos em estudo onde se tem interfaces representadas por curvas fechadas, a equação para u_a utilizada foi (CENICEROS, 2003)

$$u_a(\mathbf{X}, t) = -U_t(\mathbf{X}, t) + \int_0^s [\sigma_s \kappa U_n - \langle \sigma_s \kappa U_n \rangle] ds', \quad (3.19)$$

onde $U_t = \mathbf{U} \cdot \mathbf{t}$, $U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}$, $\sigma_s = \sqrt{X^2(s, t) + Y^2(s, t)}$, $\kappa = \left| \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \right| / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|$ é a curvatura da interface, $\mathbf{n} = \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \right|$ é o vetor normal a interface, $\mathbf{t}$ é o vetor tangente unitário e o operador $\langle \rangle$ define uma média espacial.

A Eq. (3.19) foi deduzida considerando condição de contorno periódicas para a interface, o que acontece no caso de curvas fechadas. Para o estudo de linhas de contato, onde se tem a interface em contato com uma superfície sólida, a interface foi tratada como uma curva aberta e, portanto, as condições de contorno geométricas não são periódicas e a Eq. (3.19) não pode ser empregada. Para estes casos, empregou-se a equação apresentada por Lai, Tseng e Huang (2010),

$$u_a(s, t) = \frac{s}{L_b} \int_0^{L_b} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s'} \cdot \mathbf{t}' ds' - \int_0^s \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s'} \cdot \mathbf{t}' ds', \quad (3.20)$$

lembrando que s é o comprimento de arco inicial entre dos pontos, calculado como mostra Fig. 3.4, L_b corresponde ao comprimento total da interface para o instante inicial e $\mathbf{U}$ corresponde à velocidade lagrangiana. Esta equação foi deduzida partindo-se do princípio que para os pontos de contato tem-se $u_a = 0$, ou seja, para que os pontos de contato não se descolem da superfície.

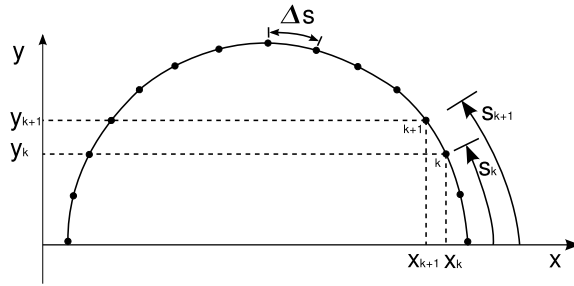


Figura 3.4 – Parâmetro s para uma interface representada por uma curva aberta.

Para a modelagem da densidade de força lagrangiana, considere $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t)$ a densidade de força aplicada no domínio euleriano, como mostra a Fig. 3.5, o balanço de força em um ponto arbitrário sobre um segmento da interface de comprimento Δs definido por $s_1 \leq s \leq s_2$ é dado por

$$\frac{d}{dt} \int_{s_1}^{s_2} m(s) \frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} ds = [\sigma(s, t) \mathbf{t}(s, t)]_{s_1}^{s_2} + \int_{s_1}^{s_2} -\mathbf{F}(s, t) ds, \quad (3.21)$$

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

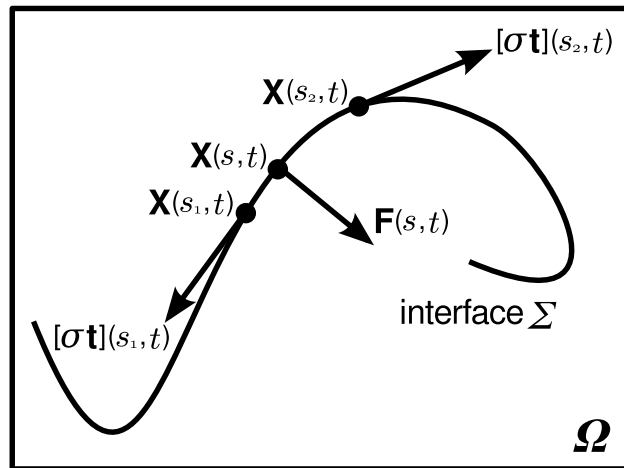


Figura 3.5 – Modelagem da densidade de força lagrangiana. Esquema representativo da interface Σ no domínio Ω .

Assumindo em (3.21) que a massa da interface é desprezível, o termo esquerdo da Eq. (3.21) desaparece. Aplicando o teorema Fundamental do Cálculo, o qual afirma que se uma função contínua é primeiramente integrada e depois diferenciada, volta-se a função original e

rearranjando seus termos, a Eq. (3.21) pode ser reescrita como

$$\int_{s_1}^{s_2} [\mathbf{F} - \frac{\partial(\sigma \mathbf{t})}{\partial s}] ds = 0. \quad (3.22)$$

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

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \frac{\partial}{\partial s}(\sigma \mathbf{t}) = \frac{\partial \sigma}{\partial s} \mathbf{t} + \sigma \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \\ &= \frac{\partial \sigma}{\partial s} \mathbf{t} + \sigma \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \kappa \mathbf{n}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde a parcela $\frac{\partial \sigma}{\partial s} \mathbf{t}$ é a força de Marangoni (direção tangencial) e o termo $\sigma \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s}$ é a força de capilaridade (direção normal). Observe que para casos onde se tem tensão superficial constante, a força de Marangoni é nula e, portanto, a única força na interface é a força de capilaridade. A tensão superficial pode variar quando a distribuição de temperatura é não uniforme sobre a interface ou, como no presente estudo, quando se tem a interface contaminada pela presença de agentes ativos na superfície, os surfactantes.

3.3 Modelagem matemática da dinâmica de surfactantes

A equação de estado de Langmuir relaciona a tensão superficial e a concentração de surfactante, dada por (XU et al., 2005),

$$\sigma = \sigma_c + RT\Gamma_\infty \ln \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right), \quad (3.24)$$

onde Γ é a concentração de surfactante, ou seja, massa de surfactante por unidade de comprimento; σ_c é a tensão superficial da interface limpa ($\Gamma = 0$) e R é a constante ideal dos gases, T é a temperatura absoluta e Γ_∞ é a concentração superficial de máximo empacotamento, este parâmetro representa a concentração máxima de surfactante sobre a superfície. Quando a concentração de surfactante é tal que $\Gamma \ll \Gamma_\infty$ então a aproximação linear pode ser usada:

$$\sigma = \sigma_c - RT\Gamma. \quad (3.25)$$

Observa-se das Eqs. (3.24) e (3.25) que, quando se tem uma distribuição não uniforme de concentração de surfactante, tem-se um gradiente de tensão superficial que tem sentido contrário ao gradiente de concentração de surfactante. Este comportamento está mostrado na Fig. 3.6, onde se tem uma interface movendo-se com velocidade $-u$ e o surfactante é transportado para a parte superior da interface, criando-se, assim, um gradiente de concentração de surfactante e, em sentido contrário a este, um gradiente de tensão superficial.

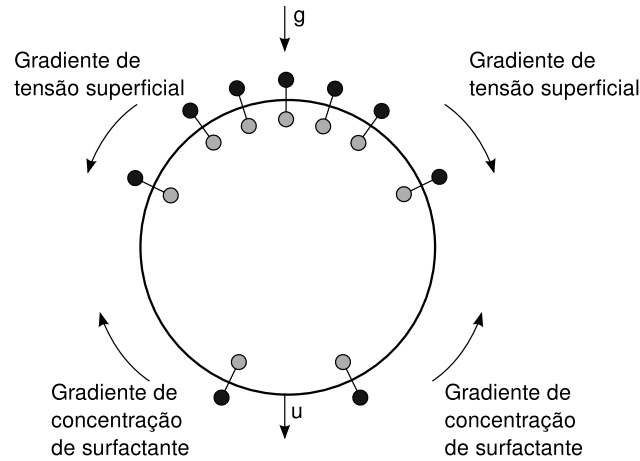


Figura 3.6 – Representação de uma interface com uma concentração de surfactante não uniforme.

Como em Huang, Lai e Tseng (2008), considere $\Sigma(t)$ uma interface imersa em um escoamento bidimensional onde a concentração de surfactante, ou seja, a massa de surfactante por unidade de comprimento, é definida. Esta interface pode se mover e deformar com o fluido. Lembrando que quando o surfactante é dito insolúvel, ele permanece na superfície interfacial, e não é transportado ou difundido para o fluido ao redor. Portanto, a massa total de surfactante sobre a interface deve ser conservada ao longo do tempo, isto é,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Sigma(t)} \Gamma(\mathbf{X}(l, t), t) dl = 0, \quad (3.26)$$

onde dl é o elemento de comprimento de arco.

Num primeiro momento, desconsidera-se a difusão ao longo da interface. Para facilitar o cálculo da derivada no tempo, a interface, para sua configuração inicial, é parametrizada em termos do parâmetro s . Assim, o elemento de comprimento de arco dl , como mostra a Fig. 3.7,

é dado por

$$dl = \sqrt{dX^2 + dY^2} = \sqrt{\left(\frac{\partial X}{\partial s}\right)^2 + \left(\frac{\partial Y}{\partial s}\right)^2} ds. \quad (3.27)$$

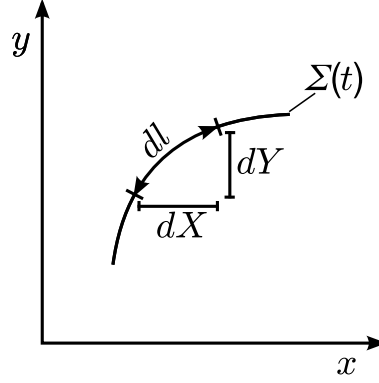


Figura 3.7 – Representação de uma interface com o elemento de comprimento de arco dl .

Substituindo a Eq. (3.27) na Eq. (3.26), a integral passa então ser válida para a interface em sua configuração inicial $\Sigma(0)$. Assim, a Eq. (3.26) pode ser reescrita como

$$\frac{d}{dt} \int_{\Sigma(0)} \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) \left| \frac{\partial}{\partial s} \mathbf{X}(s, t) \right| ds = 0. \quad (3.28)$$

Uma vez fixada a interface para o tempo inicial, leva-se a derivada temporal para dentro da integral. Assim, tem-se

$$\int_{\Sigma(0)} \left(\left| \frac{\partial}{\partial s} \mathbf{X}(s, t) \right| \frac{d}{dt} \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) + \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) \frac{d}{dt} \left| \frac{\partial}{\partial s} \mathbf{X}(s, t) \right| \right) ds = 0. \quad (3.29)$$

Observe que a derivada $\frac{d}{dt} \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t)$ corresponde à derivada material $\frac{D\Gamma}{Dt}$. Pela Regra da Cadeia,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) &= \frac{\partial \Gamma}{\partial X} \frac{dX}{dt} + \frac{\partial \Gamma}{\partial Y} \frac{dY}{dt} + \frac{\partial \Gamma}{\partial t} \\ &= \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \cdot \nabla \Gamma + \frac{\partial \Gamma}{\partial t} = \frac{D\Gamma}{Dt}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

A Eq. (3.29) pode então ser reescrita como

$$\int_{\Sigma(0)} \left(\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma \frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) ds = 0. \quad (3.31)$$

Analisando o segundo termo da Eq. (3.31), tem-se

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| &= \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{\left(\frac{\partial X}{\partial s} \right)^2 + \left(\frac{\partial Y}{\partial s} \right)^2} \\
 &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial X}{\partial s} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial Y}{\partial s} \right)^2 \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \\
 &= \left(\frac{\partial X}{\partial s} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial X}{\partial t} \right) + \frac{\partial Y}{\partial s} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial Y}{\partial t} \right) \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \\
 &= \left(\frac{\partial X}{\partial s} \frac{\partial}{\partial s} U(\mathbf{X}(s, t), t) + \frac{\partial Y}{\partial s} \frac{\partial}{\partial s} V(\mathbf{X}(s, t), t) \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|.
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Observe que

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial s} U(\mathbf{X}(s, t), t) &= \frac{\partial U}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial s} + \frac{\partial U}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial s} \\
 &= \nabla U \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s},
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

e que

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial s} V(\mathbf{X}(s, t), t) &= \frac{\partial V}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial s} + \frac{\partial V}{\partial Y} \frac{\partial Y}{\partial s} \\
 &= \nabla V \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s}.
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Substituindo as Eq. (3.33) e (3.34) na Eq. (3.32), tem-se

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| &= \left(\frac{\partial X}{\partial s} \left(\nabla U \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right) + \frac{\partial Y}{\partial s} \left(\nabla V \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right) \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \\
 &= \left(\frac{\partial X}{\partial s} \left(\nabla U \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right) + \frac{\partial Y}{\partial s} \left(\nabla V \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right) \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \\
 &= \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \cdot \mathbf{t} \right) \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|,
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

onde $\mathbf{t}$ corresponde ao vetor tangente unitário e $\partial \mathbf{U} / \partial t$ à derivada direcional de cada componente de $\mathbf{U}$ na direção do vetor tangente unitário.

Definido-se o *divergente superficial* aplicado a $\mathbf{U}$, $\nabla_s \cdot \mathbf{U}$, como

$$\nabla_s \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \cdot \mathbf{t}, \tag{3.36}$$

a taxa de alongamento da Eq. (3.35) é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| = (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|. \quad (3.37)$$

A partir da Eq. (3.37) e retornando à Eq. (3.31), tem-se

$$\int_{\Sigma(0)} \left(\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) ds = 0. \quad (3.38)$$

Voltando à parametrização no instante t e reescrevendo a integral anterior em termos do elemento de comprimento de arco dl , tem-se

$$\int_{\Sigma(t)} \left(\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \right) dl = 0. \quad (3.39)$$

Como a igualdade vale para todo o instante de tempo, da Eq. (3.39) conclui-se que

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = 0. \quad (3.40)$$

Segundo Stone (1990) e Wang (1996), se houver a difusão de surfactante ao longo da interface, obtém-se a equação de advecção-difusão para o surfactante,

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = D_s \nabla_s^2 \Gamma, \quad (3.41)$$

onde D_s é a difusividade superficial de surfactante e o operador ∇_s^2 corresponde ao *laplaciano superficial* cuja definição é dada por

$$\nabla_s^2 \Gamma = \nabla_s \cdot \nabla_s \Gamma, \quad (3.42)$$

com $\nabla_s \Gamma$ sendo o operador *gradiente superficial*

$$\nabla_s \Gamma = \frac{\partial \Gamma}{\partial \mathbf{t}} \mathbf{t} = (\nabla \Gamma \cdot \mathbf{t}) \mathbf{t}. \quad (3.43)$$

Observe que

$$\begin{aligned}
 \nabla_s^2 \Gamma &= \nabla_s \cdot [(\nabla \Gamma \cdot \mathbf{t}) \mathbf{t}] \\
 &= \nabla_s \cdot \left[\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) \mathbf{t} \right] \\
 &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) \mathbf{t} \right] \cdot \mathbf{t} \\
 &= \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|.
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

Definindo-se uma função $\hat{\Gamma}$ como uma função do parâmetro s e do tempo t , $\hat{\Gamma}(s, t) \doteq \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t)$, obtém-se para a derivada total no tempo

$$\frac{d\Gamma}{dt}(\mathbf{X}(s, t), t) = \frac{d\hat{\Gamma}}{dt}(s, t),$$

que, empregando-se a Regra da Cadeia, pode ser reescrita como

$$\frac{d\Gamma}{dt} = \frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \cdot \nabla \Gamma = \frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \Gamma = \frac{D\Gamma}{Dt} = \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} = \frac{d\hat{\Gamma}}{dt}. \tag{3.45}$$

Retornando-se à Eq. (3.40), tem-se

$$\frac{D\Gamma}{Dt} + \Gamma (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} + \hat{\Gamma} (\nabla_s \cdot \mathbf{U}). \tag{3.46}$$

É possível mostrar que o termo difusivo em termos da nova função $\hat{\Gamma}$ mantém sua forma. Assim sendo, tem-se a equação de advecção-difusão para o surfactante dada por

$$\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} + \hat{\Gamma} (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|, \tag{3.47}$$

a mesma equação deduzida por Lai, Tseng e Huang (2008). Empregando-se a Eq. (3.37), a equação anterior assume a forma

$$\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| + \hat{\Gamma} \frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right). \tag{3.48}$$

Para que se possa utilizar a equidistribuição dos pontos lagrangianos é necessário

introduzir uma velocidade tangencial auxiliar nesta equação. Isto será feito na próxima seção.

3.3.1 Equação de concentração de surfactante para pontos equidistribuídos

Como em Lai, Tseng e Huang (2010), considerando que os pontos lagrangianos estão também submetidos a uma velocidade auxiliar u_a , a derivada total no tempo da concentração de surfactante, Eq. (3.45), passa ser, então, calculada como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) + \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \cdot \nabla \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) &= \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Gamma}(s, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) + (\mathbf{U} + u_a \mathbf{t}) \cdot \nabla \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) &= \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Gamma}(s, t) \\ \frac{D}{Dt} \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t) &= \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Gamma}(s, t) - u_a \mathbf{t} \cdot \nabla \Gamma(\mathbf{X}(s, t), t). \end{aligned} \quad (3.49)$$

Substituindo esta derivada total na equação para a concentração de surfactante, Eq. (3.40), e se incorporando o termo relativo a difusão, tem-se

$$\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} - u_a \mathbf{t} \cdot \nabla \Gamma + \hat{\Gamma} (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) = D_s \nabla_s^2 \hat{\Gamma}. \quad (3.50)$$

Analisando-se o segundo termo desta equação separadamente e lembrando-se da definição de $\hat{\Gamma}$, tem-se

$$u_a \mathbf{t} \cdot \nabla \Gamma = u_a \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|. \quad (3.51)$$

Reescrevendo-se a Eq. (3.50), substituindo-se a Eq. (3.51) e multiplicando-se pelo o fator de alongamento $\left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|$ em ambos os lados obtém-se,

$$\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| + \hat{\Gamma} (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| - u_a \frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial s} = D_s \nabla_s^2 \hat{\Gamma} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|. \quad (3.52)$$

A taxa de alongamento para este caso, com equidistribuição, é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| &= \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| = \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} + \frac{\partial u_a}{\partial s} + u_a \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \right) \cdot \mathbf{t} \\ &= \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \cdot \mathbf{t} + \frac{\partial u_a}{\partial s} = (\nabla_s \cdot \mathbf{U}) \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| + \frac{\partial u_a}{\partial s}. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Usando as Eq. (3.53) e (3.44), a Eq. (3.52) fica da forma (LAI, TSENG e HUANG, 2010),

$$\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| + \hat{\Gamma} \frac{\partial}{\partial t} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| - \frac{\partial (\hat{\Gamma} u_a)}{\partial s} = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right). \quad (3.54)$$

Esta equação pode ainda ser reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\hat{\Gamma} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) - \frac{\partial (\hat{\Gamma} u_a)}{\partial s} = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \hat{\Gamma}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right). \quad (3.55)$$

Observe que quando a velocidade auxiliar u_a é nula, ou seja, caso sem equidistribuição artificial, esta equação se reduz para sua forma original, Eq. (3.48).

3.4 Adimensionalização das equações

Considere ρ_o , μ_o , D_o e σ_o como sendo as propriedades características, para a adimensionalização das equações, para a densidade, viscosidade, difusividade e tensão superficial. Além destes, admita d_o e U_o como as escalas de comprimento e velocidade, respectivamente, e $t = d_o/U_o$ como a escala de tempo, os números adimensionais governantes são dados como

$$Re = \frac{\rho_o U_o d_o}{\mu_o}; \quad Ca = \frac{\mu_o U_o}{\sigma_o}; \quad Pe = \frac{U_o d_o}{D_o} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{RT\Gamma_\infty}{\sigma_o}, \quad (3.56)$$

onde Re é o número de Reynolds, Ca é o número de capilaridade, Pe corresponde ao número de Péclet e β é o número de elasticidade.

As equações de movimento, Eq. (3.2), e conservação de massa, Eq. (3.10), adimensionais são dadas por

$$\rho^*(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* \right) = -\nabla^* p^* + \nabla^* \cdot [\mu^*(\phi)(\nabla^* \mathbf{u}^* + \nabla^* \mathbf{u}^{*T})] + \rho^*(\phi) \mathbf{g}^* + \mathbf{f}^*, \quad (3.57)$$

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0, \quad (3.58)$$

onde

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_o}; \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{U_o}; \quad t^* = \frac{t}{d_o/U_o}; \quad x^* = \frac{x}{d_o}; \quad p^* = \frac{p}{\rho_o U_o^2}; \quad (3.59)$$

$$\mu^* = \frac{\mu}{\mu_o}; \quad \mathbf{g}^* = \frac{\mathbf{g}}{U_o^2/d_o}; \quad \mathbf{f}^* = \frac{\mathbf{f}}{\sigma_o/d_o^2}. \quad (3.60)$$

As equações de estado, nas formas adimensionais, são dadas por

$$\sigma^* = \sigma_c^* [1 + \beta \ln(1 - \Gamma^*)], \quad (3.61)$$

$$\sigma^* = \sigma_c^* (1 - \beta \Gamma^*), \quad (3.62)$$

onde $\Gamma^* = \Gamma/\Gamma_\infty$.

A equação de concentração de surfactante, Eq. (3.55), na forma adimensional é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left(\Gamma^* \left| \frac{\partial \mathbf{X}^*}{\partial s^*} \right| \right) - \frac{\partial (\Gamma^* u_a^*)}{\partial s^*} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial s^*} \left(\frac{\partial \Gamma^*}{\partial s^*} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}^*}{\partial s^*} \right| \right), \quad (3.63)$$

onde $\mathbf{X}^* = \mathbf{X}/d_o$ e $s^* = s/d_o$.

3.5 Resumo do modelo matemático

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

$$\rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\phi)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho(\phi)\mathbf{g} + \mathbf{f}, \quad (3.64)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.65)$$

$$\rho(\phi) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)H(\phi), \quad (3.66)$$

$$\mu(\phi) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)H(\phi), \quad (3.67)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}) d\mathbf{X}, \quad (3.68)$$

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial s}(\sigma \mathbf{t}), \quad (3.69)$$

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial s} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t}, \quad (3.70)$$

$$u_a(\mathbf{X}, t) = -u_t(\mathbf{X}, t) + \int_0^s [\sigma_s \kappa u_n - \langle \sigma_s \kappa u_n \rangle] ds', \quad \text{para curvas fechadas}, \quad (3.71)$$

$$u_a(s, t) = \frac{s}{L_b} \int_0^{L_b} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s'} \cdot \mathbf{t}' ds' - \int_0^s \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s'} \cdot \mathbf{t}' ds', \quad \text{para curvas abertas,} \quad (3.72)$$

$$\sigma = \sigma_c + RT\Gamma_\infty \ln \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right), \quad (3.73)$$

$$\sigma = \sigma_c - RT\Gamma, \quad \text{para } \Gamma \ll \Gamma_\infty, \quad (3.74)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\Gamma \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) - \frac{\partial (\Gamma u_a)}{\partial s} = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right). \quad (3.75)$$

As Eqs. (3.64) - (3.75) fornecem uma formulação mista lagrangiana-euleriana para escoamentos com presença de interfaces. As Eq. (3.64) - (3.65) são as equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis, às quais se incorporam os efeitos da presença das interfaces móveis através do termo fonte. As Eq. (3.68) - (3.70) descrevem a interação entre as fases, contínua e dispersa. Observe que a função delta de Dirac permite definir um campo euleriano a partir de um campo lagrangiano e vice-versa. A Eq. (3.68) espalha as tensões superficiais da interface para o domínio euleriano, enquanto que a Eq. (3.70) interpola as velocidade do domínio euleriano para o lagrangiano. As Eqs. (3.68) e (3.70) são chamadas de espalhamento e interpolação, respectivamente. Por último, as Eqs. (3.73) - (3.74) são responsáveis por incorporar os efeitos do surfactante no escoamento e a Eq. (3.75) descreve a dinâmica da concentração de surfactante sobre a interface.

CAPÍTULO IV

METODOLOGIA NUMÉRICA

Este capítulo apresenta a discretização do modelo matemático adotado nos domínios euleriano e lagrangiano. As equações discretizadas correspondem às equações de Navier-Stokes, às equações de movimento da interface e à equação de transporte para a concentração de surfactante. As equações de Navier-Stokes são discretizadas numa malha euleriana enquanto que as equações para o movimento da interface e a equação de concentração de surfactante são discretizadas numa malha lagrangiana.

4.1 Discretização Temporal das Equações do fluido e da interface

A discretização temporal das equações de Navier-Stokes é realizada baseada no Método de Gear, na qual emprega-se uma discretização semi-implícita de segunda ordem, onde o termo difusivo é tratado implicitamente e o termo advectivo explicitamente (SBDF - *Semi Backward Difference Formula*).

Empregou-se uma aproximação linear para discretizar o termo viscoso com viscosidade variável como em Badalassi, Cenicerós e Banerjee (2003). Para ilustrar a ideia desta discretização, considera-se a equação de difusão

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\chi \nabla u), \quad (4.1)$$

onde $\chi > 0$. Esta equação pode ser rescrita como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \nabla^2 u + f(u), \quad (4.2)$$

onde $f(u) = \nabla \cdot (\chi \nabla u) - \lambda \nabla^2 u$ e λ é uma constante positiva, convenientemente escolhida. Para a discretização da Eq. (4.2), emprega-se o método de Gear de dois passos, de segunda ordem, no qual trata-se o primeiro termo do lado direito implicitamente e o segundo termo é explicitado. Permitindo-se uma variação de passos no tempo, o resultado para o esquema de dois passos pode ser escrito como

$$\frac{\alpha_2 u^{n+1} + \alpha_1 u^n + \alpha_0 u^{n-1}}{\Delta t} = \lambda \nabla^2 u^{n+1} + \beta_1 f^n + \beta_0 f^{n-1}, \quad (4.3)$$

onde $\alpha_0 = \Delta t^2 / (\Delta t_0 \Delta t_1)$, $\alpha_1 = -\Delta t_1 / \Delta t_0$, e $\alpha_2 = (\Delta t_0 + 2\Delta t) / \Delta t_1$, $\beta_0 = -\Delta t / \Delta t_0$ e $\beta_1 = \Delta t_1 / \Delta t_0$, com $\Delta t = t^{n+1} - t^n$, $\Delta t_0 = t^n - t^{n-1}$, e $\Delta t_1 = \Delta t_0 + \Delta t$. Observe que para passos de tempos fixos, os coeficientes assumem seus valores usuais, $\alpha_0 = 1/2$, $\alpha_1 = -2$, $\alpha_2 = 3/2$, e $\beta_0 = -1$, $\beta_1 = 2$. Para obter u^1 , a solução numérica para o tempo $t = t^1$, emprega-se o método de Euler, onde $\alpha_0 = 0$, $\alpha_1 = -1$, $\alpha_2 = 1$, e $\beta_0 = 0$, $\beta_1 = 1$. Baseado na experiência numérica, o parâmetro λ é escolhido como sendo $\lambda = 2 \|\chi\|_\infty$.

Aplicando estas idéias para as equação de momento e de continuidade tem-se,

$$\begin{aligned} \frac{\rho(\phi)^{n+1}}{\Delta t} (\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}) &= \lambda \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} + \beta_1 \mathbf{Z}^n \\ &+ \beta_0 \mathbf{Z}^{n-1} - \nabla p^{n+1} + \rho(\phi)^{n+1} \mathbf{g}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (4.5)$$

onde

$$\mathbf{Z} = -\lambda \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot [\mu(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad (4.6)$$

$$\lambda = 2 \|\mu(\phi)\|_\infty. \quad (4.7)$$

Para resolver o acoplamento pressão-velocidade, empregou-se um método de projeção, tais métodos são também conhecidos como método de passos fracionados. O método implemen-

tado por Villar (2007) e Ceniceros et al. (2010) e também empregado aqui é dado por

$$\begin{aligned} \frac{\rho(\phi)^n}{\Delta t} (\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}) &= \lambda \nabla^2 \mathbf{u}^* + \beta_1 \mathbf{Z}^n \\ &+ \beta_0 \mathbf{Z}^{n-1} - \nabla p^n + \rho(\phi)^n \mathbf{g}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{\nabla q}{\rho(\phi)^n}, \quad (4.9)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (4.10)$$

onde q representa a correção de pressão $q = p^{n+1} - p^n$. Uma vez que a velocidade estimada $\mathbf{u}^*$ é computada pela Eq. (4.8) impondo $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1}$ nas fronteiras, ela é projetada para o espaço dos campos vetoriais com divergente nulo. O passo de projeção requer a solução da equação de Poisson. Aplicando o operador divergente na Eq. (4.9), tem-se

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\alpha_2} \nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho(\phi)^n} \nabla q \right]. \quad (4.11)$$

Considerando a condição de incompressibilidade, Eq. (4.10), e substituindo na Eq. (4.11), obtém-se a equação para a correção da pressão dada por,

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho(\phi)^n} \nabla q \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (4.12)$$

Como em Villar (2007) e Ceniceros et al. (2010), as condições de contorno empregadas para as velocidades devem ser periódicas ou condições de contorno de Dirichlet e estas condições também são válidas para o campo de velocidades estimadas, ou seja,

$$\mathbf{u}^*|_{\delta\Omega} = \mathbf{u}|_{\delta\Omega}. \quad (4.13)$$

Se condições de contorno periódicas são usadas para as velocidades, o mesmo tipo de condição deve ser aplicada à pressão e, conseqüentemente, para o cálculo da correção de pressão. O fato de se utilizar condições de contorno de Dirichlet para $\mathbf{u}^*$ implica no uso de condições de contorno tipo Neumann homogêneo para a correção de pressão q . Isso porque a Eq. (4.9) é

válida para todo domínio Ω , logo, a equação abaixo também é verdadeira,

$$\mathbf{u}^*|_{\delta\Omega} = \mathbf{u}^{n+1}|_{\delta\Omega} + \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{\nabla q}{\rho(\phi)^n}|_{\delta\Omega}. \quad (4.14)$$

Substituindo a Eq. (4.13) na Eq. (4.14), tem-se

$$\nabla q|_{\delta\Omega} = 0, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial q}{\partial \mathbf{n}}|_{\delta\Omega} = 0, \quad (4.16)$$

onde $\mathbf{n}$ é o vetor unitário normal à fronteira do domínio.

Depois de resolvida a equação de Poisson, a nova velocidade é dada por,

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{\nabla q}{\rho(\phi)^n}. \quad (4.17)$$

O método dos passos fracionados pode ser resumido na seguinte seqüência de cálculos:

- Calcular as propriedades do fluido:

$$\rho^n = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)H(\phi)^n; \quad (4.18)$$

$$\mu^n = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)H(\phi)^n; \quad (4.19)$$

- Estimar o campo de velocidade

$$\begin{aligned} \frac{\rho(\phi)^n}{\Delta t} (\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}) &= \lambda \nabla^2 \mathbf{u}^* + \beta_1 \mathbf{Z}^n \\ &+ \beta_0 \mathbf{Z}^{n-1} - \nabla p^n + \rho(\phi)^n \mathbf{g}; \end{aligned} \quad (4.20)$$

- Calcular a correção de pressão:

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho(\phi)^n} \nabla q^n \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*; \quad (4.21)$$

- Corrigir o campo de velocidade,

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\alpha_2} \frac{\nabla q}{\rho(\phi)^n}, \quad (4.22)$$

- Atualizar o campo de pressão,

$$p^{n+1} = p^n + q. \quad (4.23)$$

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

Emprega-se aqui um método *multigrid* para resolver tanto o campo vetorial de velocidades estimadas, $\mathbf{u}^*$ na Eq. (4.8), como para o incremento de pressão q , computados pelas Eq. (4.9) e (4.10). Uma descrição detalhada sobre o método *multigrid* pode ser encontrada em Villar (2007).

Considere agora a equação para a evolução da interface,

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \mathbf{U}(s, t), \quad (4.24)$$

onde $\mathbf{U}$ é o vetor velocidade dos pontos lagrangianos,

$$\mathbf{U}(s, t) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t}, \quad (4.25)$$

em que u_a é a velocidade auxiliar e $\mathbf{t}$ é o vetor tangente unitário. Aplicando o Método de Gear e extrapolando na Eq. (4.24) o termo do lado direito, tem-se

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{X}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{X}^n + \alpha_0 \mathbf{X}^{n-1}}{\Delta t} = \beta_1 \mathbf{U}^n + \beta_0 \mathbf{U}^{n-1}. \quad (4.26)$$

Para completar o passo de tempo, atualiza-se a função indicadora $\phi^{n+1} = \phi(\mathbf{X}^{n+1})$ empregando um procedimento otimizado baseado em um algoritmo decorrente da Geometria Computacional (CENICEROS e ROMA, 2005).

4.2 Discretização do Domínio Euleriano

O domínio computacional considerado é um retângulo $[A_1, B_1] \times [A_2, B_2]$ e é discretizado, inicialmente, com uma malha regular com $M \times N$ células computacionais e espaçamentos $\Delta_x = \frac{B_1 - A_1}{M}$ e $\Delta_y = \frac{B_2 - A_2}{N}$ nas direções x e y , respectivamente.

Adotou-se células do esquema MAC (*Marker and Cell*), nele tem-se as variáveis escalares (e.g., pressão, divergente e propriedades físicas) definidas nos centros das células e as variáveis vetoriais (e.g., velocidade, termos forçantes, gradiente de pressão) tem suas componentes verticais definidas no meio das faces horizontais das células e as componentes horizontais definidas no meio das faces verticais das células, como mostra a Fig. 4.1.

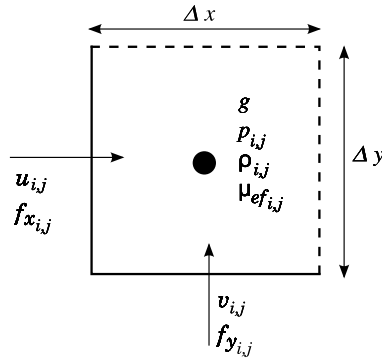


Figura 4.1 – Localização das variáveis da célula de MAC.

Os operadores diferenciais laplaciano, gradiente e divergente são discretizados empregando diferenças finitas centradas de segunda ordem como em Villar (2007) e Cenicerós et al. (2010).

4.2.1 Refinamento Local Adaptativo

A presença da interface entre os fluidos sobre a qual age uma força singular resulta em gradientes elevados localizados em sua vizinhança. Além disso, a tensão superficial pode induzir a produção de vórtices concentrados localizados e outros fenômenos de escala pequena cuja captura adequada, frequentemente, demanda enorme esforço computacional e torna proibitivo o uso de malhas de integração uniformes. Este problema pode ser contornado com o uso criterioso de técnicas de refinamento adaptativo da malha espacial.

Para este método, a discretização de um domínio físico na malha uniforme cartesiana é substituída por uma hierarquia de malhas devidamente agrupadas com espaçamentos sucessivamente mais finos. A malha lagrangiana no método adaptativo é livre para se mover pelo domínio físico não sendo necessário coincidir com a malha euleriana e é necessário que a malha adaptativa envolva completamente a interface. Na Figura 4.2 (a) tem-se o exemplo de uma malha composta onde se observa a hierarquia de malhas, para este caso a malha utilizada é de 32×48 células com 3 níveis de refinamento. Observe que a malha mais fina envolve toda a interface circular. Na Figura 4.2 (b) apresenta-se os perfis de malha para uma malha mais refinada, de 64×96 células com 5 níveis de refinamento.

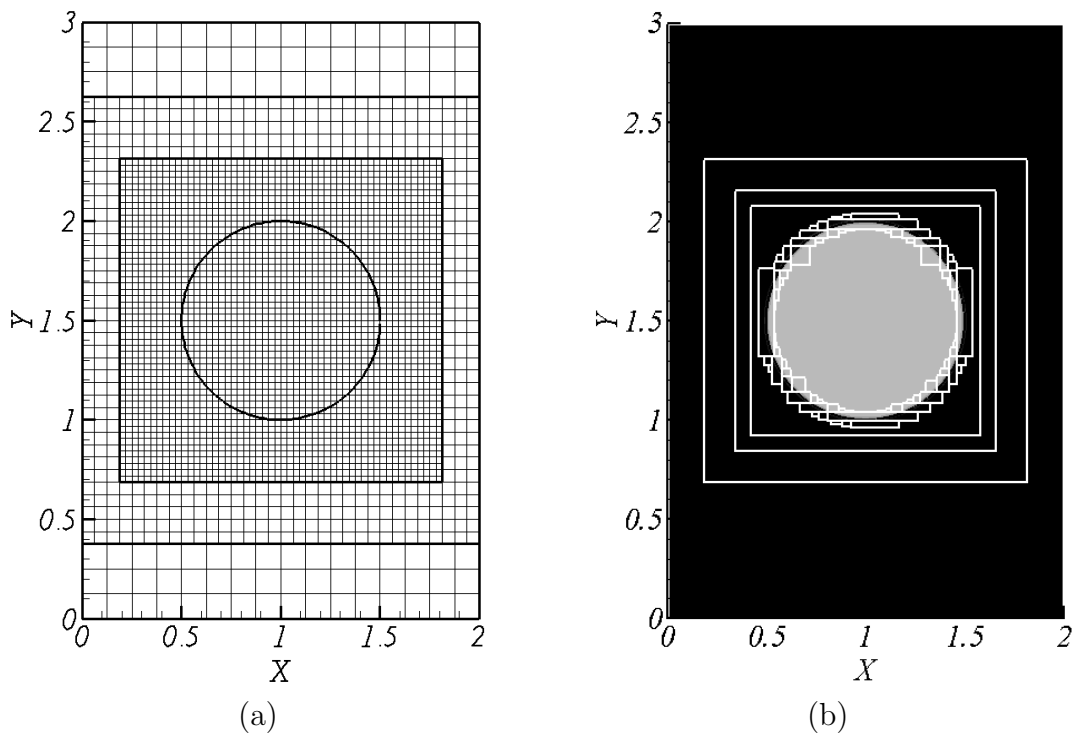


Figura 4.2 – Exemplo de uma malha composta com 3 níveis de refinamento (a) e perfis de malha para uma malha com 5 níveis de refinamento (b).

Dinamicamente, malhas mais finas são aplicadas na região de interesse, tendo como base uma malha grossa que cobre todo o domínio. Assim, a solução em cada malha pode então ser aproximada por diferenças finitas como feita em malha uniforme. Por se tratar de equações dependentes do tempo, as regiões de interesse variam com o tempo. Desta forma, as malhas precisam se adaptar ao longo do tempo à região de interesse. Como critérios de refinamento pode-se citar a presença da interface, turbulência, vorticidade, região de altas curvaturas, etc.

Na Fig. 4.3 tem-se um exemplo de uma bolha em ascensão e os contornos da malha adaptativa empregada, observe que o refinamento acompanha a posição da interface e, à medida que ela se deforma, o refinamento também acompanha a deformação.

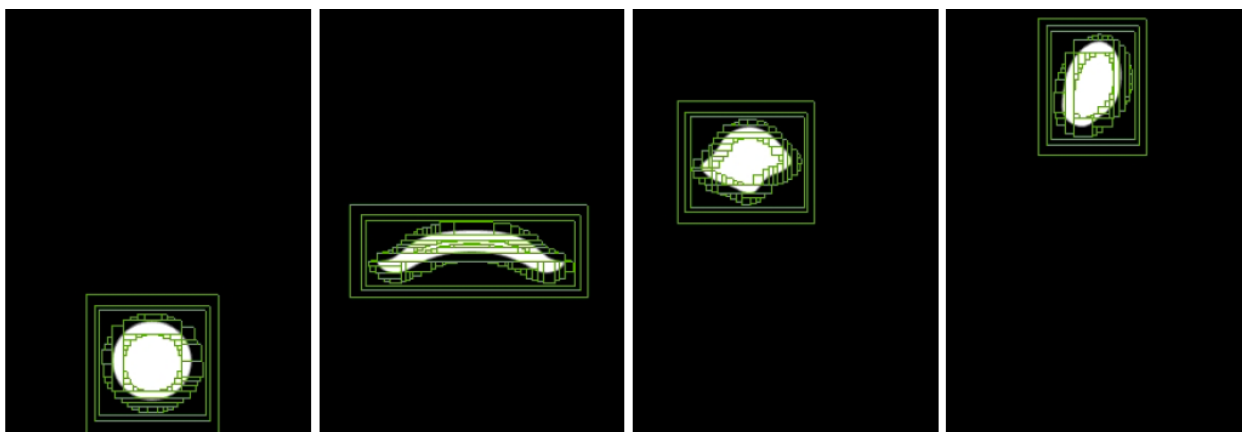


Figura 4.3 – Exemplo de malha adaptativa. Evolução da remalhagem ao longo do tempo (VILLAR, 2007).

A geração de malhas compostas depende primeiramente da determinação da coleção de células que formam a região onde o refinamento será aplicado. Aqui, marca-se uma vizinhança de todos os pontos da interface e a região que contém alta vorticidade. Uma vez que a região de refinamento foi escolhida, as malhas de cada nível são geradas empregando-se o algoritmo de agrupamento desenvolvido por Berger e Rigoustsos (1991). A remalhagem é executada sempre que regiões de alta vorticidade ou pontos da interface estão fora do nível mais fino. Mais detalhes sobre a geração de malhas compostas adaptativas podem ser encontrados em Berger e Collela (1989); Roma, Peskin e Berger (1999) e Villar (2007).

4.2.2 Função indicadora

Várias aproximações que requerem a posição da interface em um dado tempo tem sido propostas para atualizar as propriedades físicas, e.g. viscosidade e a massa específica. Embora inteligente e funcional em muitas situações, estas aproximações não são robustas ou computacionalmente eficientes o bastante para serem empregadas em escoamentos ou interfaces geométricas mais gerais. Unverdi e Tryggvason (1992) propõem uma função indicadora a qual é habilmente construída a partir de solução de uma equação de Poisson. Esta equação incorpora as

propriedades globais da interface e pode ser eficientemente resolvida para domínios retangulares. Entretanto, ela precisa ser resolvida em todo o domínio computacional e não considera o fato de que as propriedades físicas se alteram somente na vizinhança da interface. Outra desvantagem, é que este procedimento produz oscilações próximas à interface e imprecisões distantes dela.

Desde que a densidade e a viscosidade são constantes em cada fase e que o movimento da interface é limitada pela condição de CFL de forma que este movimento seja menor que o espaçamento da malha euleriana por passo no tempo, torna-se computacionalmente atraente atualizar estas quantidade somente na vizinhança da interface. A idéia básica é fazer uso de um algoritmo rápido de Geometria Computacional para computar a distância até a interface. Com esta aproximação as propriedades são atualizadas com precisão e o trabalho computacional para esta tarefa é confinado em uma banda fina ao redor da interface fluido-fluido. Por isso, o procedimento tem custo computacional otimizado e é de fácil implementação.

Para explicar esta aproximação, como em Ceniceros et al. (2010), considere a interface Σ representada por segmentos de reta, define-se ϕ como a função indicadora somente em T_γ , a qual é uma banda estreita centrada em Σ e de largura $2\gamma > 0$, como mostra a Fig. 4.4. Fora desta banda ϕ é continuamente definida para que tenha os valores de $\pm\gamma$, tal que

$$\phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\gamma, & \text{se } d(\mathbf{x}) < -\gamma, \\ d(\mathbf{x}), & \text{se } |d(\mathbf{x})| \leq \gamma, \\ \gamma, & \text{se } d(\mathbf{x}) > \gamma, \end{cases} \quad (4.27)$$

onde $d(\mathbf{x})$ é a distância euclidiana de um dado ponto $\mathbf{x}$ até a interface Σ , para o qual o sinal é escolhido de acordo com a direção da normal.

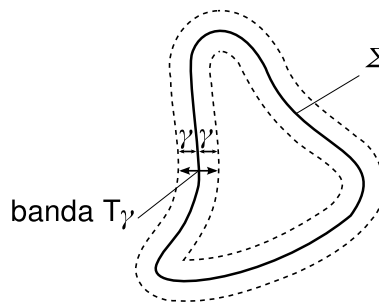


Figura 4.4 – Interface Σ com banda T_γ de largura 2γ .

Para manter ϕ como uma função da distância euclidiana local ao redor de Σ em qualquer tempo, emprega-se o algoritmo CPT (*Closest point Transform*). O CPT encontra o ponto mais próximo à Σ e determina a distância euclidiana à Σ para todo os pontos da malha euleriana dentro de uma distância especificada de Σ .

A função indicadora ϕ é atualizada a cada passo de tempo depois que a posição da interface é atualizada. Para $t = 0$, é necessário ter uma função indicadora que satisfaça a Eq. (4.27) de forma que somente uma correção local é necessária. Esta ϕ inicial pode ser obtida computando a distância euclidiana em $t = 0$ para todo ponto na malha euleriana e então é aplicado o corte. Enfatiza-se que este procedimento tem complexidade computacional linear de acordo com o números de pontos da interface e, desde que ela considere a completa extensão da interface para computar a distância euclidiana, ela trata corretamente situações quando se tem dois segmentos da interface muito próximos, como em uma fusão ou em casos de auto intersecção.

Finalmente, aponta-se os aspectos híbridos deste método: a função indicadora, computada eficientemente pelos pontos lagrangianos, é uma função contínua cuja curva de nível zero é dado pela interface. Detalhes destes cálculos, incluindo algoritmos e um procedimento eficiente para determinar se os pontos eulerianos pertencem ou à banda T_γ , podem ser encontrados em Ceniceros e Roma (2005).

4.3 Discretização do Domínio Lagrangiano

A discretização das equações que governam o movimento da interface é realizada sobre a malha lagrangiana. Os pontos discretizados são dispostos de maneira $s_k = k\Delta s, k = 1, \dots, M$ e os pontos lagrangianos $\mathbf{X}_k$ tal que $\mathbf{X}_k = \mathbf{X}_k(s_k) = (X_k, Y_k)$, ver Fig. 4.5. A malha lagrangiana é definida por n_l pontos, tal que n_l é dependente da malha euleriana,

$$\Delta s = \min \left(\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta y}{2} \right), \quad (4.28)$$

$$n_l = \frac{L_b}{\Delta s}, \quad \text{para curvas fechadas}, \quad (4.29)$$

$$n_l - 1 = \frac{L_b}{\Delta s}, \quad \text{para curvas abertas,} \quad (4.30)$$

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

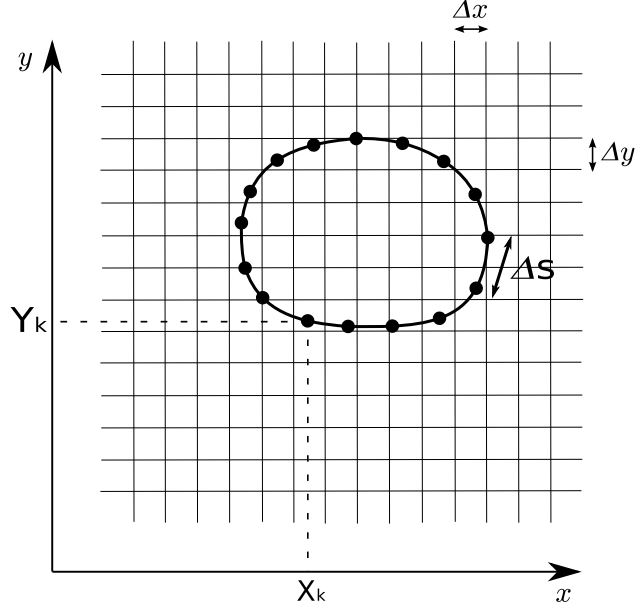


Figura 4.5 – Representação esquemática da malha lagrangiana.

Por se empregar aqui refinamento localizado adaptativo, é importante lembrar que todas as equações da interface são resolvidas no nível de refinamento mais fino e os valores da densidade de força lagrangiana, após serem calculados, são interpolados por funções de interpolações lineares para os níveis inferiores.

As propriedades geométricas da interface, tais como, o vetor tangente unitário ($\mathbf{t}$), o vetor normal unitário ($\mathbf{n}$) e a curvatura (κ) são discretizadas via método de diferenças finitas centradas. Assim, tem-se

$$\mathbf{t} = \frac{\partial \mathbf{X}_k}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}_k}{\partial s} \right|, \quad (4.31)$$

$$(t_x)_k = \frac{X_{k+1} - X_{k-1}}{\sqrt{(X_{k+1} - X_{k-1})^2 + (Y_{k+1} - Y_{k-1})^2}}, \quad (4.32)$$

$$(t_y)_k = \frac{Y_{k+1} - Y_{k-1}}{\sqrt{(X_{k+1} - X_{k-1})^2 + (Y_{k+1} - Y_{k-1})^2}}, \quad (4.33)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \right|, \quad (4.34)$$

$$(n_x)_k = \frac{(t_x)_{k+1} - (t_x)_{k-1}}{\sqrt{((t_x)_{k+1} - (t_x)_{k-1})^2 + ((t_y)_{k+1} - (t_y)_{k-1})^2}}, \quad (4.35)$$

$$(n_y)_k = \frac{(t_y)_{k+1} - (t_y)_{k-1}}{\sqrt{((t_x)_{k+1} - (t_x)_{k-1})^2 + ((t_y)_{k+1} - (t_y)_{k-1})^2}}, \quad (4.36)$$

$$\kappa = \left| \frac{\partial \mathbf{t}}{\partial s} \right| / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|, \quad (4.37)$$

$$\kappa_k = \frac{\sqrt{(n_x)_k^2 + (n_y)_k^2}}{\sqrt{(t_x)_k^2 + (t_y)_k^2}}, \quad (4.38)$$

Em alguns casos, adota-se o cálculo do vetor tangente sobre os pontos $s_{k+1/2} = (k + 1/2)\Delta s$, desta forma, tem-se

$$(t_x)_{k+1/2} = \frac{X_{k+1} - X_k}{\sqrt{(X_{k+1} - X_k)^2 + (Y_{k+1} - Y_k)^2}}, \quad (4.39)$$

$$(t_y)_{k+1/2} = \frac{Y_{k+1} - Y_k}{\sqrt{(X_{k+1} - X_k)^2 + (Y_{k+1} - Y_k)^2}}. \quad (4.40)$$

Falta agora apresentar a discretização para o cálculo da força de tensão interfacial. Tal força,

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial s}(\sigma \mathbf{t}), \quad (4.41)$$

para cada ponto $\mathbf{X}_k$ é avaliada como,

$$(F_x)_k = \frac{\sigma_{k+1}(t_x)_{k+1} - \sigma_{k-1}(t_x)_{k-1}}{2\Delta s}, \quad (4.42)$$

$$(F_y)_k = \frac{\sigma_{k+1}(t_y)_{k+1} - \sigma_{k-1}(t_y)_{k-1}}{2\Delta s}. \quad (4.43)$$

4.3.1 Discretização das Equações para a Velocidade Auxiliar u_a

Para interfaces representadas por curvas fechadas, a equação para a velocidade auxiliar é dada por

$$u_a(\mathbf{X}, t) = -U_t(\mathbf{X}, t) + \int_0^s [\sigma_s \kappa U_n - \langle \sigma_s \kappa U_n \rangle] ds', \quad (4.44)$$

onde $U_t = \mathbf{U} \cdot \mathbf{t}$, $U_n = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}$, $\sigma_s = \sqrt{X^2(s, t) + Y^2(s, t)}$, κ é a curvatura da interface, $\mathbf{n}$ é o vetor normal a interface, $\mathbf{t}$ é o vetor tangente unitário e o operador $\langle \rangle$ define uma média espacial.

Discretizando cada termo desta equação tem-se

$$(U_t)_k = U_k \cdot (t_x)_k + V_k \cdot (t_y)_k, \quad (4.45)$$

$$(\sigma_s \kappa U_n)_k = \sqrt{X_k^2 + Y_k^2} \cdot \kappa_k \cdot (U_k \cdot (n_x)_k + V_k \cdot (n_y)_k), \quad (4.46)$$

onde $(t_x)_k$, $(t_y)_k$, $(n_x)_k$ e $(n_y)_k$ são calculados segundo as expressões (4.32), (4.33), (4.35) e (4.36), respectivamente.

O operador $\langle \rangle$ foi calculado fazendo-se a média sobre todos os pontos lagrangianos

$$\langle \sigma_s \kappa U_n \rangle = \frac{1}{n_l} \sum_{k=1}^{n_l} \sqrt{X_k^2 + Y_k^2} \cdot \kappa_k \cdot (U_k \cdot (n_x)_k + V_k \cdot (n_y)_k), \quad (4.47)$$

lembrando que n_l é o total de pontos lagrangianos.

A equação da velocidade auxiliar para interfaces representadas por uma curva aberta é dada por

$$u_a(s, t) = \frac{s}{L_b} \int_0^{L_b} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s'} \cdot \mathbf{t}' ds' - \int_0^s \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s'} \cdot \mathbf{t}' ds', \quad (4.48)$$

onde s é discretizado para cada ponto k como $s_k = (k - 1)\Delta s$ e L_b é avaliado como sendo $L_b = (n_l - 1)\Delta s$. O termo $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s'} \cdot \mathbf{t}'$ é discretizado como

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \cdot \mathbf{t} = \frac{(U_{k+1} - U_k) \cdot (t_x)_k + (V_{k+1} - V_k) \cdot (t_y)_k}{\Delta s}, \quad \text{para } k = 1, \quad (4.49)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \cdot \mathbf{t} = \frac{(U_{k+1} - U_{k-1}) \cdot (t_x)_k + (V_{k+1} - V_{k-1}) \cdot (t_y)_k}{2\Delta s}, \quad \text{para } k = 2, 3, \dots, n_l - 1, \quad (4.50)$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \cdot \mathbf{t} = \frac{(U_{k-1} - U_k) \cdot (t_x)_k + (V_{k-1} - V_k) \cdot (t_y)_k}{\Delta s}, \quad \text{para } k = n_l. \quad (4.51)$$

Observe que para os pontos lagrangianos internos ($k = 2, 3, \dots, n_l - 1$), emprega-se uma aproximação de segunda ordem enquanto que para os pontos $k = 1$ e $k = n_l$ a derivada é aproximada por um esquema de primeira ordem, isso é feito para evitar o uso de valores de velocidade lagrangiana dos pontos fantasmas.

As integrais que aparecem nas Eqs. (4.44) e (4.48) são calculadas pela Regra do Trapézio.

4.4 Discretização da Equação de Concentração de Surfactante

A equação de concentração de surfactante é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\Gamma \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) - \frac{\partial (\Gamma u_a)}{\partial s} = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right). \quad (4.52)$$

Para facilitar a discretização, define-se a *taxa de alongamento* S_x como,

$$S_x = \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|. \quad (4.53)$$

Reescrevendo a Eq. (4.52) com a taxa de alongamento S_x tem-se,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Gamma S_x) = \frac{\partial (\Gamma u_a)}{\partial s} + D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{S_x} \frac{\partial \Gamma}{\partial s} \right). \quad (4.54)$$

Num primeiro momento, para comparar os resultados gerados com os do Lai, Tseng e Huang (2008), empregou-se o esquema Crank-Nicolson para a discretização temporal. Assim, a Eq. (4.54) discretizada fica da forma,

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma^{n+1} S_x^{n+1} - \Gamma^n S_x^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial s} (\Gamma u_a)^{n+1} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial s} (\Gamma u_a)^n \\ &+ \frac{1}{2} D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{S_x^{n+1}} \frac{\partial \Gamma^{n+1}}{\partial s} \right) + \frac{1}{2} D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{S_x^n} \frac{\partial \Gamma^n}{\partial s} \right). \end{aligned} \quad (4.55)$$

Em alguns testes o esquema SBDF é empregado. Assim, a equação de concentração,

Eq. (4.54), é discretizada usando este esquema, tal que

$$\frac{\alpha_2(\Gamma^{n+1}S_x^{n+1}) + \alpha_1(\Gamma^n S_x^n) + \alpha_0(\Gamma^{n-1}S_x^{n-1})}{\Delta t} - D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{S_x^{n+1}} \frac{\partial}{\partial s} \Gamma^{n+1} \right) = \frac{\partial}{\partial s} (\Gamma u_a)^n, \quad (4.56)$$

onde os coeficiente α_2 , α_1 e α_0 são os mesmos usados para a discretização das equação de Navier-Stokes.

A concentração de surfactante Γ_k é definida entre os pontos lagrangianos, nos pontos $s_{k+1/2} = (k + 1/2)\Delta s$. Como para outras discretizações nesta dissertação, emprega-se o esquema de diferenças finitas de segunda ordem para as discretizações espaciais. Assim, o fator de alongamento, Eq. (4.53), é discretizado como

$$(S_x)_{k+1/2} = \sqrt{\left(\frac{X_{k+1} - X_k}{\Delta s}\right)^2 + \left(\frac{Y_{k+1} - Y_k}{\Delta s}\right)^2}, \quad (4.57)$$

onde Δs é dado pela Eq. (4.28).

Segue abaixo cada termo da equação (4.54) discretizado no espaço.

- Termo temporal:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Gamma S_x) \approx \frac{\Gamma_{k+1/2}^{n+1}(S_x)_{k+1/2}^{n+1} - \Gamma_{k+1/2}^n (S_x)_{k+1/2}^n}{\Delta t}. \quad (4.58)$$

- Termo relativo a velocidade auxiliar:

$$\frac{\partial (\Gamma u_a)}{\partial s} \approx \frac{1}{2} \frac{(\Gamma_{k+3/2} + \Gamma_{k+1/2})u_{ak+1} - (\Gamma_{k+1/2} + \Gamma_{k-1/2})u_{ak}}{\Delta s}. \quad (4.59)$$

- Termo difusivo:

$$D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{S_x} \frac{\partial \Gamma}{\partial s} \right) \approx D_s \frac{1}{2\Delta s} \left(\frac{(\Gamma_{k+3/2} - \Gamma_{k+1/2})/\Delta s}{((S_x)_{k+3/2} + (S_x)_{k+1/2})/2} - \frac{(\Gamma_{k+1/2} - \Gamma_{k-1/2})/\Delta s}{((S_x)_{k+1/2} + (S_x)_{k-1/2})/2} \right). \quad (4.60)$$

Lembrando-se que Γ representa massa de surfactante por unidade de comprimento, para se ter a massa de cada ponto basta multiplicar pela distância entre os pontos. Assim,

verifica-se a conservação da massa total de surfactante de cada tempo com relação ao instante inicial como

$$\Delta m = \sum_k \Gamma_{k+1/2}^n \sqrt{(X_{k+1}^n - X_k^n)^2 + (Y_{k+1}^n - Y_k^n)^2} - \sum_k \Gamma_{k+1/2}^0 \sqrt{(X_{k+1}^0 - X_k^0)^2 + (Y_{k+1}^0 - Y_k^0)^2}. \quad (4.61)$$

Falta ainda discretizar a equação de estado, é esta que relaciona a concentração de surfactante com a tensão superficial. Reescrevendo esta equação,

$$\sigma = \sigma_c + RT\Gamma_\infty \ln \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right), \quad (4.62)$$

onde σ_c é a tensão superficial da interface limpa ($\Gamma = 0$), R é a constante ideal dos gases, T é a temperatura absoluta e Γ_∞ é a concentração de empacotamento máximo. Discretizando esta equação tem-se

$$\sigma_k = \sigma_c + RT\Gamma_\infty \ln \left(1 - \frac{\Gamma_{k+1/2} + \Gamma_{k-1/2}}{2\Gamma_\infty} \right), \quad (4.63)$$

Para o caso onde se tem $\Gamma \ll \Gamma_\infty$ então a aproximação linear pode ser usada:

$$\sigma = \sigma_c - RT\Gamma, \quad (4.64)$$

Da mesma forma, para o ponto $\mathbf{X}_k$ tem-se

$$\sigma_k = \sigma_c - RT \left(\frac{\Gamma_{k+1/2} + \Gamma_{k-1/2}}{2} \right). \quad (4.65)$$

As equações discretizadas (4.63) e (4.65) são válidas para todos os pontos lagrangianos ($k = 1, \dots, n_l$). Observe que é necessário então encontrar os valores de concentração de surfactante para os pontos $k = -1/2$ e $k = n_l + 1/2$. Para tal, utiliza-se a condição de derivada nula, assim tem-se

$$\Gamma_{k=-1/2} = \Gamma_{k=1/2}, \quad (4.66)$$

$$\Gamma_{k=n_l+1/2} = \Gamma_{k=n_l-1/2}. \quad (4.67)$$

4.5 Resumo dos passos da solução numérica

Os passos da resolução numérica para os testes onde se tem presença de surfactante podem ser resumidos como:

1. Partindo de uma concentração de surfactante inicial (Γ_0), calcula-se a tensão superficial:

$$\sigma = \sigma_c + RT \Gamma_\infty \ln \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_\infty} \right), \quad (4.68)$$

$$\sigma = \sigma_c - RT\Gamma, \quad \text{para } \Gamma \ll \Gamma_\infty; \quad (4.69)$$

2. Calcula-se a tangente unitária na interface:

$$\mathbf{t} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right|; \quad (4.70)$$

3. Calcula-se a força na interface:

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial s}(\sigma \mathbf{t}); \quad (4.71)$$

4. Resolve-se as equações de Navier-Stokes:

$$\rho(\phi) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\phi)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho(\phi)\mathbf{g} + \mathbf{f}; \quad (4.72)$$

5. Encontra-se as novas posições para os pontos lagrangianos do tempo $n + 1$:

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial s} = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds + u_a(\mathbf{X}, t) \mathbf{t}; \quad (4.73)$$

6. Resolve-se a equação de concentração de surfactante e encontra-se a distribuição de Γ para o tempo $n + 1$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\Gamma \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) - \frac{\partial (\Gamma u_a)}{\partial s} = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right). \quad (4.74)$$

Como os novos pontos lagrangianos $\mathbf{X}_k^{n+1}$ já foram calculados em passos anteriores, as Eqs. (4.55) e (4.56) resultam em um sistema linear tridimensional simétrico. Este sistema

linear é resolvido pelo algoritmo de Thomas (TDMA) modificado (CHAPRA e CANALE, 1988).

CAPÍTULO V

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, são apresentados os resultados de validação do código numérico e das implementações feitas, bem como as simulações realizadas visando um estudo comparativo entre interfaces limpas e contaminadas de surfactantes. As simulações foram feitas no código AMR2D, desenvolvido para estudos de escoamentos bifásicos bidimensionais, empregando-se malhas adaptativas bloco-estruturadas, refinadas localmente, aplicadas à simulação de escoamentos incompressíveis transientes. As soluções foram obtidas com o método *Front-Tracking* e as equações foram discretizadas utilizando o método de diferenças finitas.

A verificação do código AMR2D foi feita empregando soluções manufaturas para a solução das equações de Navier-Stokes (VILLAR, 2007 e CENICEROS et al., 2010) e, no presente trabalho, apresenta-se a etapa de validação deste código, bem como as etapas de verificação e validação para as as novas implementações incorporadas, isto é, a modelagem com a presença de surfactante insolúvel.

Na primeira seção, tem-se a validação do código numérico AMR2D por intermédio do cálculo do coeficiente de arrasto para bolhas bidimensionais e comparação com solução analítica. Na segunda seção, têm-se a verificação das implementações feitas para a modelagem de escoamentos com a presença de surfactantes insolúveis por intermédio de soluções manufaturas e também a validação, onde se comparam os resultados de uma bolha imersa em um escoamento cisalhante com resultados de outros autores. Na terceira seção, tem-se a verificação da existência e o efeito da força de Marangoni. Na Seção 5.4, tem-se o estudo da interação de duas bolhas

imersas em um escoamento cisalhante. Finalmente, na Seção 5.5, tem-se um estudo sobre linhas dinâmicas de contato.

5.1 Validação do código numérico

A verificação e validação de um código computacional é uma etapa de grande importância para a credibilidade e futuras aplicações dos resultados encontrados numericamente. Os escoamentos bifásicos bidimensionais reais são difíceis de serem realizados experimentalmente e muito pouco se encontra na literatura sobre eles. Em função disto, a validação dos resultados numéricos empregando-se resultados experimentais se torna uma tarefa complicada.

A seguir, uma nova forma de validação é apresentada, empregando-se uma proposta do Professor Clodoaldo Grotta Ragazzo, do Instituto de Matemática e Estatística - IME - USP. A proposta consiste em validar o código por intermédio de comparações do coeficiente de arrasto de uma bolha em ascensão de forma numérica e analítica. Para tal, uma expressão para o coeficiente de arrasto para bolhas bidimensionais, sob certas condições hipotéticas, foi obtida usando-se cálculos analíticos (veja APÊNDICE I).

Considerando uma bolha bidimensional em ascensão, uma camada limite de pequena espessura e com interface circular indeformável, que percorre uma trajetória retilínea, o coeficiente de arrasto é dado, aproximadamente, por

$$C_D = \frac{16\pi}{Re}, \quad (5.1)$$

onde Re corresponde ao número de Reynolds dado por $Re = \rho D V_{b_y} / \mu$, sendo D o diâmetro e V_{b_y} a velocidade da bolha em regime permanente. Para mais detalhes veja APÊNDICE I.

Uma camada limite de pequena espessura é conseguida quando se tem escoamentos a alto número de Reynolds e os parâmetros para os testes numéricos aqui realizados foram escolhidos empregando-se o diagrama geométrico de bolhas (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978), onde buscou-se pelo regime esférico. Neste regime, a interface permanece circular ao longo de todo o tempo e a trajetória se mantém retilínea. Vários testes foram feitos obtendo-se escoamentos a diferentes números de Reynolds afim de se encontrar um regime em que o valor do coeficiente de arrasto

numérico se aproxime do valor analítico.

Os parâmetros de cálculo escolhidos para se ter um escoamento a alto número de Reynolds e com o intuito de que a bolha mantenha sua geometria inalterada, ou que se deforme o mínimo possível, foram: massa específica da fase contínua $\rho_c = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\rho_d/\rho_c = 0,05$, onde ρ_d corresponde a massa específica da fase dispersa, $\mu_d/\mu_c = 1,8 \cdot 10^{-2}$, onde μ_d corresponde a viscosidade da fase dispersa, o diâmetro da bolha é $D = 0,08 \text{ cm}$, a tensão superficial é $\sigma = 0,073 \text{ N/m}$, a aceleração gravitacional adotada é 10 m/s^2 e variou-se a viscosidade da fase contínua para se obter diferentes números de Reynolds. Os valores utilizados para esta propriedade foram $\mu_c = 1,2 \cdot 10^{-3}$, $\mu_c = 1,0 \cdot 10^{-3}$, $\mu_c = 0,9 \cdot 10^{-3}$, $\mu_c = 0,85 \cdot 10^{-3}$, $\mu_c = 0,8 \cdot 10^{-3}$, $\mu_c = 0,75 \cdot 10^{-3}$ e $\mu_c = 0,7 \cdot 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{s/m}^2$ para os números de Reynolds 105, 139, 162, 175, 191, 201 e 216, respectivamente. Para o cálculo do número de Reynolds, a massa específica e a viscosidade empregadas correspondem aos da fase contínua. Para estas simulações, considerou-se a interface como uma curva fechada e, por isso, a equação de equidistribuição empregada foi a Eq. (3.19).

No instante inicial, considerou-se a bolha posicionada na parte inferior do domínio e ambos os fluidos, fase contínua e dispersa, foram considerados em repouso. Na Figura 5.1, tem-se a configuração do experimento. Em ambas as direções, empregaram-se condições de contorno periódicas. Também foram feitos testes para verificar a influência do tamanho do domínio nos resultados e concluiu-se que a configuração empregada para os casos estudados não apresentou influência sobre os resultados.

Para a escolha da malha, preocupou-se com a espessura da camada limite. Segundo Chorin e Marsden (2000), a espessura da camada limite é da ordem de $\frac{1}{\sqrt{Re}}$. Fazendo este cálculo, para o caso do maior Re aqui estudado, tem-se $\frac{1}{\sqrt{216}} = 0,068$ e para uma malha base escolhida de 32×96 contendo 5 níveis de refinamento e o domínio empregado de $\Omega = [0; 0,008] \times [0; 0,024] \text{ m}$, tem-se $\Delta x = 2,4 \cdot 10^{-4}$, satisfazendo, portanto, a condição de se ter pelo menos 4 células na espessura da camada limite.

A Equação (5.1) foi empregada para os cálculos do coeficiente de arrasto de forma analítica e o número de Reynolds foi calculado com Vb_y correspondendo à componente y da velocidade do centro de massa da bolha em regime permanente. Observe que para uma bolha percorrendo uma trajetória retilínea tem-se $Vb_x = 0$. O vetor velocidade do centro de massa da

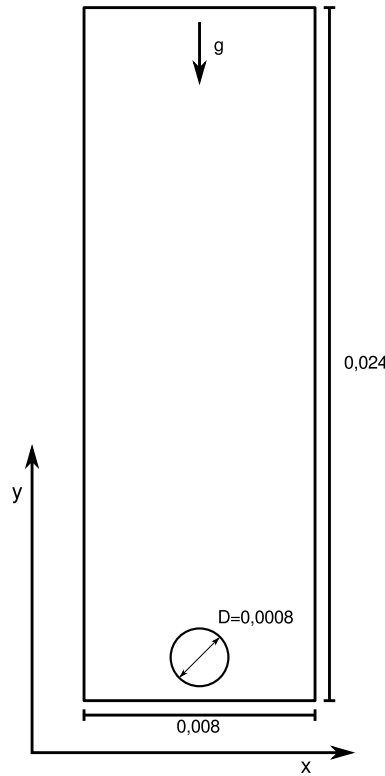


Figura 5.1 – Configuração geométrica para as simulações de bolhas em ascensão, visando no cálculo de coeficiente de arrasto. Dimensões [m].

bolha ($\mathbf{Vb}$) foi calculada de acordo com a Eq. (5.2) (BUNNER; TRYGGVASON, 2002),

$$\mathbf{Vb} = \frac{1}{A} \oint \mathbf{X}(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) ds, \quad (5.2)$$

onde $\mathbf{X}$ é o vetor posição dos pontos lagrangianos, $\mathbf{U}$ corresponde à velocidade da bolha nos pontos lagrangianos, $\mathbf{n}$ corresponde ao vetor unitário normal à bolha e A é a área da bolha, calculada segundo

$$A = \frac{1}{2} \oint \mathbf{X} \cdot \mathbf{n} ds. \quad (5.3)$$

Desenvolvendo a Eq. (5.2) para a direção y , tem-se

$$Vb_y = \frac{1}{A} \oint Y(U_x n_x + U_y n_y) ds, \quad (5.4)$$

onde a área da bolha é dada por

$$A = \frac{1}{2} \oint (X n_x + Y n_y) ds. \quad (5.5)$$

O coeficiente de arrasto é definido como (BATCHELOR, 1970)

$$C_D = \frac{f_D}{\rho V b_y^2 D/2}, \quad (5.6)$$

onde f_D corresponde à intensidade de força de arrasto.

A intensidade de força de arrasto pode ser calculada pelo tensor deformação (veja APÊNDICE I),

$$f_D = \frac{2\mu}{V b_y} \int_{\mathbb{R}^2} \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 dx, \quad (5.7)$$

onde $\mathbb{R}^2$ corresponde à região externa à bolha ($\mathbb{R}^2 = \Omega - R$), como mostra Fig. 5.2, R é a região ocupada por um corpo imerso e o termo $\|\text{Def } \mathbf{u}\|^2$ corresponde à

$$\|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2, \quad (5.8)$$

onde $\text{Def } \mathbf{u}$ é o tensor taxa de deformação.

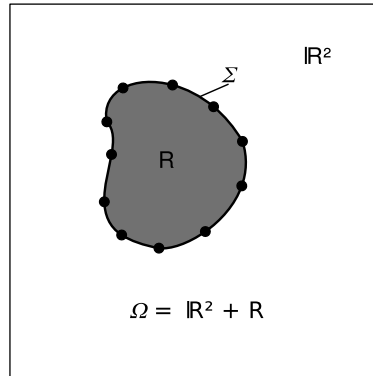


Figura 5.2 – Representação esquemática de uma interface Σ imersa no domínio Ω .

O coeficiente de arrasto C_D , calculado com a força de arrasto da Eq. (5.7), será denominado aqui de $C_{D(def)}$. Note que, nesta formulação, o tensor deformação é avaliado diretamente na malha euleriana, sem a necessidade de qualquer interpolação, recorrendo-se apenas a discretização centrada de segunda ordem para a avaliação do tensor deformação.

A intensidade de força de arrasto pode também ser calculada pela soma das forças de pressão (f_p) e viscosas (f_ν) atuantes na superfície da bolha,

$$f_D = f_p + f_\nu = - \int_{\Sigma} p \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{n} d\Sigma + \int_{\Sigma} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{e}_y d\Sigma, \quad (5.9)$$

onde p é a pressão nos pontos lagrangianos, $\mathbf{e}_y$ é o vetor unitário da direção y , $\mathbf{n}$ é o vetor normal unitário, τ é tensor das tensões viscosas dado por $\tau = \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ e Σ representa a interface.

A parcela da intensidade de força de arrasto devida a pressão (f_p) pode ser reescrita como

$$f_p = - \int_{\Sigma} p n_y d\Sigma. \quad (5.10)$$

Observa-se que é necessário que a pressão, uma variável calculada na malha euleriana, seja interpolada para os pontos lagrangianos. Para tal, empregou-se o mesmo tipo de interpolação com o delta de Dirac usado para velocidade e distribuição de força, Eq. (3.70) e (3.68), e a pressão foi interpolada para dois pontos distantes Δx e $2\Delta x$ da superfície da bolha (pontos 1 e 2), como mostra a Fig. 5.3. Escolheu-se dois pontos para a interpolação afim de se avaliar em qual ponto o valor do coeficiente de arrasto se aproxima mais do valor analítico. A função delta de Dirac é dada por $\delta_h(\mathbf{x}) = d_h(x) d_h(y)$ com

$$d_h(\xi) = \begin{cases} 0,5 [1 + \cos(\frac{\pi}{h} \xi)]/h & \text{se } |\xi| \leq h, \\ 0 & \text{se } |\xi| > h, \end{cases} \quad (5.11)$$

onde h é um parâmetro numérico dependente das dimensões da malha euleriana Δx e Δy . Para os cálculos aqui apresentados $h = 2\Delta x$ e, por simplicidade, $\Delta x = \Delta y$.

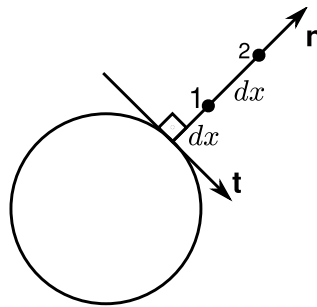


Figura 5.3 – Posição dos pontos para a interpolação da pressão para o cálculo do coeficiente de arrasto.

A interpolação para cada ponto foi feita de duas formas: (i) utilizando pontos externos e internos à bolha, e (ii) utilizando apenas pontos externos à bolha. Para ambos os casos, a pressão é interpolada para os pontos 1 e 2 e, posteriormente, faz-se uma média dos valores da pressão obtidos nestes pontos. A restrição de se utilizar somente os pontos externos é feita por intermédio do uso da função indicadora, a qual é usada para anular o campo de pressão

interno à interface. Uma reponderação é necessária na função delta de Dirac, já que agora só os pontos externos são utilizados. Assim, se a célula a ser considerada no processo de interpolação encontra-se no interior da interface, adota-se valor de $d_h(\xi) = 0$. A reponderação faz necessária devido ao fato que ao considerar $d_h(\xi) = 0$, a somatória dos pesos não é mais unitária. Logo, o valor interpolado para o ponto k em questão deve ser dividido pela soma dos novos pesos. A opção de fazer estas interpolações para pontos próximos à interface, e não sobre ela, é com o intuito que os resultados sofram o mínimo possível de influência dos valores da pressão internos à bolha.

Voltando à Eq. (5.9), desenvolvendo-se o termo f_ν tem-se

$$f_\nu = \int_{\Sigma} (\tau_{xx}n_x + \tau_{yx}n_y)d\Sigma, \quad (5.12)$$

onde,

$$\tau_{xx} = 2 \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (5.13)$$

$$\tau_{yx} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (5.14)$$

Para o cálculo desta integral, os termos τ_{xx} e τ_{yx} foram calculados no domínio euleriano e também interpolados para os pontos lagrangianos através da função delta de Dirac.

Nos resultados mostrados a seguir, empregam-se as seguintes notações:

Cd_{ie_1} : corresponde ao coeficiente de arrasto calculado a partir da pressão interpolada para o ponto 1, considerando pontos internos e externos à bolha;

Cd_{ie_2} : corresponde ao coeficiente de arrasto calculado a partir da pressão interpolada para o ponto 2, considerando pontos internos e externos à bolha;

Cd_{ie_medio} : corresponde ao coeficiente de arrasto calculado a partir da média das pressões interpoladas para os pontos 1 e 2, considerando pontos internos e externos à bolha;

Cd_{e_1} : corresponde ao coeficiente de arrasto calculado a partir da pressão interpolada para o ponto 1, considerando somente pontos externos à bolha;

Cd_{e_2} : corresponde ao coeficiente de arrasto calculado a partir da pressão interpolada para o ponto 2, considerando somente pontos externos à bolha;

Cd_{e_medio} : corresponde ao coeficiente de arrasto calculado a partir da média das pressões

interpoladas para os pontos 1 e 2, considerando somente pontos externos a bolha e

Cd_{def} : coeficiente de arrasto calculado empregando-se o tensor deformação.

Desta forma, procura-se verificar qual ponto deve ser escolhido (ponto 1, 2 ou média), qual a influência de cada termo no coeficiente de arrasto total, se a pressão interna interfere na avaliação do coeficiente de arrasto e se os escoamentos encontrados se comportam de acordo com as condições consideradas na dedução da equação de coeficiente de arrasto para bolhas bidimensionais.

Os resultados para os testes realizados estão apresentados nas Tab. 5.1 à 5.7. Nelas têm-se, na segunda coluna, o coeficiente de arrasto total (C_D), na terceira coluna a porcentagem de C_D devido as forças viscosas, na quarta coluna a porcentagem de C_D devido as forças de pressão e por último, na quinta coluna, a diferença do C_D encontrado e o C_D analítico.

Observa-se que para os números de Reynolds $Re = 105$ e $Re = 139$ o coeficiente de arrasto devido à forças viscosas representa menos que 1% do total de C_D . Nos casos para $Re = 161$, $Re = 175$, $Re = 191$ e $Re = 201$ essa porcentagem chega a 2,4% e para o último caso $Re = 216$ a porcentagem é de 5,4%.

Tabela 5.1 – Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 105$.

$Re = 105$	C_D	% forças viscosas	% forças de pressão	Diferença com $Cd_{analitico}$ (%)
$Cd_{analitico}$	0,47987	-	-	-
Cd_{ie_medio}	0,33446	0,38	99,62	30,3
Cd_{ie1}	0,31227	0,41	99,59	34,93
Cd_{ie2}	0,35665	0,36	99,64	25,68
Cd_{e_medio}	0,33508	0,38	99,62	30,17
Cd_{e1}	0,31345	0,41	99,59	34,68
Cd_{e2}	0,35671	0,35	99,65	25,67
Cd_{def}	0,42681	-	-	11,06

Tabela 5.2 – Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 139$.

$Re = 139$	C_D	% forças viscosas	% forças de pressão	Diferença com $Cd_{analitico}$ (%)
$Cd_{analitico}$	0,36271	-	-	-
Cd_{ie_medio}	0,29075	0,82	99,18	19,84
Cd_{ie1}	0,26690	0,89	99,11	26,41
Cd_{ie2}	0,31459	0,75	99,25	13,26
Cd_{e_medio}	0,29185	0,81	99,19	19,54
Cd_{e1}	0,26903	0,88	99,12	25,83
Cd_{e2}	0,31466	0,75	99,25	13,25
Cd_{def}	0,34037	-	-	6,16

Tabela 5.3 – Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 162$.

$Re = 162$	C_D	% forças viscosas	% forças de pressão	Diferença com $Cd_{analitico}$ (%)
$Cd_{analitico}$	0,31111	-	-	-
Cd_{ie_medio}	0,27532	1,6	98,4	11,50
Cd_{ie_1}	0,25065	1,76	98,24	19,43
Cd_{ie_2}	0,29998	1,47	98,53	3,58
Cd_{e_medio}	0,27706	1,59	98,41	10,94
Cd_{e_1}	0,25406	1,74	98,26	18,34
Cd_{e_2}	0,30001	1,45	98,55	3,57
Cd_{def}	0,29836	-	-	4,10

Tabela 5.4 – Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 175$.

$Re = 175$	C_D	% forças viscosas	% forças de pressão	Diferença com $Cd_{analitico}$ (%)
$Cd_{analitico}$	0,28664	-	-	-
Cd_{ie_medio}	0,26806	1,84	98,16	6,48
Cd_{ie_1}	0,24294	2,02	97,98	15,24
Cd_{ie_2}	0,29318	1,69	98,31	2,28
Cd_{e_medio}	0,26973	1,82	98,18	5,90
Cd_{e_1}	0,24620	2,00	98,00	14,11
Cd_{e_2}	0,29325	1,68	98,32	2,31
Cd_{def}	0,28004	-	-	2,30

Tabela 5.5 – Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 191$.

$Re = 191$	C_D	% forças viscosas	% forças de pressão	Diferença com $Cd_{analitico}$ (%)
$Cd_{analitico}$	0,26354	-	-	-
Cd_{ie_medio}	0,26106	2,04	97,96	0,94
Cd_{ie_1}	0,23550	2,26	97,74	10,64
Cd_{ie_2}	0,28661	1,85	98,15	8,76
Cd_{e_medio}	0,26282	2,02	97,98	0,27
Cd_{e_1}	0,23896	2,22	97,78	9,33
Cd_{e_2}	0,28669	1,85	98,15	8,79
Cd_{def}	0,26261	-	-	0,35

Tabela 5.6 – Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 201$.

$Re = 201$	C_D	% forças viscosas	% forças de pressão	Diferença com $Cd_{analitico}$ (%)
$Cd_{analitico}$	0,25000	-	-	-
Cd_{ie_medio}	0,25756	2,22	97,78	3,02
Cd_{ie_1}	0,23168	2,47	97,53	7,33
Cd_{ie_2}	0,28344	2,02	97,98	13,38
Cd_{e_medio}	0,25950	2,21	97,79	3,80
Cd_{e_1}	0,23549	2,43	97,57	5,80
Cd_{e_2}	0,28351	2,02	97,98	13,41
Cd_{def}	0,25400	-	-	1,60

Um gráfico apresentando os coeficiente de arrasto dos casos testados em função dos números de Reynolds está mostrado na Fig. 5.4. Pelas tabelas apresentadas e pelo gráfico observa-se que os resultados utilizando a metodologia numérica Cd_{def} apresentam a menor dife-

Tabela 5.7 – Teste para validação do código numérico. Coeficiente de arrasto C_D avaliado para uma bolha em ascensão para $Re = 216$.

$Re = 216$	C_D	% forças viscosas	% forças de pressão	Diferença com $Cd_{analitico}$ (%)
$Cd_{analitico}$	0,23295	-	-	-
Cd_{ie_medio}	0,25424	5,19	94,81	9,14
Cd_{ie_1}	0,23076	4,89	95,11	0,94
Cd_{ie_2}	0,27771	5,45	94,55	19,21
Cd_{e_medio}	0,25577	5,21	94,79	9,80
Cd_{e_1}	0,23377	4,94	95,06	0,35
Cd_{e_2}	0,27778	5,44	94,56	19,24
Cd_{def}	0,24132	-	-	3,59

rença, quando se compara com o $Cd_{analitico}$.

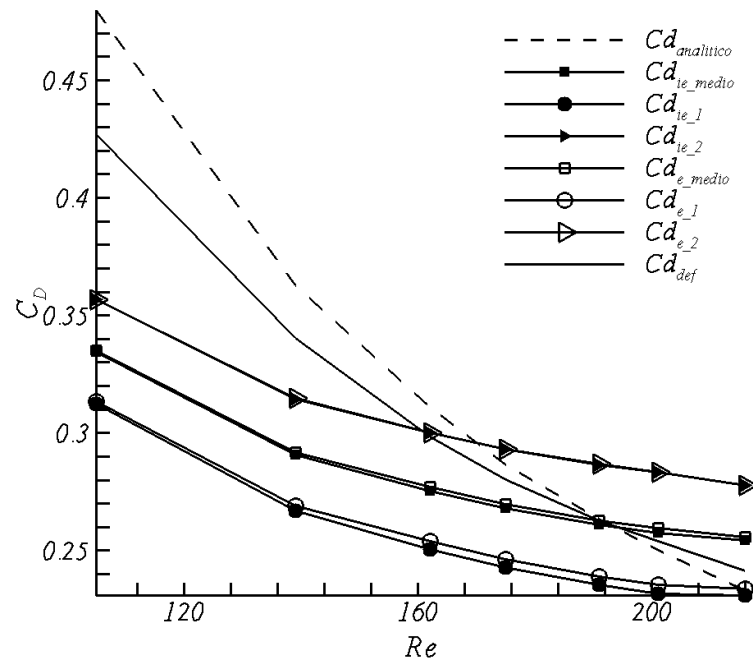


Figura 5.4 – Coeficiente de arrasto em função número de Reynolds para as simulações de uma bolha em ascensão.

Comparando os resultados para os coeficientes de arrasto calculados com a intensidade de força de arrasto obtida pela Eq. (5.9), que correspondem ao Cd_{ie_1} , Cd_{ie_2} , Cd_{ie_medio} , Cd_{e_1} , Cd_{e_2} e Cd_{e_medio} , o que apresenta menor diferença em relação ao $Cd_{analitico}$ é o C_D obtido a partir da média da pressão interpolada para os pontos 1 e 2, ou seja, Cd_{ie_medio} e Cd_{e_medio} . Isso fica claro quando se observa a faixa de $Re = 175$ a $Re = 201$. Comparando também os resultados utilizando pontos internos e externos e utilizando somente pontos externos para a interpolação, para todos os números de Re estudados, a diferença não é significativa.

Para todos os casos, como já mencionado, procuraram-se parâmetros em que a bolha não se deformasse, mantendo-se, assim, sua geometria inalterada. Esses parâmetros foram esco-

lhidos de acordo com o diagrama geométrico de bolhas (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978), onde a bolha se mantém na forma esférica. Porém, mesmo para esses parâmetros, principalmente para os maiores valores de Re testados, a bolha no regime permanente, apresentava-se com geometria levemente oval. Então, com o objetivo de quantificar esta deformação sofrida pela bolha, calculou-se os raios máximo e mínimo de cada bolha para o último tempo de simulação. Na Tab. 5.8, tem-se a diferença em porcentagem do raio máximo e mínimo em relação ao raio inicial da bolha. Analisando esses resultados, observa-se que, como esperado, a diferença entre os raios máximo e mínimo em relação ao raio inicial aumenta com o aumento do número de Reynolds e mesmo para o caso de maior deformação, para $Re = 216$, a diferença dos raios mínimo e máximo em relação ao raio inicial ainda é pequena, mas é crescente.

Tabela 5.8 – Diferença entre os raios máximos e mínimos finais em relação ao raio inicial de uma bolha em ascensão para os testes de avaliação do coeficiente de arrasto.

Re	Diferença com r_{min} (%)	Diferença com r_{max} (%)
105	3,10	3,80
139	3,93	4,92
162	4,46	5,45
175	4,71	5,82
191	5,10	6,13
201	5,15	6,36
216	5,74	7,07

A simulação de um escoamento a alto número de Reynolds com a preservação da forma da interface não é uma tarefa simples. Isto porque, como se observa pela diagrama geométrico de Clift, Grace e Weber (1978), à medida que se aumenta o número de Reynolds, a interface está mais propícia a deformações. No presente trabalho, o aumento do número de Reynolds foi obtido diminuindo-se a viscosidade da fase contínua e, como a razão de viscosidade entre as fases foi mantida, a viscosidade da fase dispersa também foi reduzida. Assim, com a bolha menos viscosa, as deformações foram maiores.

Quando se tem escoamentos a baixo número de Reynolds tem-se uma maior espessura da camada limite e pequenas deformações na geometria da bolha. O contrário, quando se tem o escoamento a alto número de Reynolds, tem-se uma camada limite de pequena espessura, porém, as deformações são maiores. Como para a dedução da solução analítica para o cálculo do coeficiente de arrasto para bolhas bidimensionais partiu-se de um escoamento invíscido, irrotacional e geometria circular, a busca aqui foi feita no sentido de encontrar um regime onde se

conciliasse uma pequena espessura da camada limite e geometria com mínimas deformações. Por isso, acredita-se que, o melhor resultado encontrado para os números de Reynolds testados, onde se tem uma melhor combinação destes efeitos, camada limite de pequena espessura e com uma menor deformação da geometria, foi para a simulação com $Re = 191$, como pode ser visto na Fig. 5.4. Como pode ser observado pela Tab. 5.5, para este caso, a diferença entre o coeficiente de arrasto número e analítico é menor que 1%.

5.2 Verificação e validação da implementação da equação de concentração de surfactante insolúvel

Nesta seção, têm-se os resultados para a verificação e a validação das implementações feitas para a equação de concentração de surfactante. A verificação é feita através do teste de difusão onde se compara os resultados numéricos e analíticos e o erro é calculado afim de se fazer a análise de convergência. Para a validação, realizou-se a simulação de uma bolha imersa em um escoamento cisalhante, tanto para uma interface limpa quanto contaminada, e os resultados são comparados, qualitativamente, com outros autores.

Os resultados apresentados nesta seção e nas seções posteriores, serão escritos em termos de quantidades adimensionais. Os detalhes da adimensionalização são dados na Seção 3.4.

5.2.1 Teste de difusão do surfactante

Como em Muradoglu e Tryggvason (2008), para a verificação das implementações para a equação de surfactante, Eq. (3.75), utilizou-se um simples teste onde o surfactante insolúvel é difundido sobre uma interface imóvel. Para tal, considere uma bolha de raio 0,25 localizado no centro do domínio $[1, 25; 1, 25]$ em um fluido estático com uma concentração de surfactante inicial não uniforme dada por

$$\Gamma = 0,5(1 - \cos(\theta)). \quad (5.15)$$

Para este caso as equações de Navier-Stokes foram desativadas. Somente a equação

de concentração de surfactante com o termo $\frac{\partial}{\partial s}(\Gamma u_a) = 0$ foi resolvida,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\Gamma \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) = D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right), \quad (5.16)$$

e os pontos lagrangianos foram mantidos constantes e iguais à configuração inicial. O número de Péclet para este caso foi de $Pe = 10$.

A solução analítica para este problema é

$$\Gamma = 0,5(1 - e^{-\frac{t D_s}{r^2}} \cos(\theta)). \quad (5.17)$$

Na Figura 5.5, tem-se o comportamento da concentração de surfactante ao longo da superfície da bolha calculados de forma analítica e numérica para um teste onde empregou-se 120 pontos lagrangianos. Para o instante inicial a concentração é máxima para $\theta = \pi$ onde tem-se $\Gamma(\pi, 0) = 1$ e mínima para $\theta = 0$ onde tem-se $\Gamma(0, 0) = 0$. Com a evolução temporal a distribuição de concentração de surfactante tende a se uniformizar, devido aos mecanismos de difusão, chegando ao valor médio de 0,5 para todos os pontos.

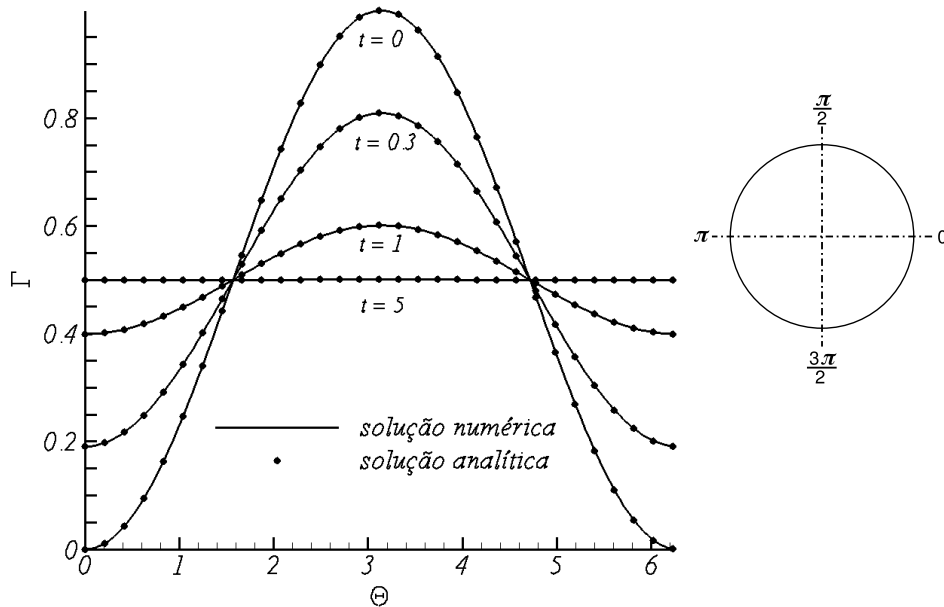


Figura 5.5 – Distribuição de surfactante ao longo da interface para o teste de difusão.

A norma infinita para o tempo final foi calculada como

$$\|erro\|_{\infty} = \max \left(\left| \Gamma_k^{numérico} - \Gamma_k^{analítico} \right| \right), \quad (5.18)$$

onde $k = 1, \dots, n_l$, sendo k o ponto lagrangiano e n_l o número total de pontos lagrangianos. Vários teste foram feitos variando-se o número de pontos lagrangianos afim de se avaliar a ordem do método. Os resultados para os dois esquemas de discretização temporal implementados, SBDF e Crank Nicolson, estão mostrados nas Tab. 5.9 e 5.10. Na primeira coluna tem-se o número de pontos lagrangianos empregados, na segunda coluna tem-se a norma infinita para o tempo final de simulação e na terceira coluna tem-se a razão entre a norma dos erros. Observa-se que conforme se duplica o número de nós, a razão das normas para ambos os esquemas de discretização convergem para 4, indicando um comportamento de métodos de segunda ordem.

Tabela 5.9 – Norma dos erros para o teste de difusão para o tempo final de simulação usando o esquema de discretização temporal SBDF.

n_l	$\ erro\ _\infty$	razão
120	$7,080 \cdot 10^{-7}$	
240	$1,760 \cdot 10^{-7}$	4,02
480	$4,393 \cdot 10^{-8}$	4,01
960	$1,097 \cdot 10^{-8}$	4,00

Tabela 5.10 – Norma dos erros para o teste de difusão para o tempo final de simulação usando o esquema de discretização temporal Crank-Nicolson.

n_l	$\ erro\ _\infty$	razão
120	$1,662 \cdot 10^{-7}$	
240	$5,158 \cdot 10^{-8}$	3,99
480	$1,039 \cdot 10^{-8}$	4,00
960	$2,599 \cdot 10^{-8}$	4,00

Dando continuidade à validação da equação de concentração de surfactante, a equação completa foi resolvida inclusive com o termo $\frac{\partial}{\partial s}(\Gamma u_a) \neq 0$ e com a introdução de um termo fonte f afim de se obter uma solução manufaturada,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\Gamma \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) = \frac{\partial}{\partial s}(\Gamma u_a) + D_s \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial s} / \left| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right| \right) + f. \quad (5.19)$$

Para isso, partiu-se de uma solução para u_a dada por

$$u_a = r(6 - 6t)\cos(s/r), \quad (5.20)$$

e utilizando-se da mesma solução analítica para Γ , dada pela Eq. 5.17. Com isso, calculou-se o

termo fonte f :

$$f = -\frac{1}{2}e^{(-\frac{t}{r^2}\frac{Ds}{r^2})}\sin\left(\frac{s}{r}\right)(6-6t)\cos\left(\frac{s}{r}\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}e^{(-\frac{t}{r^2}\frac{Ds}{r^2})}\cos\left(\frac{s}{r}\right)\right)(6-6t)\sin\left(\frac{s}{r}\right). \quad (5.21)$$

Os erros absolutos máximos para os vários números de pontos lagrangianos testados para o tempo final de simulação estão apresentados nas Tab. 5.11 e 5.12 para os esquemas de discretização temporal SBDF e Crank-Nicolson, respectivamente. Observando-se a terceira coluna de ambas as tabelas, nota-se que a razão entre as normas dos erros, como nos resultados anteriores, convergem para 4, apresentando, portanto, segunda ordem de convergência.

Tabela 5.11 – Norma dos erros para o teste de convergência para equação de concentração de surfactante completa e usando o esquema de discretização temporal SBDF.

n_t	$\ erro\ _\infty$	razão
120	$5,291 \cdot 10^{-4}$	
240	$1,321 \cdot 10^{-4}$	4,00
480	$3,330 \cdot 10^{-5}$	3,97
960	$8,390 \cdot 10^{-6}$	3,97

Tabela 5.12 – Norma dos erros para o teste de convergência para equação de concentração de surfactante completa e usando o esquema de discretização temporal Crank Nicolson.

n_t	$\ erro\ _\infty$	razão
120	$6,046 \cdot 10^{-4}$	
240	$1,515 \cdot 10^{-4}$	3,99
480	$3,815 \cdot 10^{-5}$	3,97
960	$9,590 \cdot 10^{-6}$	3,97

5.2.2 Estudo de uma bolha submetida a um escoamento cisalhante: interface limpa $\times$ contaminada

Seguindo Lai, Tseng e Hung (2008), considere uma bolha imersa em um escoamento cisalhante, como mostra a Fig. 5.6. Considere o domínio de cálculo $\Omega = [0; 10] \times [0; 4]$, o raio da bolha de 0,5 e para o instante inicial, a fase contínua tem a velocidade dada por $u = 0,5(y-2)$, para $0 \leq y \leq 4$. Para examinar o efeito do surfactante foram realizados três testes: com a bolha livre de surfactante ($\beta = 0$) e contaminada com $\beta = 0,25$ e $\beta = 0,5$. Lembrando-se que o coeficiente de elasticidade β , que aparece nas equações de estado, Eq. (3.62) e (3.61), mede o quanto sensível é a tensão superficial em relação à presença do surfactante. Empregou-se, para

os casos com presença de surfactantes, a equação de estado linear (Eq. 3.62) e $Pe = 10$.

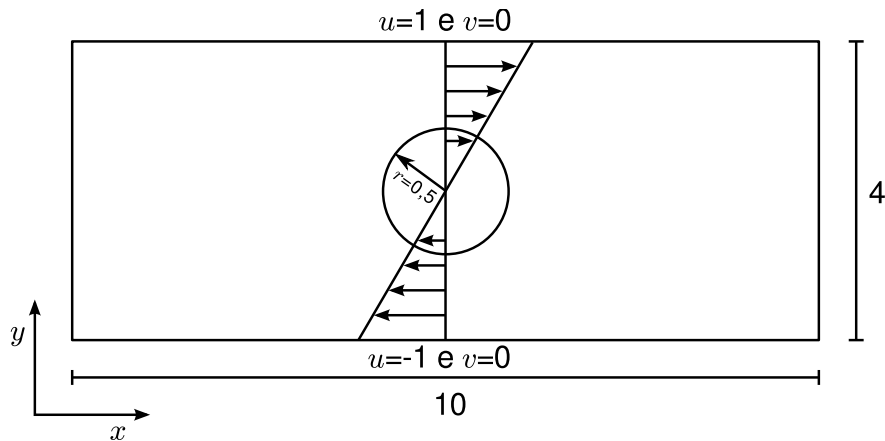


Figura 5.6 – Configuração geométrica para as simulações de uma bolha imersa em um escoamento cisalhante.

Os parâmetros empregados foram $\rho_d/\rho_c = 1$ e $\mu_d/\mu_c = 1$, $\sigma_c = 1$ e $g = 0$ e os parâmetros adimensionais $Re = 10$ e $Ca = 0,5$. No instante inicial, a concentração de surfactante foi uniforme e igual 1, $\Gamma(s, 0) = 1$. A malha base utilizada foi de 80×32 contendo 5 níveis de refinamento e para as condições de contorno utilizou-se condição de Dirichlet para a parede sul $v = 0$ e $u = -1$, para parede norte $v = 0$ e $u = 1$ e condição de periodicidade na direção x . Para este estudo, a interface foi tratada como uma curva fechada e, portanto, a equação de equidistribuição (Eq. 3.19) foi usada.

As Figuras 5.7 e 5.8 mostram a interface e a evolução temporal das componentes de velocidade u e v , respectivamente, para o caso onde a bolha está livre de contaminantes. A interface está representada pela cor preta, as regiões de cor branca indicam velocidade positivas e as de cor preta velocidades negativas. Pelos campos da componente u da velocidade, Fig. 5.7, observa-se que devido ao campo cisalhante, a parte inferior da bolha é transportada para o lado esquerdo enquanto que a parte superior para o lado direito. Isso leva à deformação da interface. Nota-se também que com a evolução temporal, a componente horizontal u começa a “sentir” a presença da interface e se modifica levemente nas regiões de alta curvatura da bolha. O campo da componente vertical da velocidade v , Fig. 5.8, é nulo para o tempo inicial e com a evolução temporal, vão surgindo regiões com velocidades vertical, principalmente nas regiões de alta curvatura. O campo de pressão está apresentado na Fig. 5.9. Observa-se que nas regiões de alta curvatura é onde se tem o maior salto de pressão, como esperado conforme a lei de Young-Laplace (HOU, LOWENGRUB e SHELLEY, 1994). Também nas regiões de alta curvatura é

onde se tem os maiores valores de intensidade para a vorticidade, Fig. 5.10. Para estes campos, observa-se, com a evolução temporal, a geração de dois vórtices de sinais contrários próximos às regiões de alta curvatura da bolha.

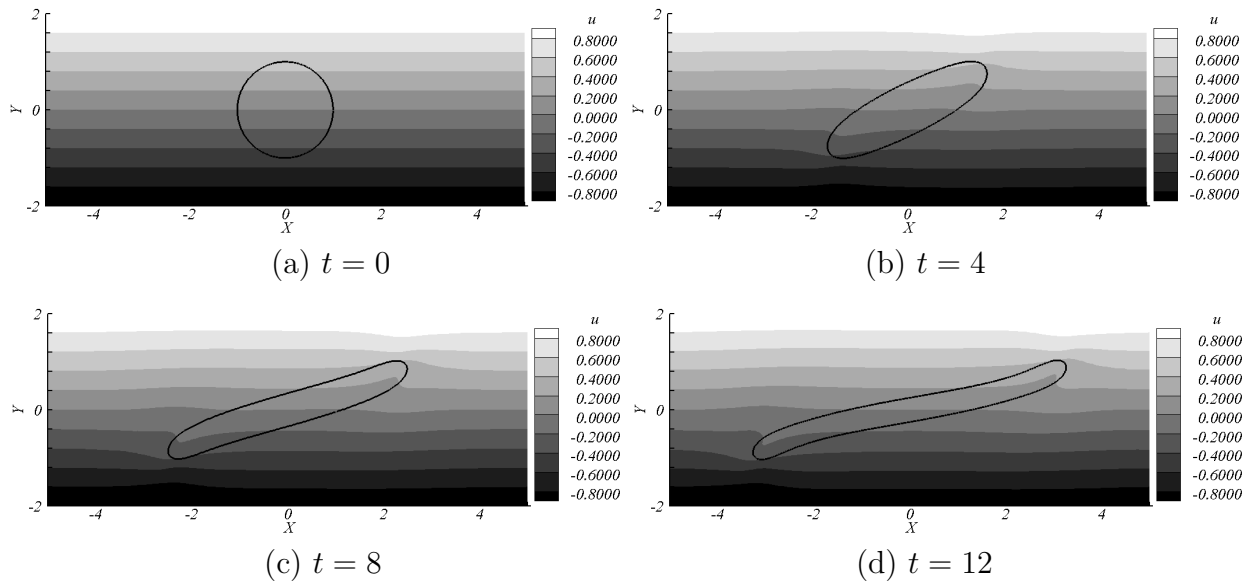


Figura 5.7 – Evolução temporal do campo da componente u de velocidade para uma bolha limpa submetida a um escoamento cisalhante.

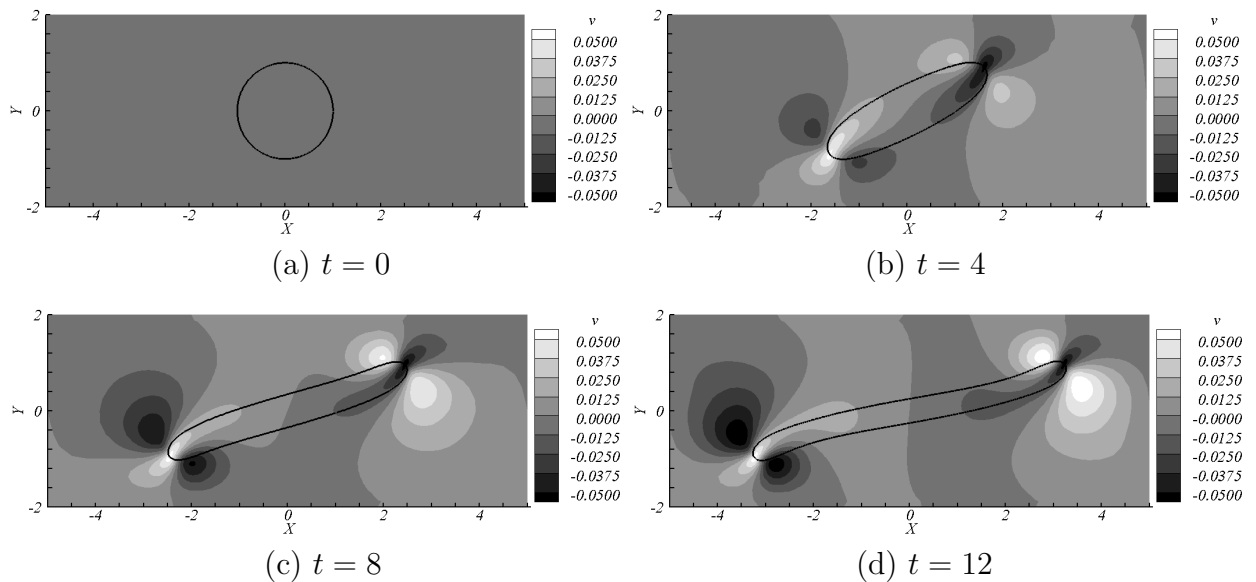


Figura 5.8 – Evolução temporal do campo da componente v de velocidade para uma bolha limpa submetida a um escoamento cisalhante.

Na Figura 5.11, tem-se os campos para as componentes de velocidade u e v , para a pressão e vorticidade para o tempo final ($t = 12$) para o caso contaminada $\beta = 0,25$. Esses campos se mostraram qualitativamente semelhantes aos encontrados para o caso da bolha limpa, no entanto, a intensidade dos campos para o caso contaminado é menor. O mesmo acontece

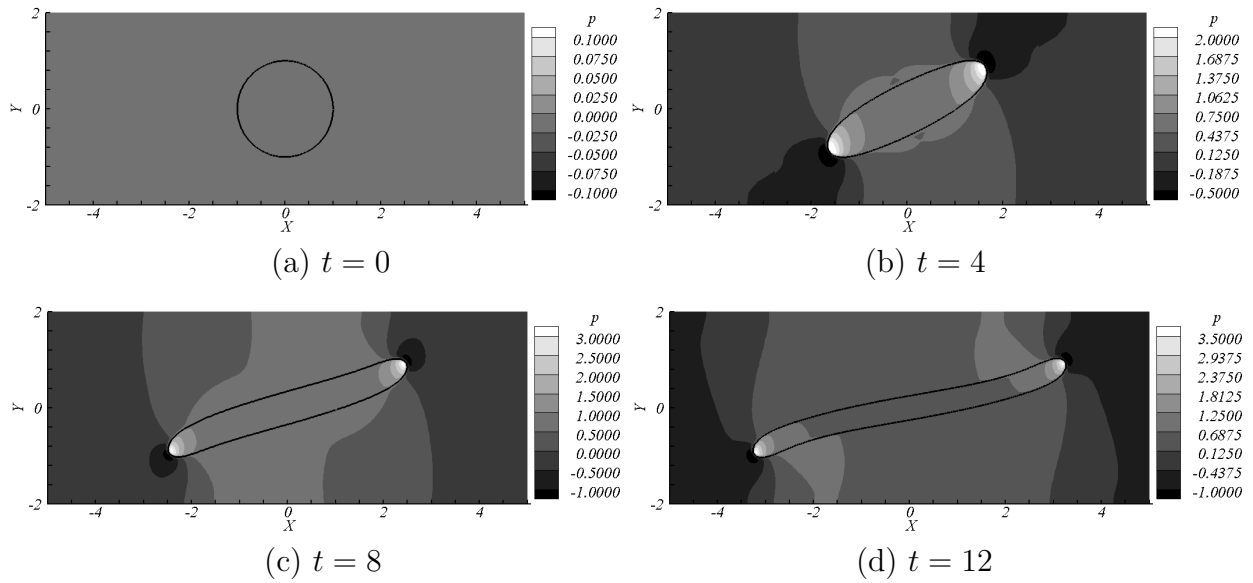


Figura 5.9 – Evolução temporal do campo de pressão para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante.

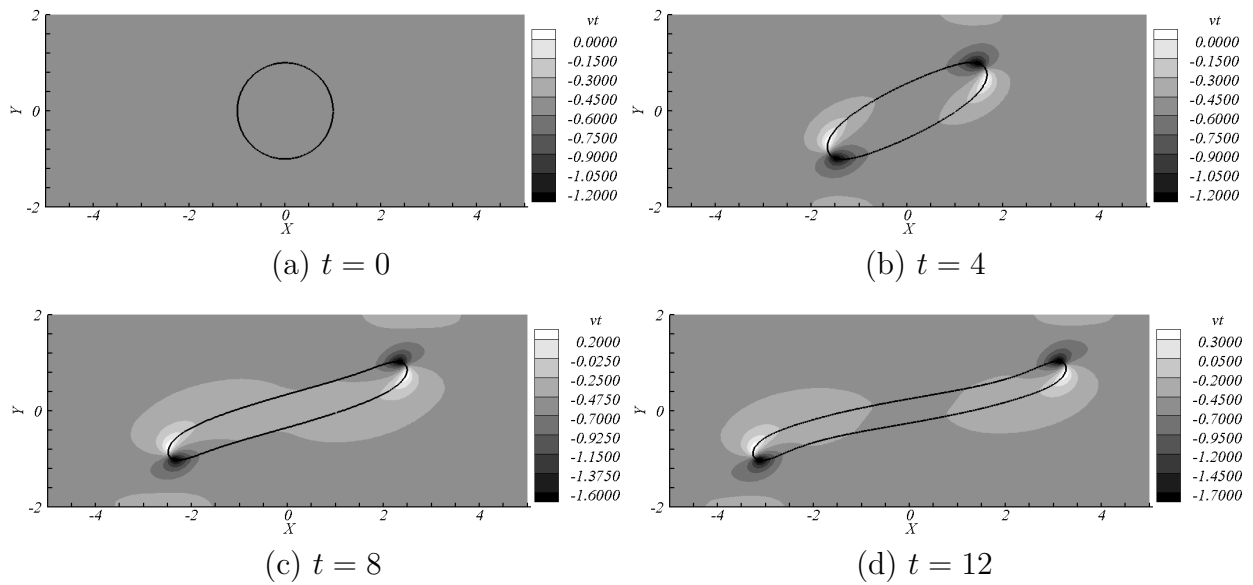


Figura 5.10 – Evolução temporal do campo de vorticidade para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante.

para o caso com bolha contaminada ($\beta = 0,5$), Fig. 5.12, porém, a intensidade desses campos é ainda menor quando comparados com os campos apresentados para a bolha limpa.

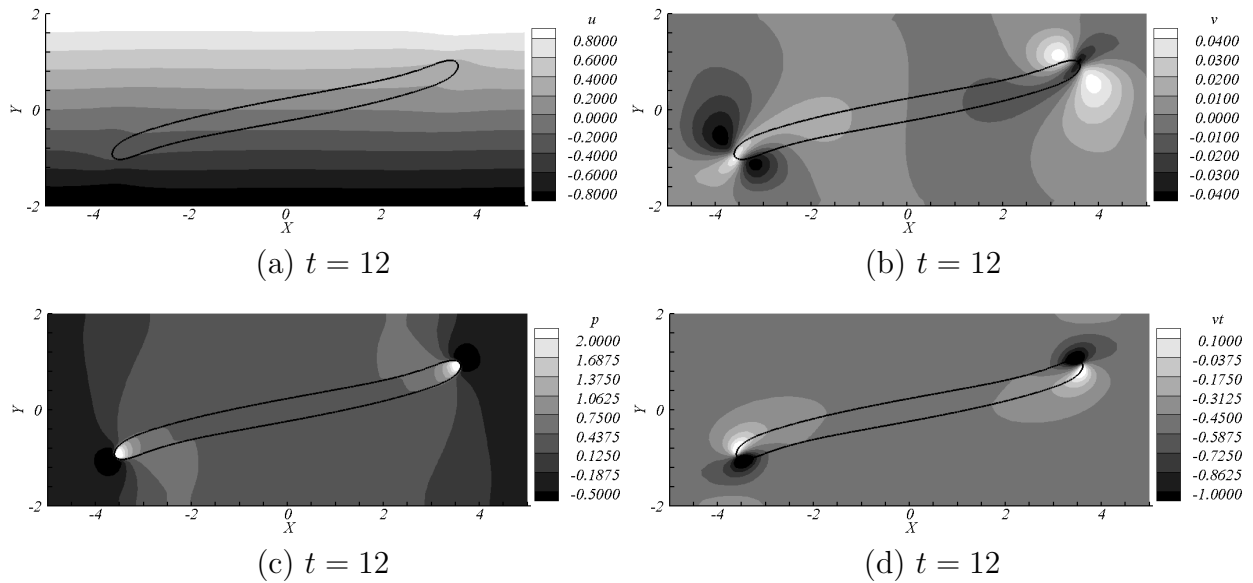


Figura 5.11 – Componentes de velocidade u (a) e v (b), campo de pressão (c) e vorticidade (d) para o tempo final $t = 12$ para simulação de uma bolha contaminada e $\beta = 0,25$ submetida à um escoamento cisalhante.

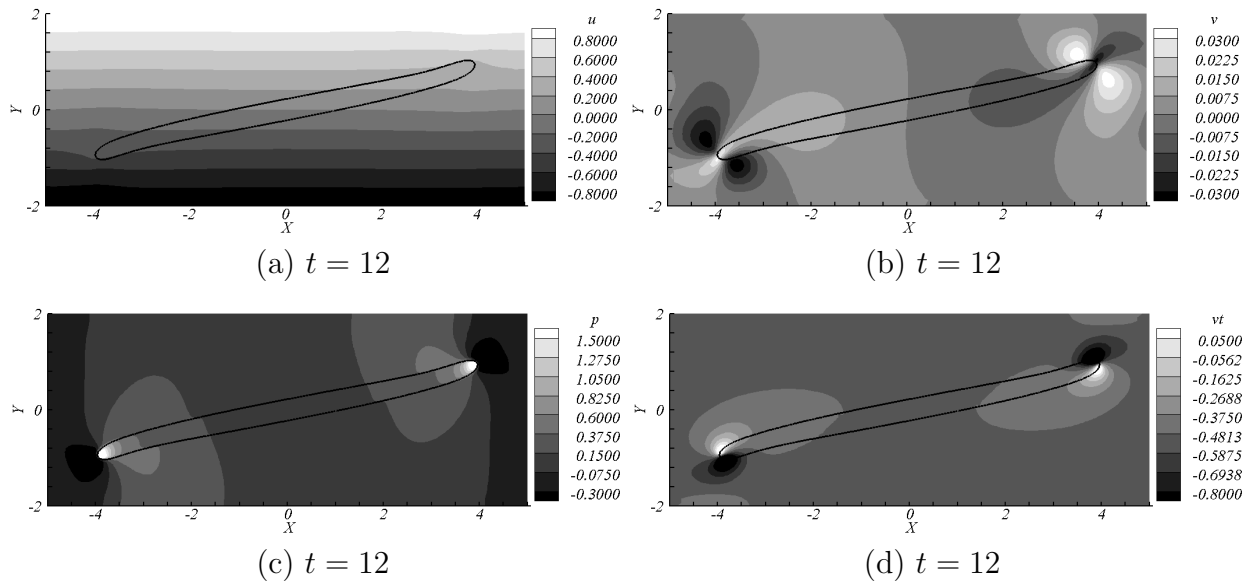


Figura 5.12 – Componentes de velocidade u (a) e v (b), campo de pressão (c) e vorticidade (d) para o tempo final $t = 12$ para simulação de uma bolha contaminada e $\beta = 0,5$ submetida à um escoamento cisalhante.

Na Figura 5.13, tem-se a evolução da interface para os três casos estudados: $\beta = 0$; $\beta = 0,25$ e $\beta = 0,5$. Assim como observado por Lai, Tseng e Hung (2008), a deformação é maior para as bolhas contaminadas que para a bolha limpa. Isso se deve ao fato que com a presença de contaminantes, a tensão superficial é menor que para a interface livre de contaminantes,

levando, assim, a maiores deformações. Comparando os casos para as bolhas contaminadas, com o aumento de β tem-se um aumento na deformação. Isto é claramente justificado quando se observa as equações de estado, Eq. (3.62) e (3.61), para um maior coeficiente de elasticidade (β) tem-se uma menor tensão superficial e, conseqüentemente, uma maior deformação da interface.

Comparando os resultados obtidos no presente trabalho e os resultados de Lai, Tseng e Hung (2008), Fig. 5.14 e 5.15, observa-se que, qualitativamente, eles são semelhantes. No trabalho de Lai, Tseng e Hung (2008), os parâmetros de entrada foram expressos de forma adimensional, pelo número de Reynolds e Capilaridade, porém, o artigo não informa como e quais os parâmetros usados para a adimensionalização (comprimento e velocidade característicos). Uma vez que as grandezas no código AMR2D são dimensionais, no presente trabalho, para a simulação deste problema, empregou-se parâmetros que combinados levam aos mesmos valores dos números adimensionais descritos no artigo de Lai, Tseng e Hung (2008). Acredita-se que uma das razões para a diferença quantitativa entre os resultados seja devido às diferenças nos parâmetros de adimensionalização. Outras diferenças na metodologias também podem ser responsáveis por essa diferença nos resultados. No trabalho de Lai, Tseng e Hung (2008), empregou-se passo de tempo fixo e malha regular uniforme, diferindo do presente trabalho, onde utilizou-se passo de tempo variável e malha adaptativa. Existem também diferenças no esquema de discretização temporal das equações de Navier-Stokes. No presente trabalho empregou-se o esquema SBPF (*Semi Backward Difference Formula*), enquanto no trabalho de Lai, Tseng e Hung (2008) empregou-se o esquema Crank-Nicolson. Outra diferença pode estar nas condições de contorno. O trabalho de Lai, Tseng e Hung (2008) não menciona as condições de contorno usadas nas paredes leste e oeste.

A evolução da concentração de surfactante para os casos estudados está apresentada na Fig. 5.16. Para os gráficos apresentados, a variável s corresponde ao comprimento de arco da interface que foi calculada a partir da origem horizontal direita, como mostra a Fig. 5.17. O caso onde se tem a bolha limpa foi omitida, pois, a concentração de surfactante é nula em toda a interface. Observa-se que o surfactante vai se concentrando nas regiões de alta curvatura da bolha. Este comportamento também é observado nos resultados de Lai, Tseng e Hung (2008), como mostra a Fig. 5.18, onde se tem o resultado para $\beta = 0,25$. A concentração de surfactante vai variando devido à deformação da interface, à difusão e, principalmente, porque o surfactante

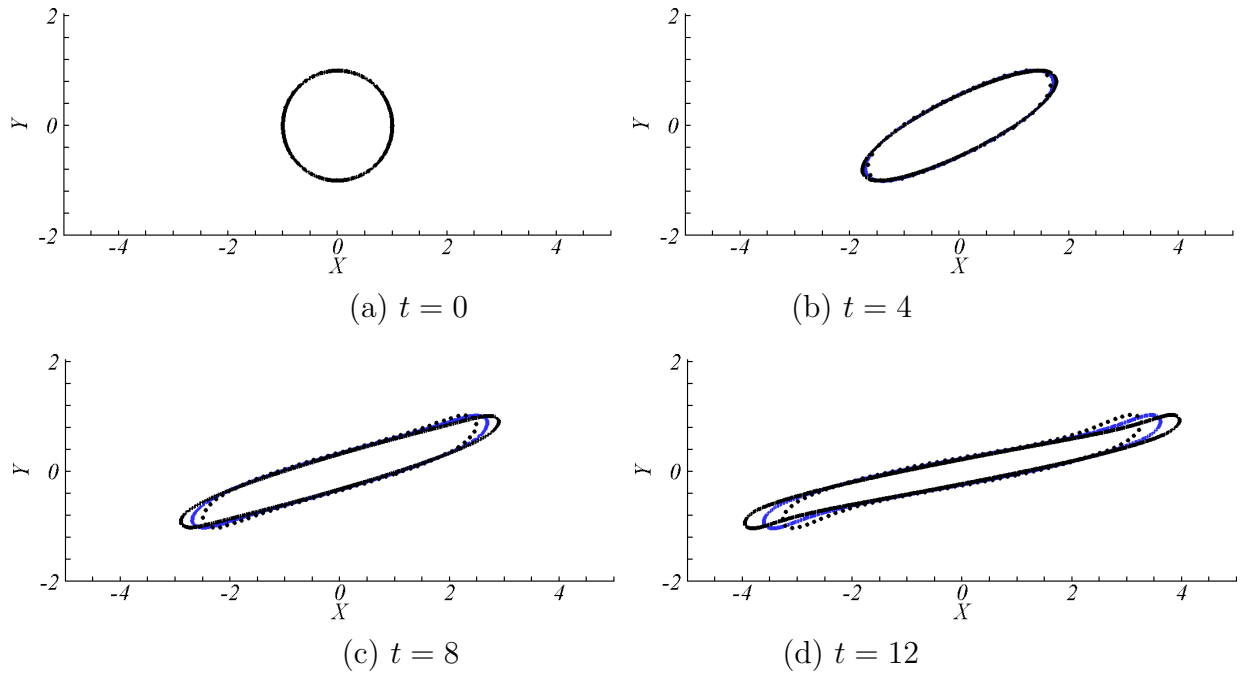


Figura 5.13 – Evolução temporal da interface para uma bolha submetida à um escoamento cisalhante com e sem surfactante. Resultados do presente trabalho: interface limpa $\beta = 0$ ($\cdots$), interface contaminada com $\beta = 0,25$ (—) e com $\beta = 0,50$ (—).

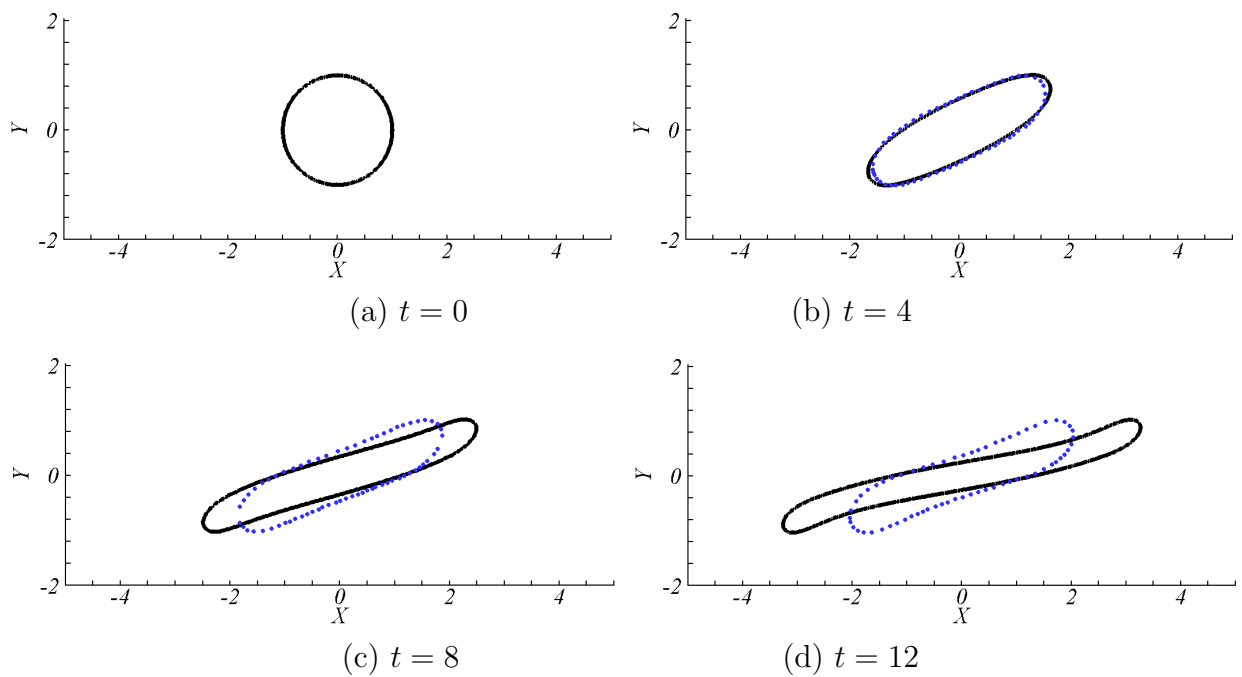


Figura 5.14 – Evolução temporal da interface para uma bolha limpa submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) ($\cdots$).

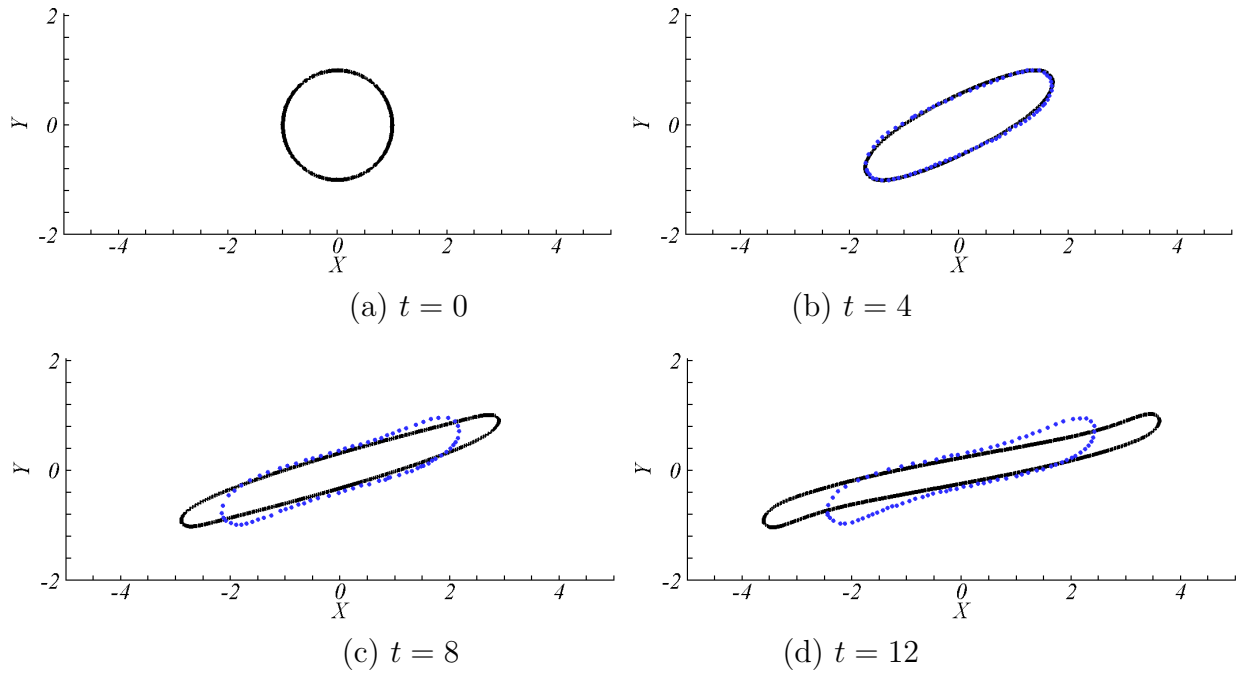


Figura 5.15 – Evolução temporal da interface para uma bolha submetida à um escoamento cisalhante com surfactante ($\beta = 0,25$). Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) ($\cdots$).

é transportado, sobre a interface, pelo fluido ambiente. Analisando as figuras, nota-se que o valor de β afeta a concentração de surfactante modificando ligeiramente a sua distribuição ao longo da interface. A tensão superficial, como pode ser observado na Fig. 5.19, tem comportamento inverso, sendo menor nas regiões de alta curvatura. Observe que para a bolha limpa, a tensão superficial se mantém constante e uniforme igual ao valor inicial durante toda a simulação. Os resultados para a concentração de surfactante e tensão superficial para $\beta = 0,25$ para o presente trabalho e o trabalho de Lai, Tseng e Hung (2008) estão mostrados nas Fig. 5.18 e 5.20, respectivamente. Também para estes gráficos de concentração de surfactante e tensão superficial, observa-se uma semelhança qualitativa entre os resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) e os resultados do presente trabalho. Como a interface no presente trabalho apresenta, com a evolução temporal, uma maior deformação, isso implica na distribuição de concentração de surfactante e tensão superficial. Por isso, a diferença entre os resultados se deve principalmente à maior deformação da interface no presente trabalho. A variação de massa de surfactante ($m(t) - m(0)$) para os casos onde se tem bolhas contaminadas foi da ordem de 10^{-14} .

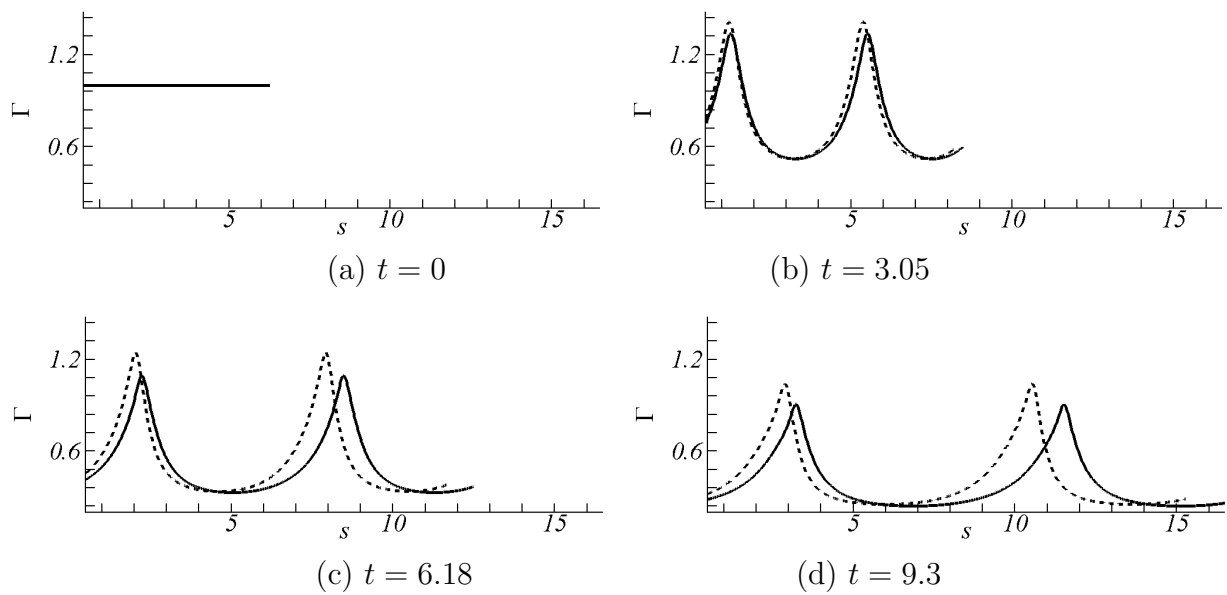


Figura 5.16 – Distribuição de concentração de surfactante para uma bolha submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho. A linha tracejada corresponde à interface contaminada com $\beta = 0,25$, e a linha contínua corresponde à interface contaminada e $\beta = 0,5$.

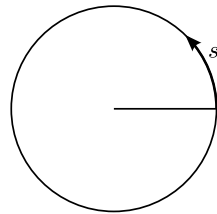


Figura 5.17 – Origem adotada para o comprimento de arco (s) nos teste onde se tem uma bolha submetida à um escoamento cisalhante.

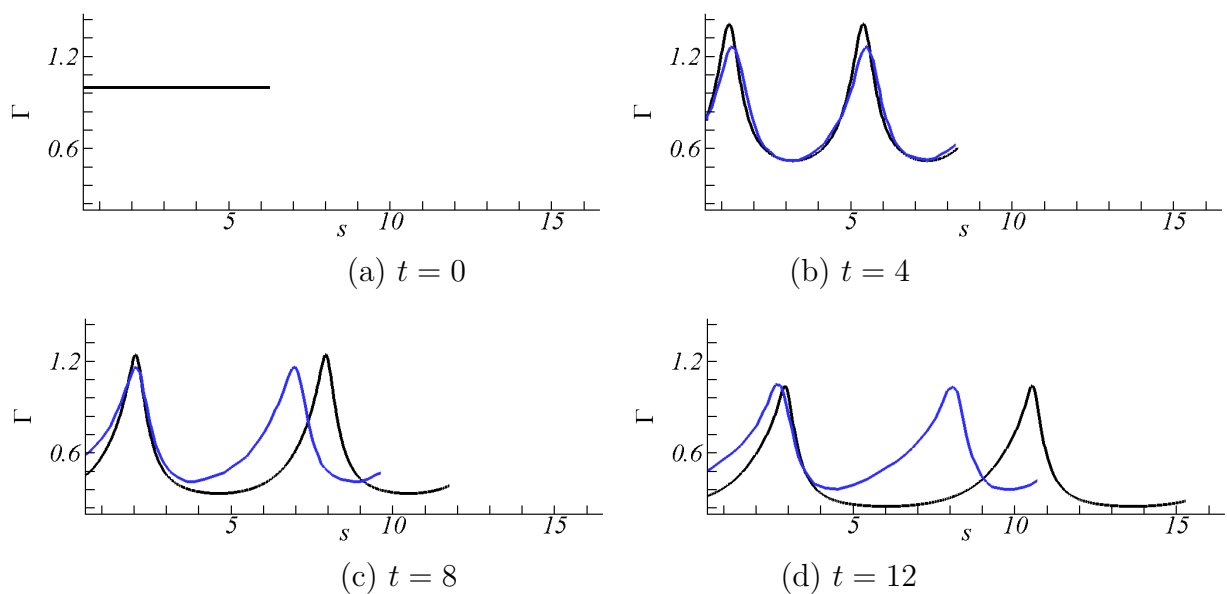


Figura 5.18 – Distribuição de concentração de surfactante para uma bolha contaminada ($\beta = 0,25$) submetida à um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) (—).

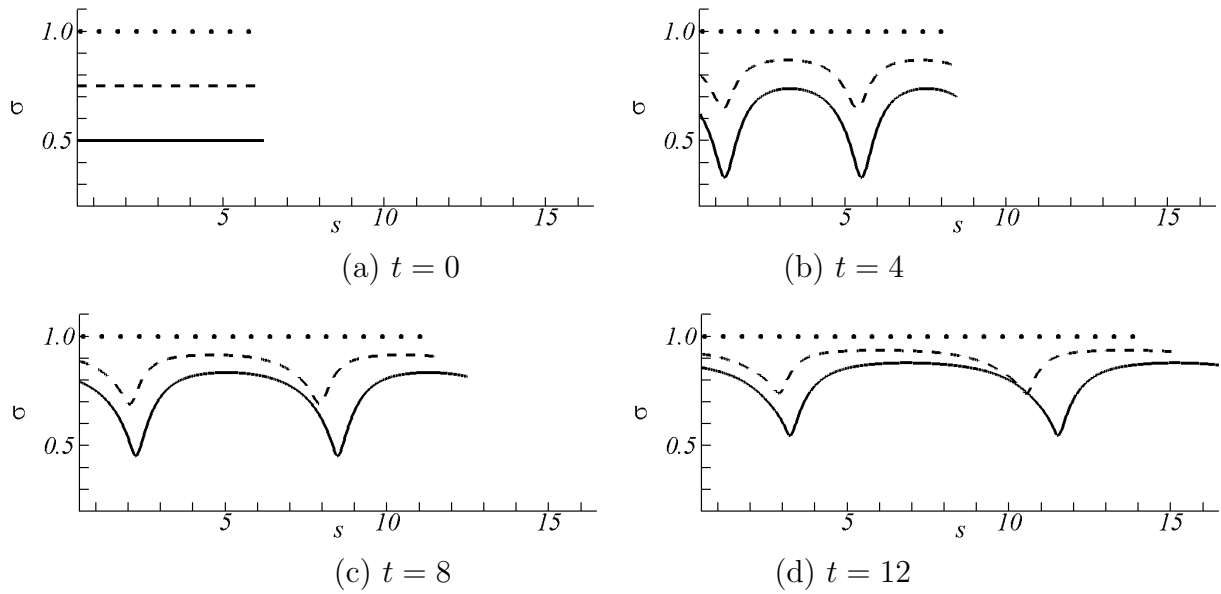


Figura 5.19 – Distribuição tensão superficial para uma bolha submetida a um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho. Linha pontilhada corresponde a interface limpa, a linha tracejada corresponde à interface contaminada com $\beta = 0,25$, e a linha contínua corresponde à interface contaminada e $\beta = 0,5$.

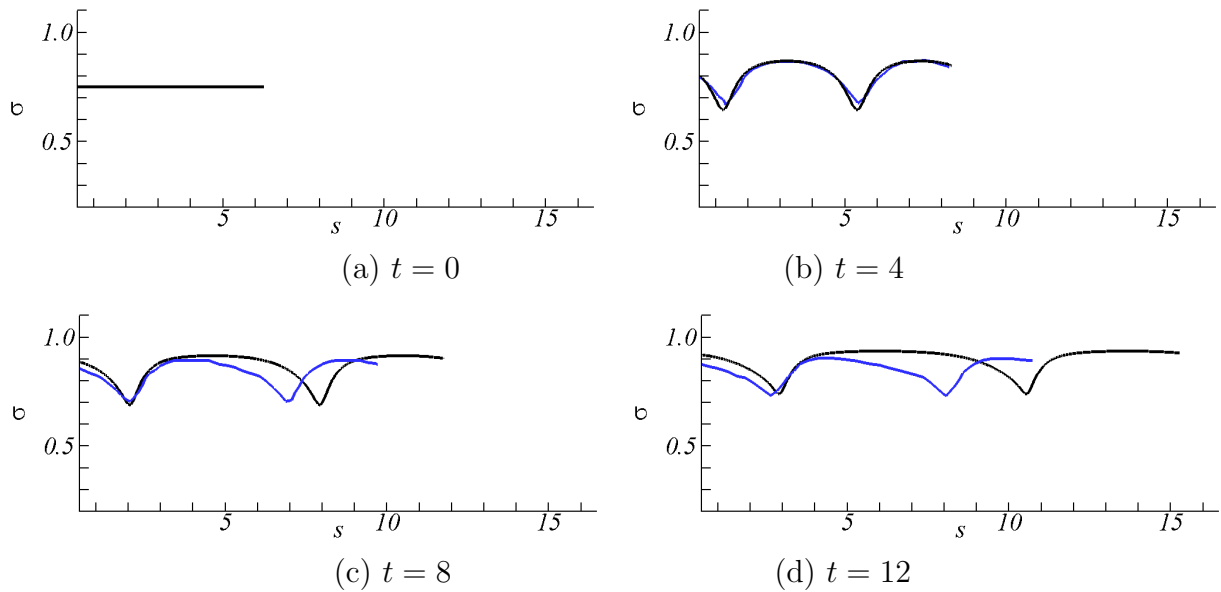


Figura 5.20 – Distribuição tensão superficial para uma bolha contaminada ($\beta = 0,25$) submetida a um escoamento cisalhante. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2008) (—).

5.3 Teste de efeito Marangoni

O objetivo deste teste foi de verificar a existência do efeito Marangoni. Para tal, realizou-se aqui o teste descrito por Zhang, Eckmann e Ayyaswamy (2006). Considere uma bolha inicialmente com uma distribuição não uniforme de surfactante dada por,

$$\Gamma = 0,04 \frac{(1 - \sin(\theta))}{2}. \quad (5.22)$$

Inicialmente a bolha e o fluido ambiente estão em repouso. Os parâmetros relativos às propriedades físicas foram $\rho_c/\rho_d = 0,1$, $\mu_c/\mu_d = 0,1$, $\sigma_c = 1$, $\beta = 0,3$ e os parâmetros adimensionais empregados $Re = 10$ e $Ca = 0,1$. Empregou-se a equação de estado não linear (Eq. 3.61). No instante inicial, tem-se uma bolha de raio 0,5 localizada no centro de um domínio $\Omega = [0, 0; 10, 0] \times [0, 0; 4, 0]$. A configuração inicial para este problema está mostrada na Fig. 5.21. A malha base utilizada foi 24×16 contendo 4 níveis de refinamento. A gravidade foi desprezada e as condições de contorno empregadas para este caso foram condições homogêneas de Dirichlet ($u = v = 0$) nas paredes leste e oeste e periodicidade na direção y . Assim, como nos estudos anteriores, a interface foi tratada como uma curva fechada e a equação de equidistribuição usada corresponde à Eq. (3.19).

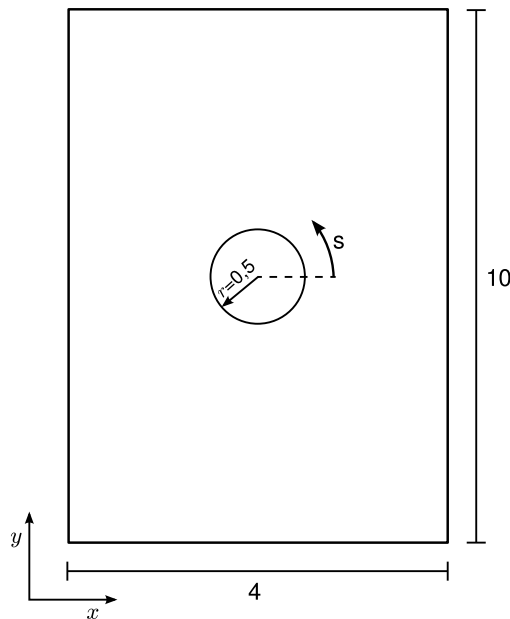


Figura 5.21 – Configuração geométrica para o teste de efeito Marangoni.

Como há uma variação de concentração de surfactante na interface e como a ten-

são superficial é função da concentração de surfactante, ocorre o efeito Marangoni e a bolha se moverá. A direção do movimento da bolha, na ausência de outras forças, depende da direção do gradiente de concentração de surfactante na interface. Na Fig. 5.22 (a), tem-se a distribuição de surfactante ao longo do tempo. Observe que para o instante inicial tem-se uma maior concentração na parte inferior da bolha ($\theta = 3\pi/2$) aproximadamente para $s = 2,36$ e uma menor concentração na parte superior ($\theta = \pi/2$), aproximadamente em $s = 0,78$, isso resulta em um gradiente de tensão e a força de Marangoni será responsável pelo movimento da bolha. Com a evolução temporal, devido principalmente à difusão, a concentração de surfactante tende a se uniformizar.

Na Figura 5.23 (a), tem-se a bolha para os instantes inicial e final. Observa-se que houve um deslocamento da interface na direção vertical. Isso corresponde ao comportamento esperado porque o gradiente da tensão superficial também se dá na vertical. A Fig. 5.23 (b) mostra a interface para o instante final com linhas de corrente que representam o movimento relativo entre a interface e o fluido ambiente. Observe que as linhas de corrente têm sentido ascendente, indicando que a interface está descendo.

Nas Figuras 5.24 (a) e (b), têm-se o campo das componentes de velocidade para o tempo final. Observa-se que para o campo da componente vertical da velocidade, Fig. 5.24 (b), tem-se nas regiões superior e inferior à bolha velocidades negativas, enquanto que nas laterais tem-se velocidades positivas, indicando a existência de recirculações. Para o campo apresentado na Fig. 5.24 (a), observa-se, principalmente na região inferior da bolha, o desvio do fluido para as vizinhanças.

Como mencionado, este teste foi descrito por Zhang, Eckmann e Ayyaswamy (2006), porém, nem todos os dados para simulação foram fornecidos pelos autores. Por isso, não é possível a comparação integral dos resultados aqui apresentados e resultados dos referidos autores.

5.4 Simulações para duas bolhas submetidas a um escoamento cisalhante: interface limpa x contaminada

Para este teste, consideraram-se inicialmente duas bolhas circulares com raio igual 1 e com centros localizados em $(-1,7; 0,25)$ e $(1,7; -0,25)$ imersas em um fluido cisalhante, de

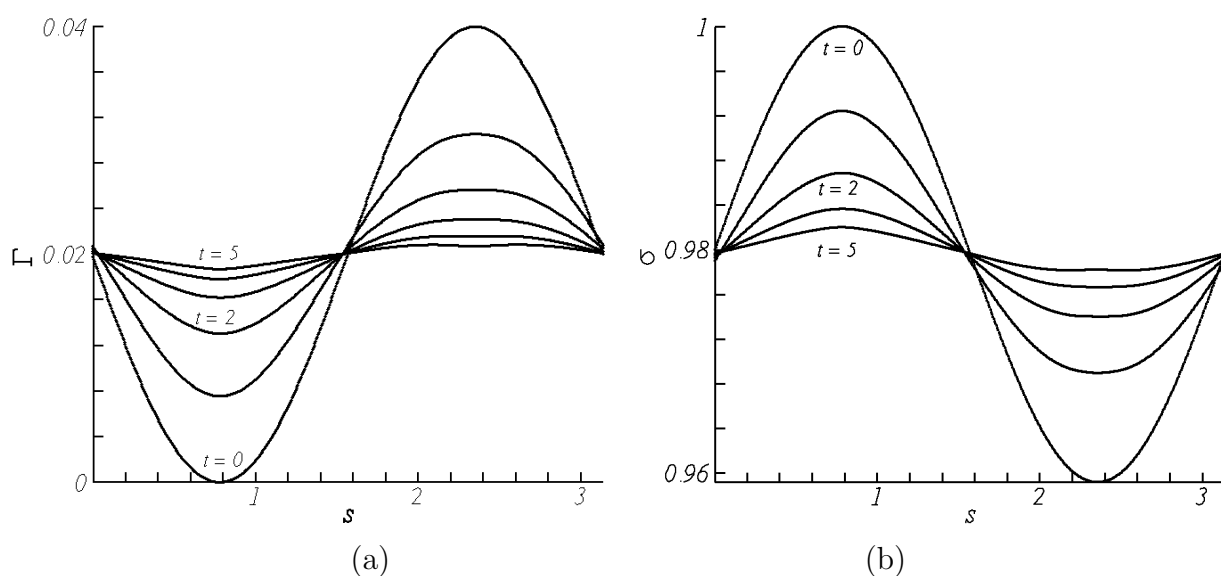


Figura 5.22 – Teste de efeito Marangoni. Distribuição de (a) concentração de surfactante e (b) tensão superficial ao longo da interface para os tempos $t = 0, 1, 2, 3, 4$ e 5 .

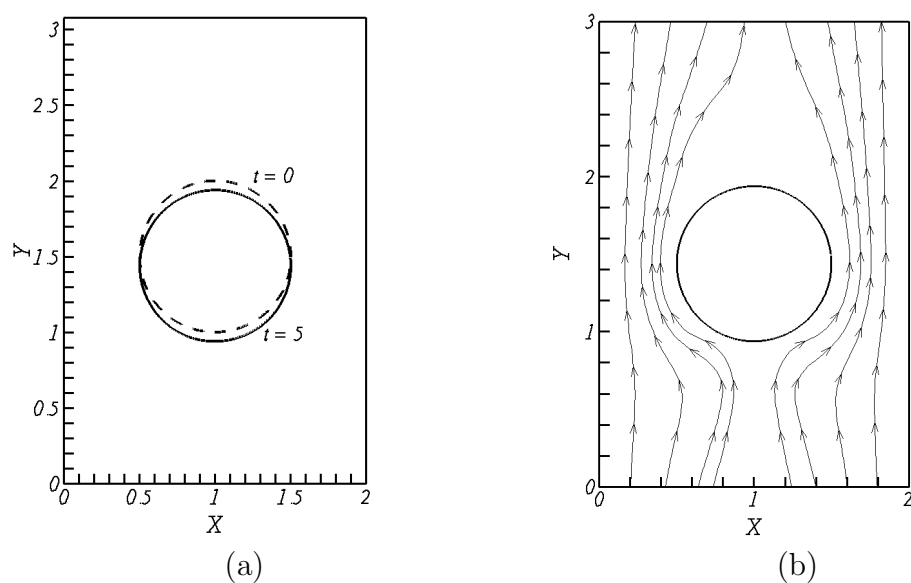


Figura 5.23 – Teste de efeito Marangoni, (a) localização da bolha para os tempos $t = 0$ e $t = 5$, (b) Interface e linhas de corrente para o tempo final $t = 5$.

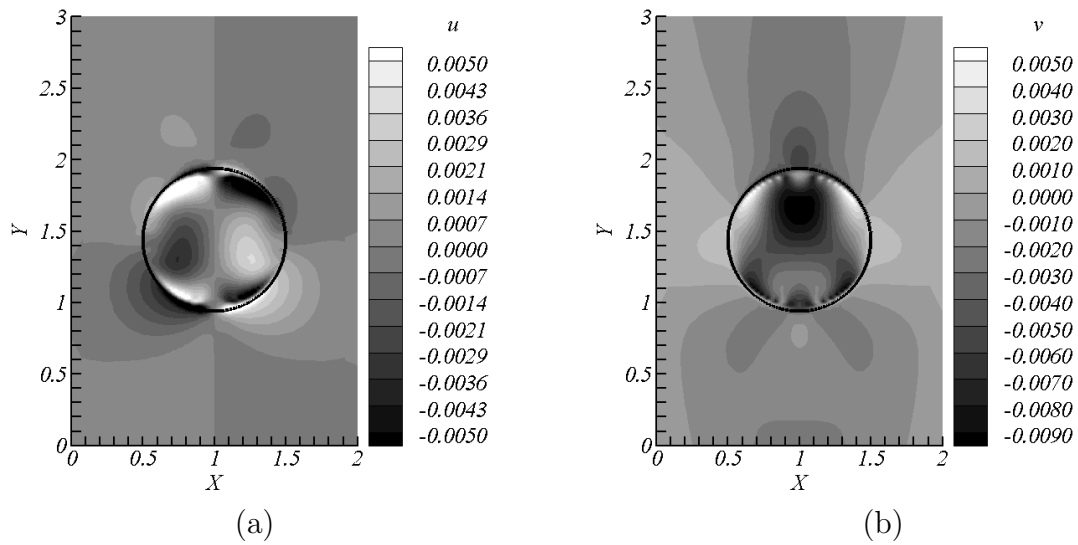


Figura 5.24 – Teste de efeito Marangoni. Campo para a componente (a) u e (b) v de velocidade para $t = 5$.

velocidade $\mathbf{u} = ye_y$, onde e_y é o vetor unitário na direção da coordenada y . A configuração geométrica inicial para este problema está mostrada na Fig. 5.25. O objetivo deste teste é de estudar a influência da interação entre bolhas na distribuição e evolução da concentração de surfactante sobre a interface. Este teste foi apresentado por Xu et al. (2006), onde foi resolvido empregando a modelagem de Stokes, por isso, a comparação dos resultados aqui obtidos e os resultados dos referidos autores não foi objetivo deste teste aqui realizado.

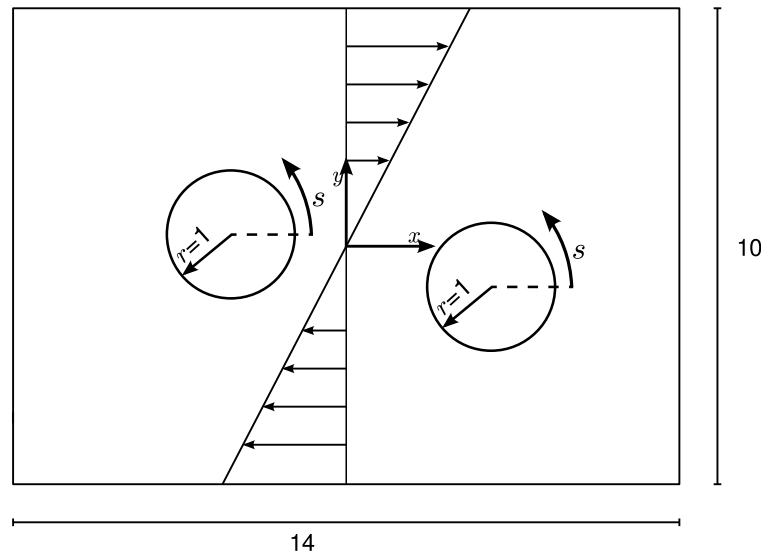


Figura 5.25 – Configuração geométrica para as simulações de duas bolhas submetidas a um escoamento cisalhante.

O domínio considerado foi de $[-7;7] \times [-5;5]$ e a malha base utilizada foi 112×80 contendo 4 níveis de refinamento. Os dados empregados foram $\rho_d/\rho_c = 1$ e $\mu_d/\mu_c = 1$ e $\sigma_c = 1$

e os parâmetros adimensionais $Re = 0,04$ e $Ca = 0,5$. No instante inicial, a concentração de surfactante foi uniforme e igual 1, $\Gamma(s, 0) = 1$. Foram realizados dois testes, com bolha limpa ($\beta = 0$) e com bolha contaminada onde utilizou-se $\beta = 0,02$ e $Pe = 10$. Como nos casos anteriores, para este estudo, a interface foi tratada como uma curva fechada e, portanto, a equação de equidistribuição (Eq. 3.19) foi usada. Utilizou-se condição de contorno de Dirichlet com $v = 0$ e $u = -5$ para a parede sul, $v = 0$ e $u = 0$ para a parede norte e para as paredes leste e oeste $v = 0$ e $u = y$, para $-5 \leq y \leq 5$. Para este teste a equação de estado em sua forma não linear foi empregada (Eq. 3.61).

A evolução das interfaces para os tempos $t = 0; 2,28; 4,68; 6,97; 9,36$ e 12 está mostrada na Fig. 5.26. As bolhas limpas estão representadas pela linha pontilhada, enquanto que as bolhas contaminadas pela linha contínua. As bolhas vão se aproximando e deformando devido ao escoamento e as bolhas contaminadas, devido a presença do surfactante, apresentam uma deformação ligeiramente maior. Observa-se que com a aproximação das bolhas formam-se leves ondulações na interface próximo à região de contato, como mostra a Fig. 5.26 (e).

Nas Figuras 5.27 e 5.28, tem-se o campo para as componentes de velocidade u e v para os tempos $t = 2,28; 6,97; 9,36$ e 12 para o caso onde se tem as bolhas limpas. Observa-se que na fase de interação entre as bolhas, é onde o campo de velocidade vertical atinge os maiores valores e na fase de afastamento, esses valores retornam ao valores da fase aproximação. O campo de pressão para estes tempos estão mostrados na Fig. 5.29. Assim como no caso para uma bolha, o salto de pressão é maior nas regiões de alta curvatura. Também nessa região é onde se encontram os maiores valores de intensidade de vorticidade, como mostra a Fig. 5.30. Também para os campos de vorticidade, a intensidade aumenta na fase de interação entre as bolhas e diminui com o afastamento das bolhas. Os campo para as componentes de velocidade, pressão e vorticidade para o tempo final $t = 12$ para o caso contaminado são mostrados na Fig. 5.31. Observa-se que estes campos são semelhantes aos campos para a bolha livre de contaminantes.

A evolução da distribuição de surfactante sobre as interfaces para o caso onde se tem bolhas contaminadas para os tempos $t = 0; 2,28; 4,68; 6,97; 9,36$ e 12 estão apresentados na Fig. 5.32. Durante a fase de aproximação, Fig. 5.32 (b) e (c), o surfactante é transportado para as regiões de alta curvatura, como acontece para os casos onde se tem uma única bolha imersa.

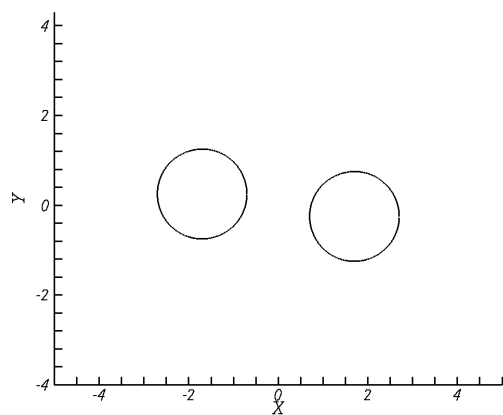
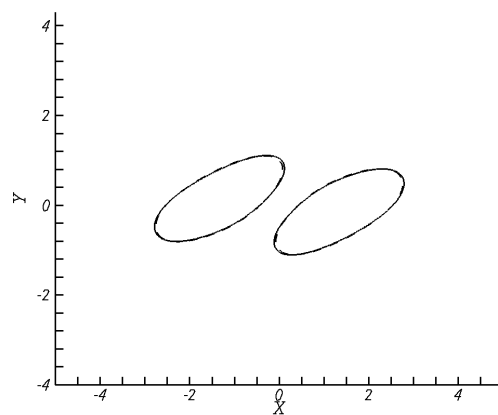
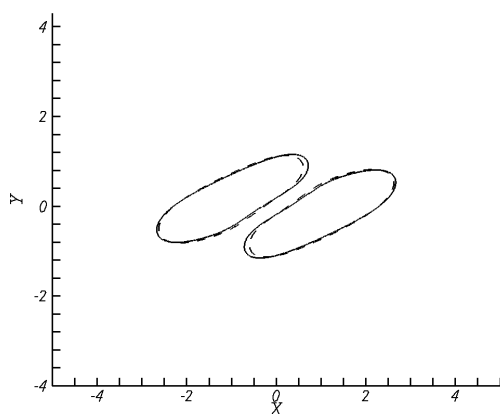
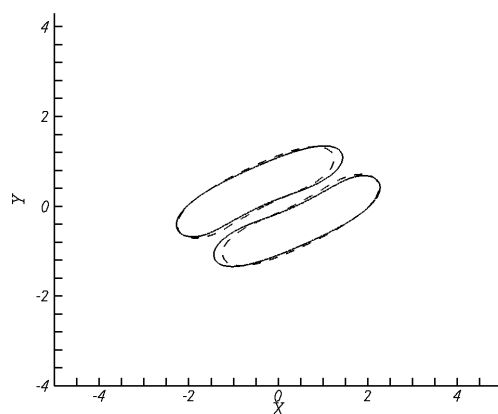
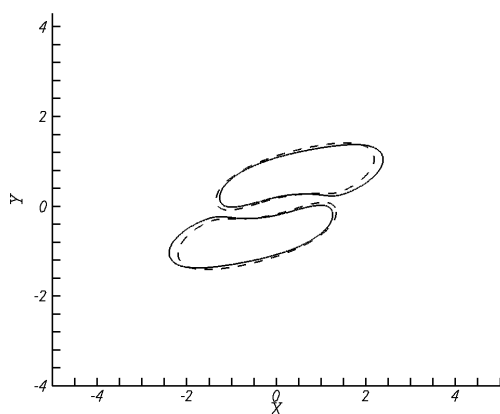
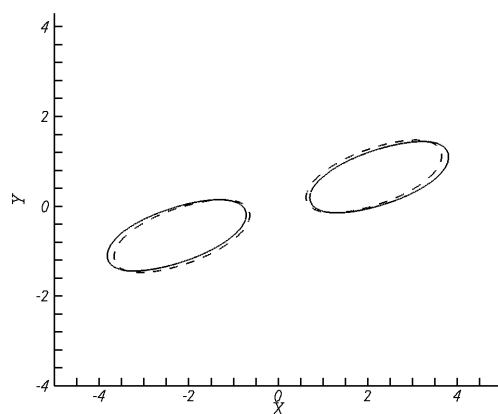
(a) $t = 0$ (b) $t = 2,28$ (c) $t = 4,68$ (d) $t = 6,97$ (e) $t = 9,36$ (f) $t = 12,0$

Figura 5.26 – Evolução das interfaces em um fluido cisalhante. Linha pontilhada corresponde a bolha livre de surfactante e linha contínua corresponde a bolha contaminada.

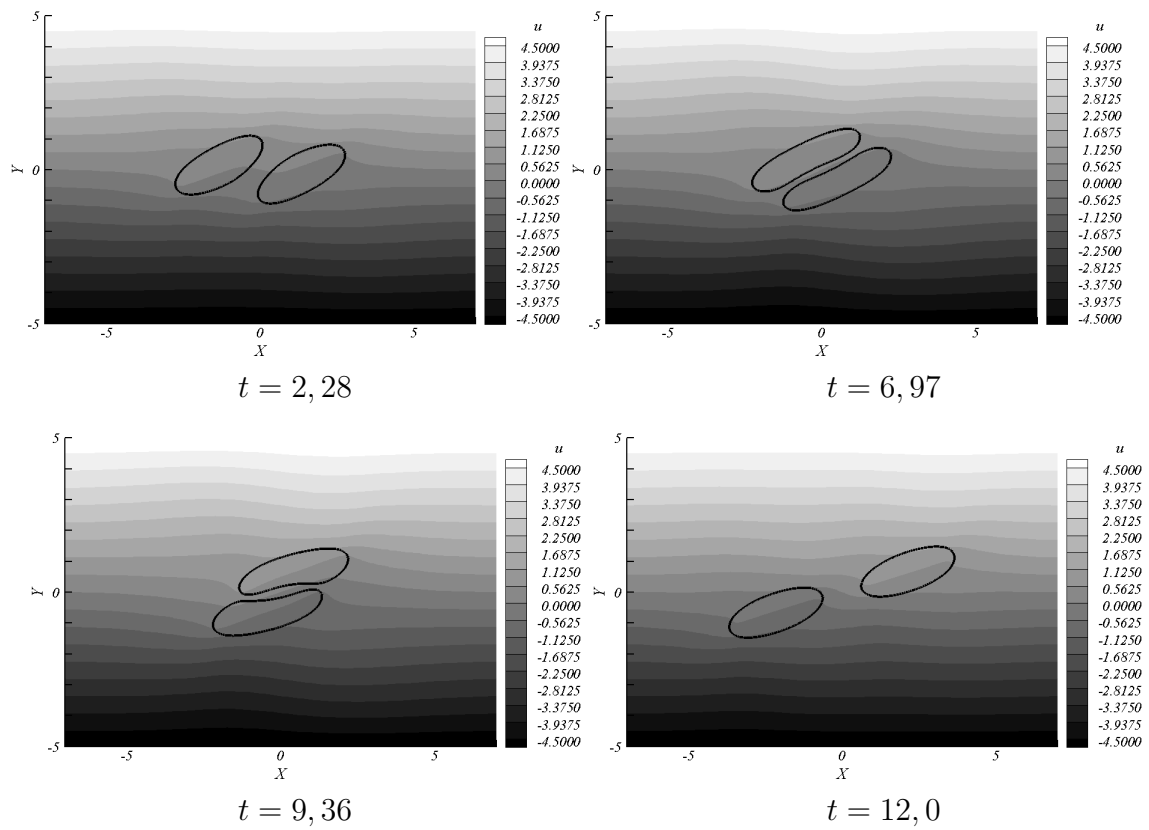


Figura 5.27 – Campo da componente horizontal u de velocidade para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.

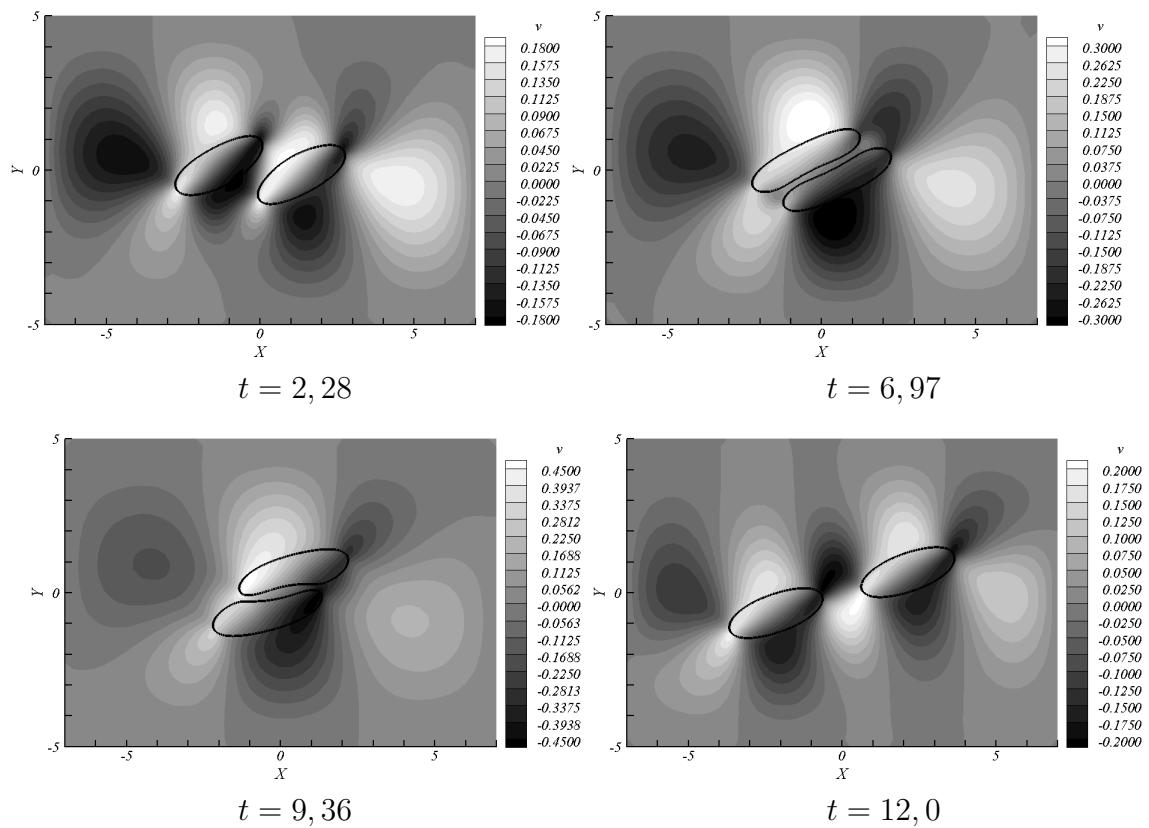


Figura 5.28 – Campo da componente vertical v de velocidade para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.

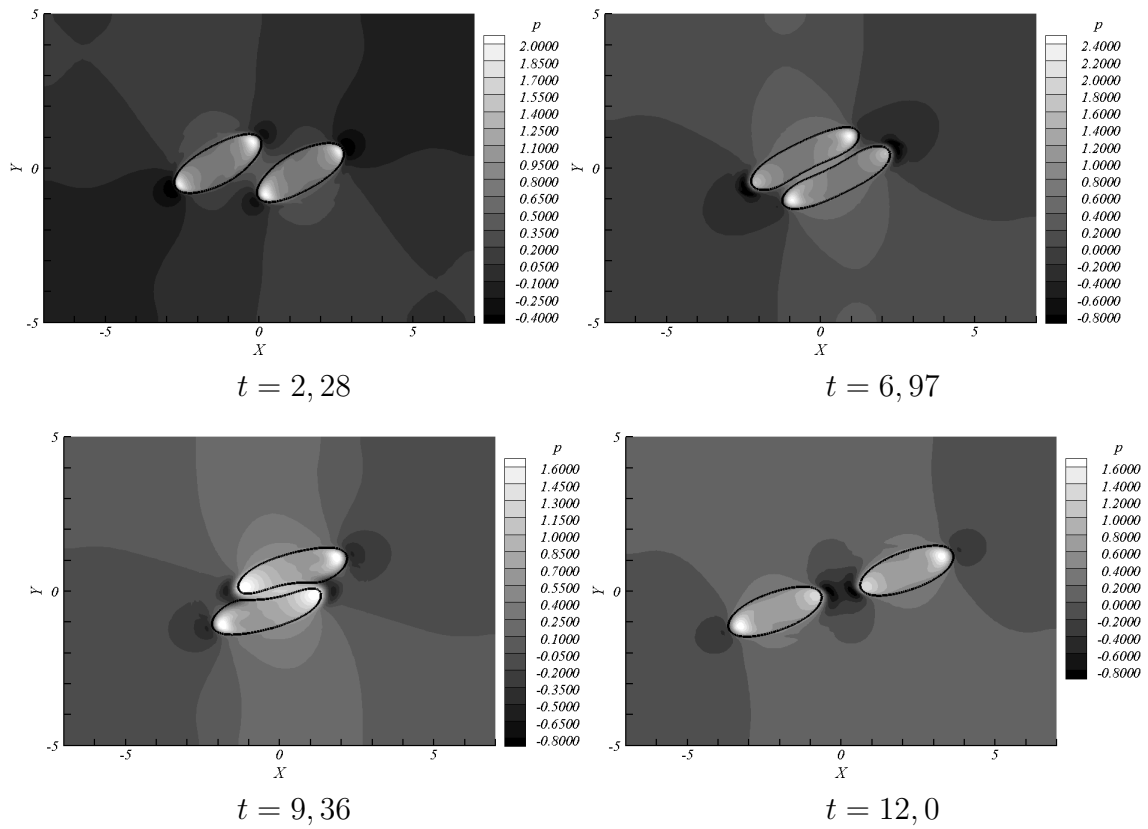


Figura 5.29 – Campo de pressão para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.

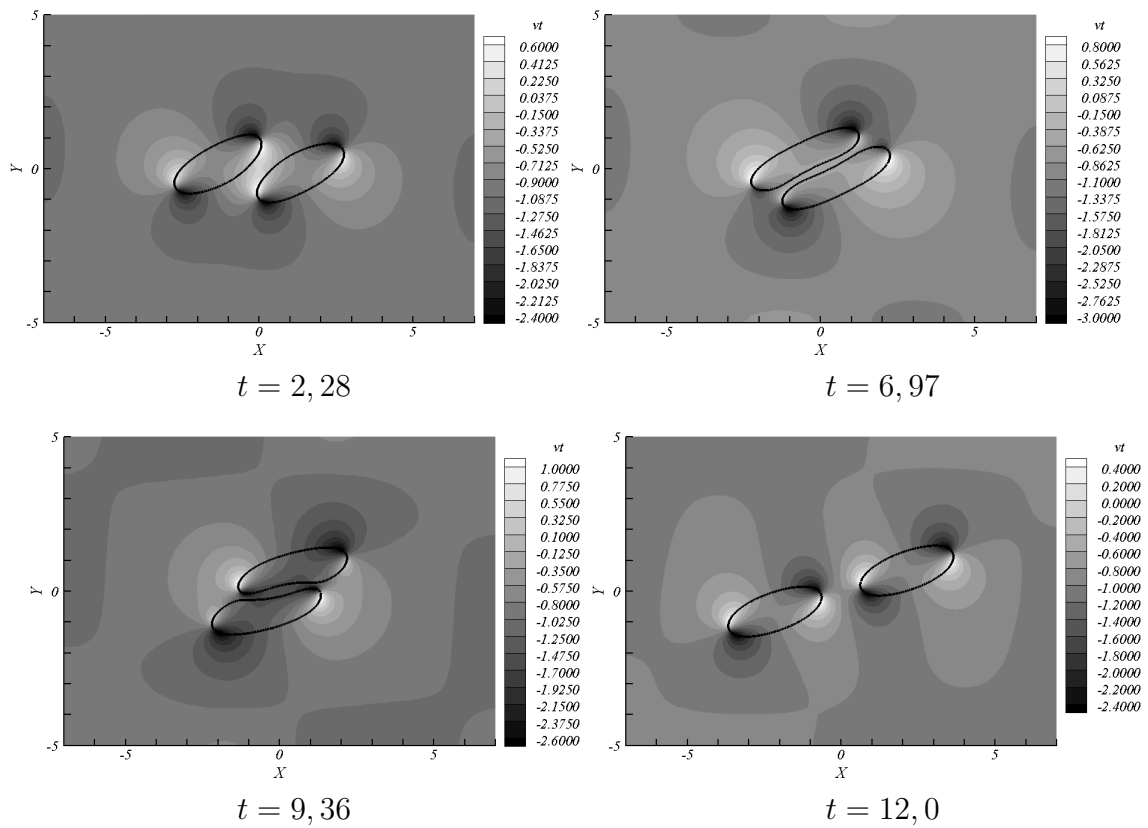


Figura 5.30 – Campo de vorticidade para duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante para bolhas sem contaminantes.

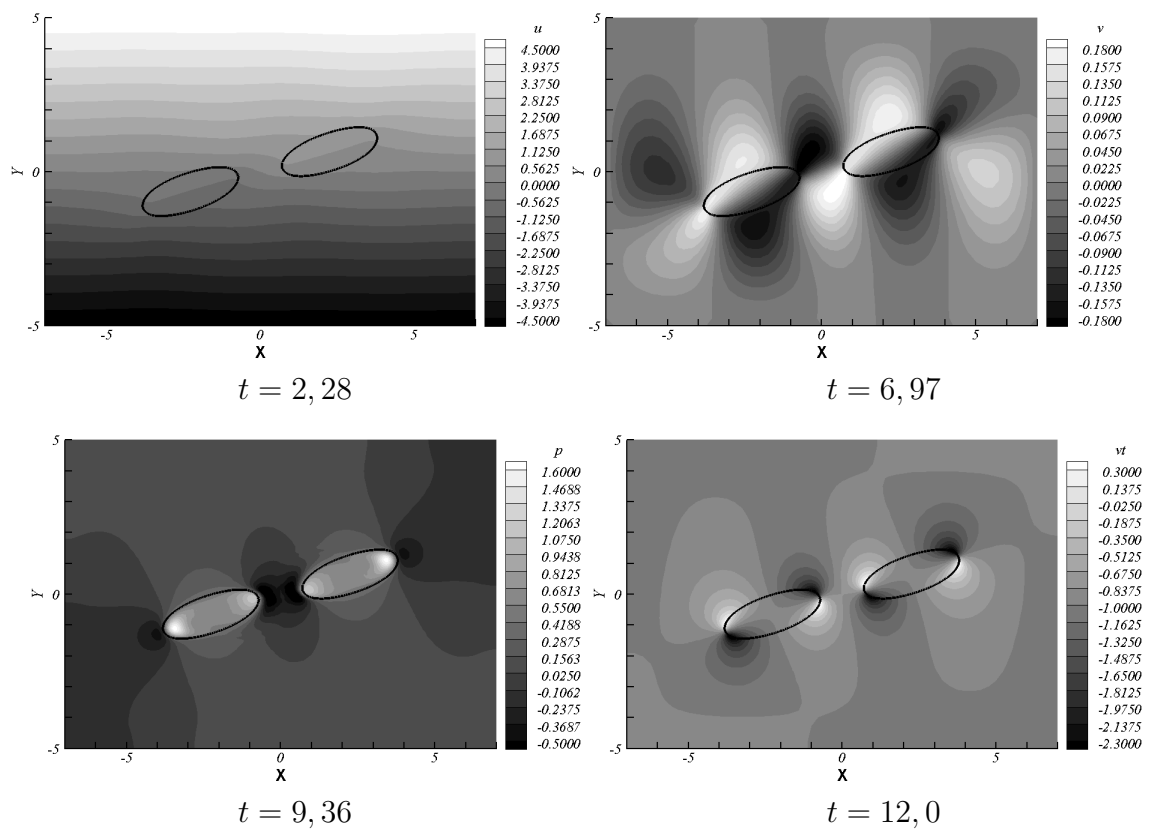


Figura 5.31 – Componentes de velocidade u (a) e v (b), campo de pressão (c) e vorticidade (d) para o tempo final $t = 12$ para a simulação de duas bolhas contaminadas submetida à um escoamento cisalhante.

Durante a fase de interação entre as bolhas, devido à proximidade e às leves ondulações que aparecem na interface, o surfactante é também transportado para as regiões onde as interfaces estão mais próximas, isso pode ser visualizado para os tempos $t = 6,97$ e $t = 9,36$ (Fig. 5.32 (d) e (e)). Quando as bolhas começam a se separar, Fig. 5.32 (f), o surfactante se concentra novamente nas regiões de alta curvatura. Os gráficos correspondentes para a tensão superficial estão mostrados na Fig. 5.33. Como esperado, a tensão tem comportamento inverso ao da concentração de surfactante. Na fase de aproximação, Fig. 5.32 (b) e (c), a tensão superficial é menor nas regiões de alta curvatura. Na fase de interação entre as bolhas, Fig. 5.32 (d) e (e), as regiões de maior proximidade entre as bolhas, assim como as regiões de alta curvatura, são onde tem-se os menores valores para tensão superficial.

5.5 Estudo de linhas de contato

Como já mencionado na introdução, o estudo de problemas que envolvem a interação entre fluidos e superfícies sólidas é de grande importância devido aos diversos processos onde estes escoamentos aparecem. Na Figura 5.34, tem-se uma gota apoiada em uma superfície sólida. Observe que existe a interação entre as três fases presentes no escoamento, nos chamados *pontos triplos de contato*. A linha comum para as fases (líquida/ gasosa/ sólida) é chamada de linha de contato para o caso tridimensional e de pontos de contato para o caso bidimensional. Na Figura 5.34, pode-se observar também o ângulo de contato θ . Este ângulo é formado pela interface entre os fluidos e a superfície sólida. Como mostra a Fig. 5.34, o ângulo de contato é o ângulo resultante entre a linha tangente à interface e a linha paralela à superfície do sólido. Este ângulo pode ser dito dinâmico, quando a linha ou ponto de contato estiver se movimentando, ou estático (θ_e), quando o sistema estiver em equilíbrio.

Na Figura 5.35, têm-se três possíveis comportamentos para uma gota em contato com uma superfície sólida. Para o caso A, a gota se espalha até atingir um ângulo estático $\theta_e > 90$ e esta gota é dita não molhante. Para o caso B, a gota se espalha até atingir um ângulo $\theta_e < 90$, ela é, então, dita molhante. Para o caso C, a gota se espalha completamente, recobrimdo toda a superfície C e uma fina camada de fluido molhante é formada, o ângulo de contato é $\theta_e \approx 0$. No presente trabalho, o caso de interesse é o de uma gota molhante.

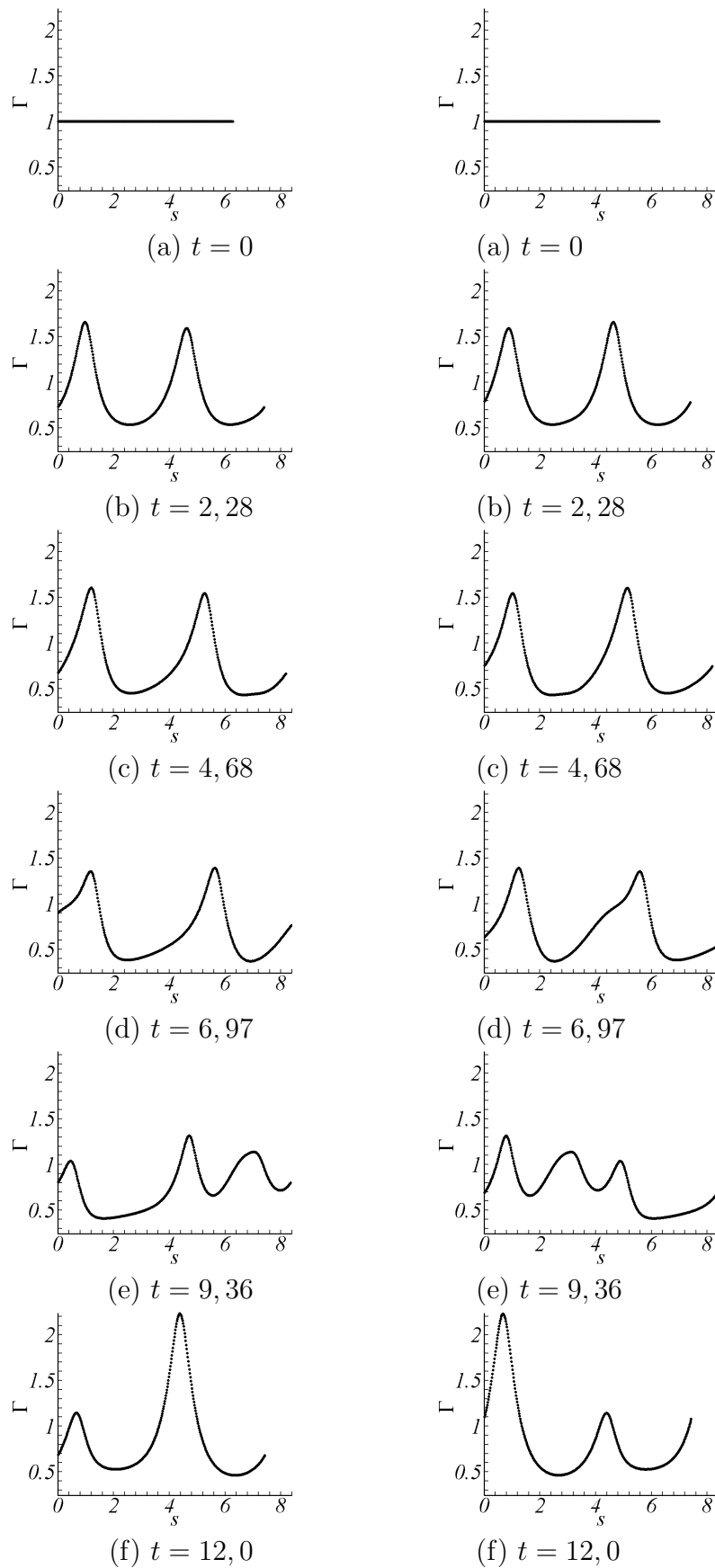


Figura 5.32 – Distribuição de concentração de surfactante para simulação de duas bolhas contaminadas imersas em um escoamento cisalhante. Bolha localizada inicialmente no ponto $(-1,7; 0,25)$ - coluna da direita - e bolha inicialmente localizada no ponto $(1,7; -0,25)$ - coluna da esquerda

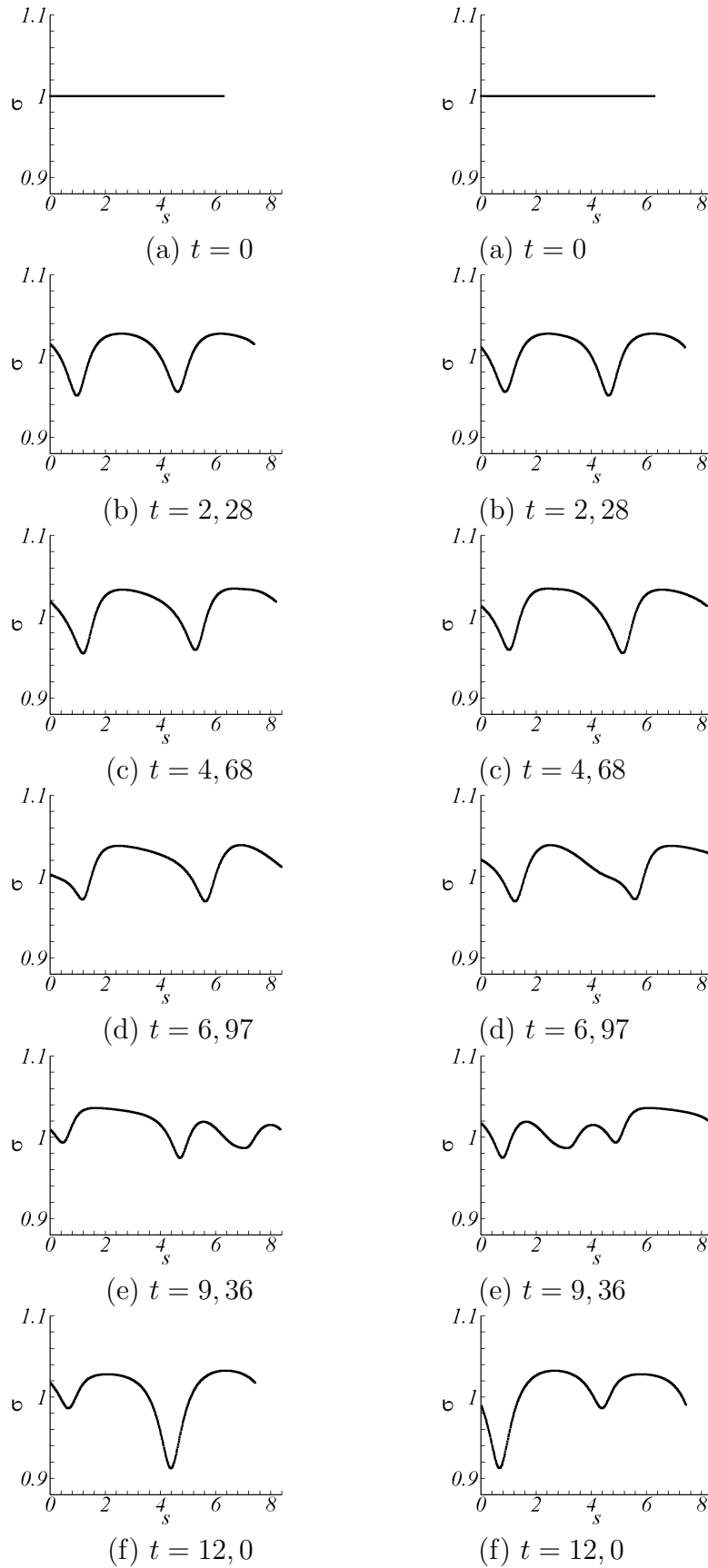


Figura 5.33 – Distribuição de tensão superficial para simulação de duas bolhas contaminadas imersas em um escoamento cisalhante. Bolha localizada inicialmente no ponto $(-1,7; 0,25)$ - coluna da direita - e para bolha inicialmente localizada no ponto $(1,7; -0,25)$ - coluna da esquerda para os tempos

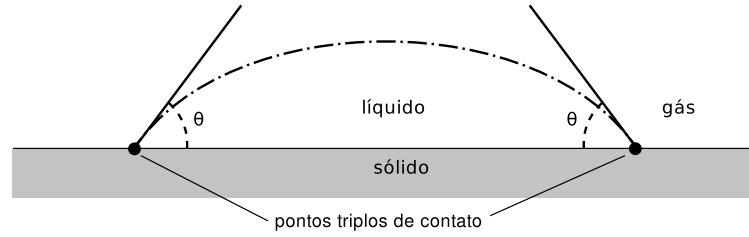


Figura 5.34 – Diagrama esquemático de uma gota líquida em contato com uma superfície sólida.

Segundo Silva (2010), o ângulo de contato estático é uma medida utilizada para quantificar a afinidade entre um líquido e uma superfície sólida. Quando $\theta_e \approx 0$, a superfície sólida é dita hidrofílica e caso contrário é dita hidrofóbica.

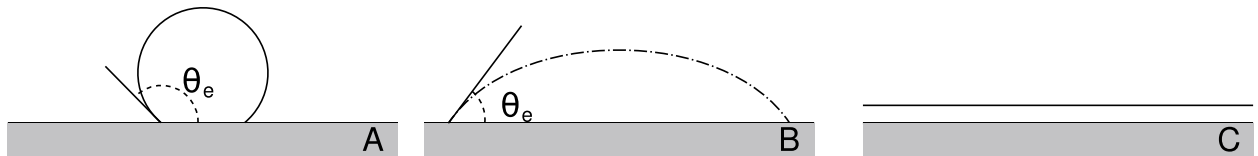


Figura 5.35 – Possíveis ângulos de contato entre uma gota em contato com uma superfície sólida.

A principal dificuldade na simulação destes escoamentos é devido ao fato que as equações de Navier-Stokes para ambos os fluidos combinadas com condições de não-deslizamento, dão origem a uma singularidade das tensões na linha de contato entre o fluido e o sólido, obtendo-se uma força infinita para mover a linha de contato (SILVA, 2010 e SPELT, 2005). Nas últimas três décadas, muito esforço tem sido feito na tentativa de resolver esta incompatibilidade física. O estudo através de simulações de dinâmica molecular mostra que o fluido de fato desliza próximo a linha de contato (QUIAN; WANG; SHENG, 2003). Para resolver esta singularidade, como em Lai, Tseng e Huang (2010), no presente trabalho aplica-se a condição de deslizamento de Navier na parede onde se tem as linhas de contato,

$$u = \eta \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (5.23)$$

onde η é o comprimento de deslizamento. Aqui empregou-se $\eta = dx/4$, sendo dx referente à malha mais fina. E condição homogênea de Dirichlet para a componente vertical v é utilizada ($v = 0$).

A condição da Eq. (5.23) é a condição de contorno de fricção, ou seja, na interface sólido líquido, as velocidades tangenciais do fluido são proporcionais à tensão tangencial corres-

pondente (SILVA, 2010). Dependendo da escolha de η , diferentes condições de contorno são obtidas:

- não escorregamento (*no slip*), se $\eta = 0$;
- escorregamento com atrito, se $0 < \eta < \infty$;
- escorregamento livre (*free slip*), se $\eta = \infty$.

Um esquema mostrando estas diferentes condições de contorno é apresentada na Fig. 5.36. O comprimento de deslizamento η pode ser interpretado como a distância fictícia à superfície sólida como mostra a Fig. 5.36 (b).

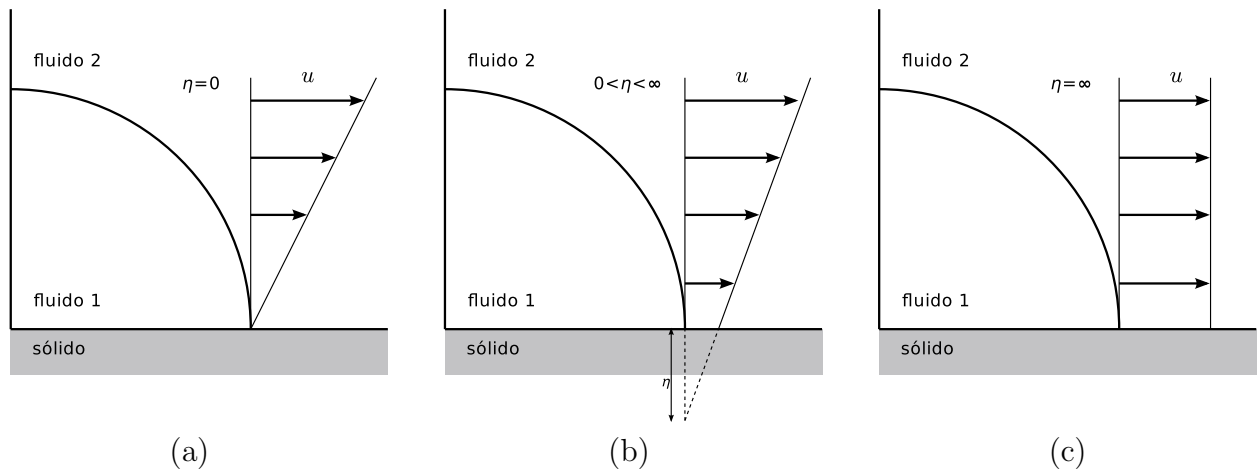


Figura 5.36 – Interpretação do comprimento de escorregamento η . Adaptado de Ganesan e Tobiska, (2009).

Para a configuração em estudo, considera-se o fluido 1 sendo a gota e o fluido 2 o fluido ambiente. Ambos os fluidos estão em contato com um substrato sólido de maneira que os pontos de contato estejam na parede sul do domínio, como mostra a Fig. 5.37. Observe que para o ponto triplo de contato têm-se três diferentes tensões superficiais envolvidas. Na ausência de outras forças externas e quando a linha de contato está estática, as forças de superfícies atuantes na linha de contato segue a condição de Young,

$$\sigma_{s2} = \sigma_{s1} + \sigma \cos \theta_e, \quad (5.24)$$

onde σ_{s1} , σ_{s2} e σ correspondem a tensão superficial entre o sólido e o fluido 1, sólido e fluido 2 e da interface fluido-fluido, respectivamente. Quando a interface está em movimento, é preciso

modelar o escoamento e a dinâmica das linhas de contato.

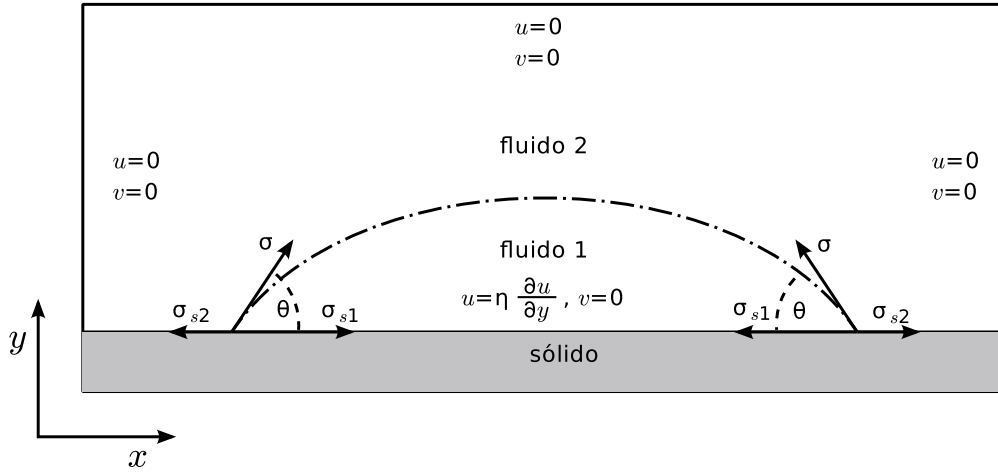


Figura 5.37 – Configuração geométrica para as simulações de uma meia gota apoiada em uma superfície sólida.

A força responsável pelo movimento dos pontos de contato é exercida somente ao longo da direção tangencial do substrato sólido, ou seja, na direção x (Fig. 5.37) e é, principalmente, devida ao desbalanço de força de Young (LAI; TSENG; HUANG, 2010),

$$F_{cl} = \sigma_{s2} - \sigma_{s1} + \sigma \cos \theta, \quad (5.25)$$

onde θ é o ângulo de contato dinâmico. Esta força atua somente nos pontos triplos de contato e para os outros pontos da interface a força interfacial é calculada, como nos casos anteriores, empregando a expressão,

$$\mathbf{F} = \frac{\partial}{\partial s}(\sigma \mathbf{t}). \quad (5.26)$$

De forma discretizada tem-se

$$(F_x)_k = \frac{\sigma_{k+1}(t_x)_{k+1} - \sigma_{k-1}(t_x)_{k-1}}{2\Delta s}, \quad \text{para } k = 2, 3, \dots, n_l - 1, \quad (5.27)$$

$$(F_y)_k = \frac{\sigma_{k+1}(t_y)_{k+1} - \sigma_{k-1}(t_y)_{k-1}}{2\Delta s}, \quad \text{para } k = 2, 3, \dots, n_l - 1, \quad (5.28)$$

$$(F_x)_k = \sigma_{s2} - \sigma_{s1} + \sigma_k \cos \theta_k, \quad \text{para } k = 1, \quad (5.29)$$

$$(F_x)_k = -(\sigma_{s2} - \sigma_{s1} + \sigma_k \cos \theta_k), \quad \text{para } k = n_l, \quad (5.30)$$

$$(F_y)_k = 0, \quad \text{para } k = 1, n_l, \quad (5.31)$$

onde $\cos \theta = -\mathbf{t} \cdot \mathbf{e}_1$, onde $\mathbf{e}_1 = (1, 0)$. Note que a multiplicação $\mathbf{t} \cdot \mathbf{e}_1$ corresponde à projeção do vetor tangente na direção x , assim, tem-se $\cos \theta_k = -(t_x)_k$ que, aplicada para os pontos $k = 1$ e $k = n_l$, foi calculada empregando o esquema de primeira ordem progressiva e atrasada, respectivamente. Desta forma, evita-se utilizar os pontos fantasmas $k = 0$ e $k = n_l + 1$,

$$\theta_k = -(t_x)_k = \frac{X_{k+1} - X_k}{\sqrt{(X_{k+1} - X_k)^2 + (Y_{k+1} - Y_k)^2}}, \quad \text{para } k = 1, \quad (5.32)$$

$$\theta_k = -(t_x)_k = \frac{X_k - X_{k-1}}{\sqrt{(X_k - X_{k-1})^2 + (Y_k - Y_{k-1})^2}}, \quad \text{para } k = n_l. \quad (5.33)$$

Para este problema, a interface é tratada como uma curva aberta e, para tal, emprega-se a equidistribuição segundo a Eq. (3.20). Estudou-se aqui dois casos: gota limpa e contaminada e, para este último caso, empregou-se a equação de estado não linear (Eq. 3.61).

O domínio considerado é de $\Omega = [-1, 5; 1, 5] \times [0; 1]$, e para configuração inicial tem-se uma meia gota de raio 0,5 apoiada na parede sul do domínio, como mostra a Fig 5.37. Inicialmente ambos os ângulos de contato, direito e esquerdo, são $\pi/2$ e tanto o fluido 1, como também o fluido 2 encontram-se em repouso. Para o caso contaminado, a concentração inicial de surfactante foi uniforme com $\Gamma(s, 0) = 1$.

As razões das propriedades físicas empregadas foram $\rho_d/\rho_c = 1$ e $\mu_d/\mu_c = 1$ e os parâmetros adimensionais são $Re = 10$ e $Ca = 0,1$. Para a gota contaminada, empregou-se $\beta = 0,3$ e $Pe = 20$. A tensão superficial para a gota limpa é de $\sigma_c = 1$ e a tensão superficial entre o sólido e o fluido 1 é $\sigma_{s1} = 0,5$ e entre o sólido e o fluido 2 $\sigma_{s2} = 1$, portanto, pela equação de Young, Eq. (5.24), o ângulo de contato estático é $\theta_e = \pi/3$. A malha base empregada foi de 32×96 contendo 4 níveis de refinamento e a gravidade não foi considerada.

Note que para este problema a única força responsável pelo movimento da interface é a força nos pontos triplos de contato. Com a evolução temporal, o ângulo de contato tende a se aproximar do ângulo de equilíbrio, com isso, a força nos ponto de contato tende a desaparecer e a gota chega ao equilíbrio.

A Figura 5.38 mostra a evolução temporal da interface limpa (linha pontilhada) e contaminada (linha contínua). Como esperado, com o avanço no tempo, ambas as gotas se espalham sobre o sólido até atingir o equilíbrio. Comparando as duas interfaces, observa-se que a bolha

contaminada se espalha mais que a bolha limpa. Este comportamento também foi observado por Lai, Tseng e Hung (2010). Nas Fig. 5.39 e 5.40 tem-se a interface limpa e contaminada, respectivamente, para o presente trabalho e o trabalho de Lai, Tseng e Hung (2010). Por essas figuras observa-se que os resultados são qualitativamente semelhantes. Como no caso estudado na Seção 5.2.2, no trabalho de Lai, Tseng e Hung (2010), os parâmetros de entrada foram expressos de forma adimensional e o artigo não informa como e quais os parâmetros usados para a adimensionalização (comprimento e velocidade característicos). Aqui empregou-se parâmetros que combinados levariam aos mesmos valores de números adimensionais descritos no artigo. Novamente, acredita-se que uma das razões para a diferença quantitativa entre os resultados seja devido às diferenças nos parâmetros de adimensionalização como também outras diferenças na metodologias também podem ser responsáveis por essa diferença nos resultados. No trabalho de Lai, Tseng e Hung (2008), empregou-se passo de tempo fixo e malha regular uniforme, diferindo do presente trabalho, onde utilizou-se passo de tempo variável e malha adaptativa. Existem também diferenças no esquema de discretização temporal das equações de Navier-Stokes. No presente trabalho empregou-se o esquema SBPF (*Semi Backward Difference Formula*), enquanto no trabalho de Lai, Tseng e Hung (2008) empregou-se o esquema Crank-Nicolson..

O ângulo de contato para os dois casos estão mostrados na Fig. 5.41. Observe que o ângulo de contato de equilíbrio numérico para a gota limpa é de aproximadamente $\pi/3$, enquanto que para a gota contaminada é de aproximadamente $\pi/4$. Comparando, para a gota limpa, o ângulo de contato numérico e analítico, a diferença é de aproximadamente 1,3%. Resultados semelhantes foram encontrados por Lai, Tseng e Huang (2010). Sendo o surfactante insolúvel, ele afeta diretamente a tensão superficial fluido-fluido (σ). Portanto, a diferença $\sigma_{s2} - \sigma_{s1}$ não muda. Assim tem-se, pela equação de Young,

$$\cos \theta_e = \frac{\sigma_{s2} - \sigma_{s1}}{\sigma}, \quad (5.34)$$

e se σ é menor devido a presença de surfactante, então,

$$\theta_{contaminada} = \arccos \left(\frac{\sigma_{s2} - \sigma_{s1}}{\sigma} \right) < \pi/3. \quad (5.35)$$

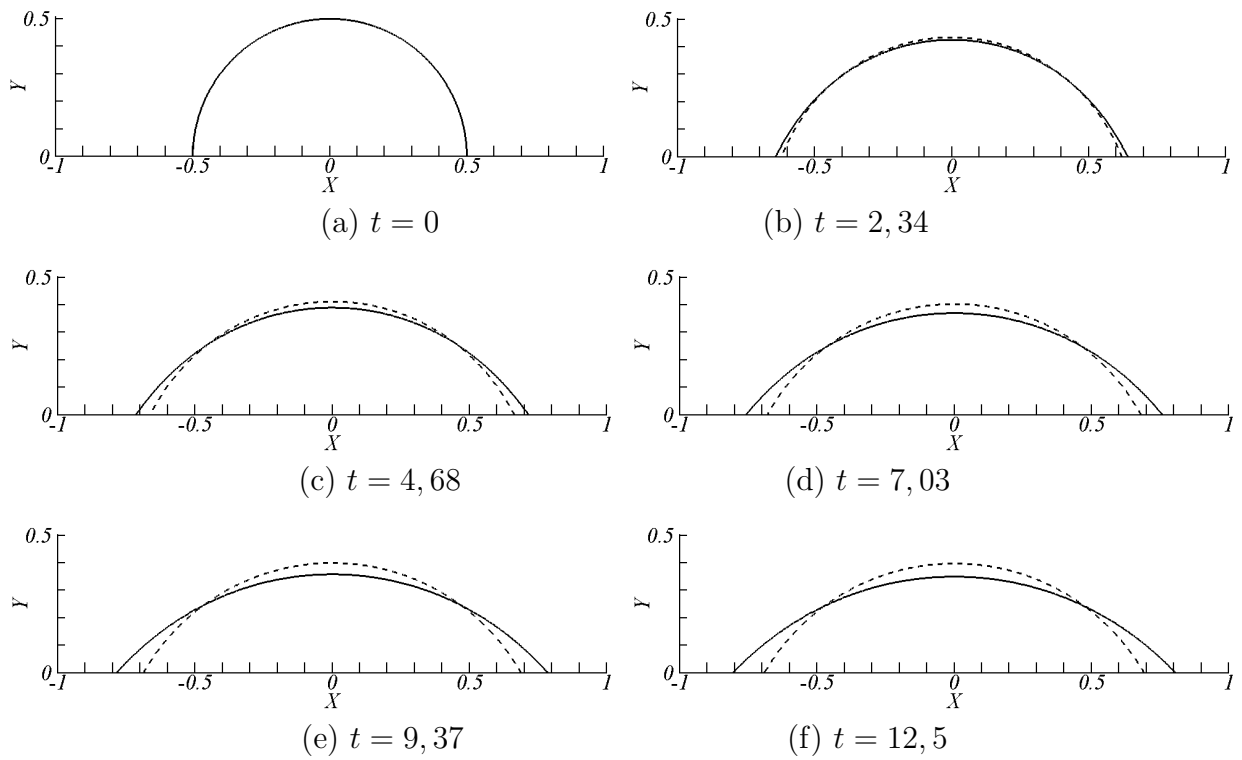


Figura 5.38 – Evolução da interface para as simulações de uma meia gota limpa ($\beta = 0$, linha pontilhada) e contaminada ($\beta = 0.3$, linha contínua) apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho.

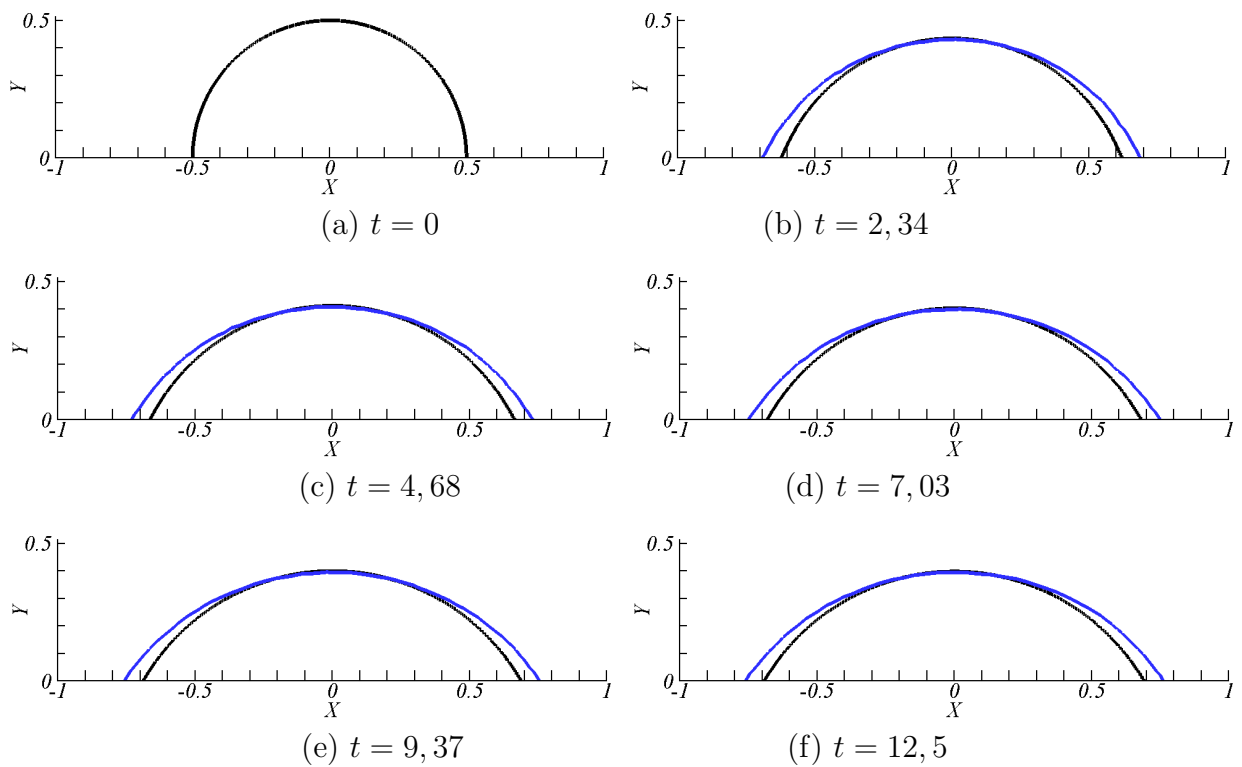


Figura 5.39 – Evolução da interface para as simulações de uma meia gota limpa ($\beta = 0$) apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (—).

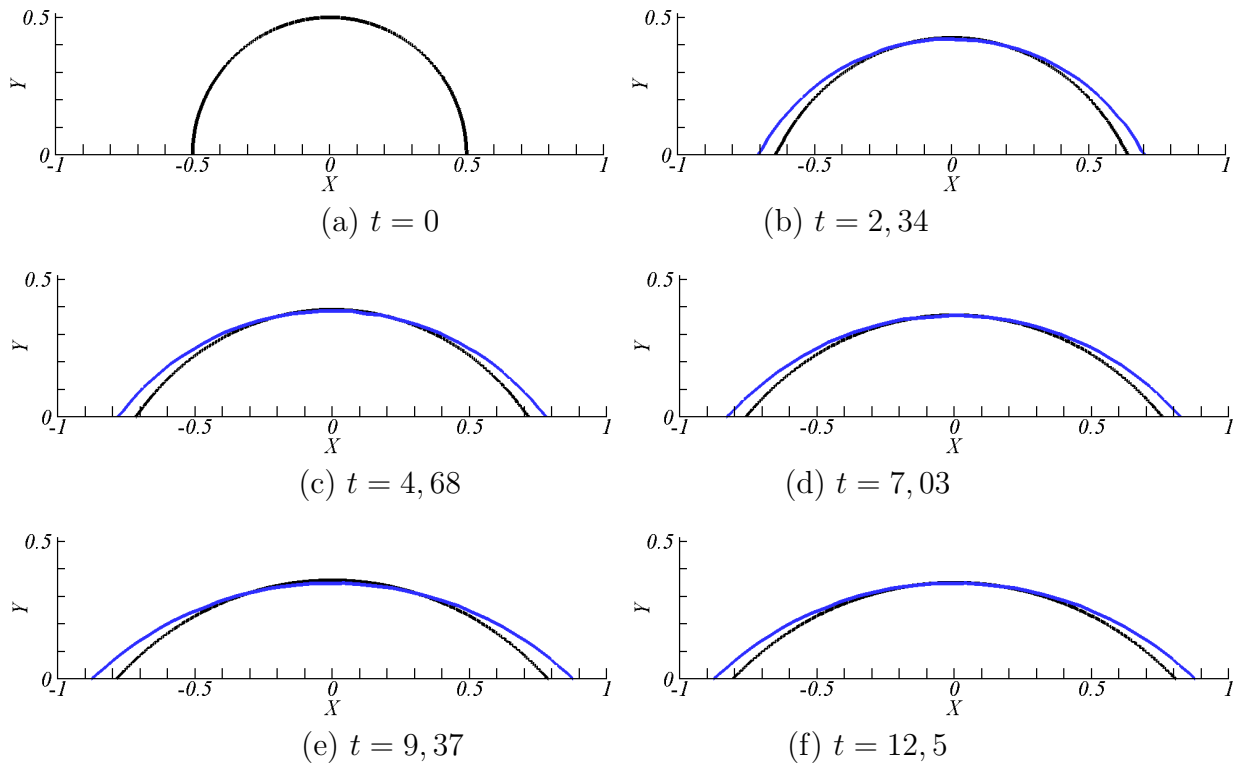


Figura 5.40 – Evolução da interface para as simulações de uma meia gota contaminada ($\beta = 0.3$) apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (—).

É interessante mencionar que para β maiores, a gota tenderia a se espalhar ainda mais, pois, a tensão superficial seria ainda menor.

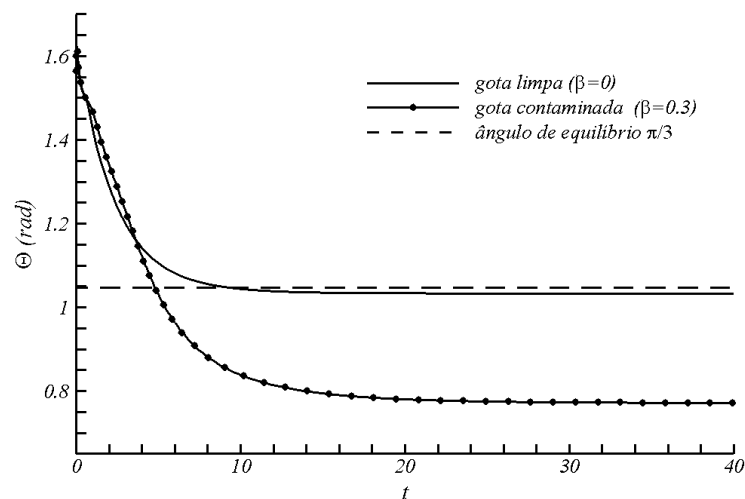


Figura 5.41 – Variação do ângulo de contato para as simulações de uma meia gota limpa e contaminada apoiada em uma superfície sólida.

Gráficos para a distribuição de concentração de surfactante e tensão superficial em função do comprimento de arco para o caso contaminado são dados nas Fig. 5.42 e 5.43, onde se

tem os resultados do presente trabalho e do trabalho de Lai, Tseng e Hung (2010). Inicialmente a concentração de surfactante está distribuída de maneira uniforme e, com a evolução temporal, percebe-se que a concentração o surfactante é ligeiramente maior nos pontos de contato que em outras regiões da interface. Como resultado, a tensão superficial é menor próximo aos pontos de contato. Posteriormente, devido a difusão, a concentração de surfactante tende a se uniformizar novamente. Comparando os resultados do presente trabalho e os de Lai, Tseng e Hung (2010) observa-se que são semelhantes. Como observa-se através das Fig. 5.39 e 5.40, a interface para o trabalho de Lai, Tseng e Hung (2010) tem um maior espalhamento, isso implica diretamente na distribuição de surfactante. Por isso, as diferenças quantitativas observadas para a concentração de surfactante e tensão superficial, Fig. 5.42 e 5.43, se devem principalmente ao fato que a interface no presente trabalho se espalha menos que no trabalho dos referidos autores.

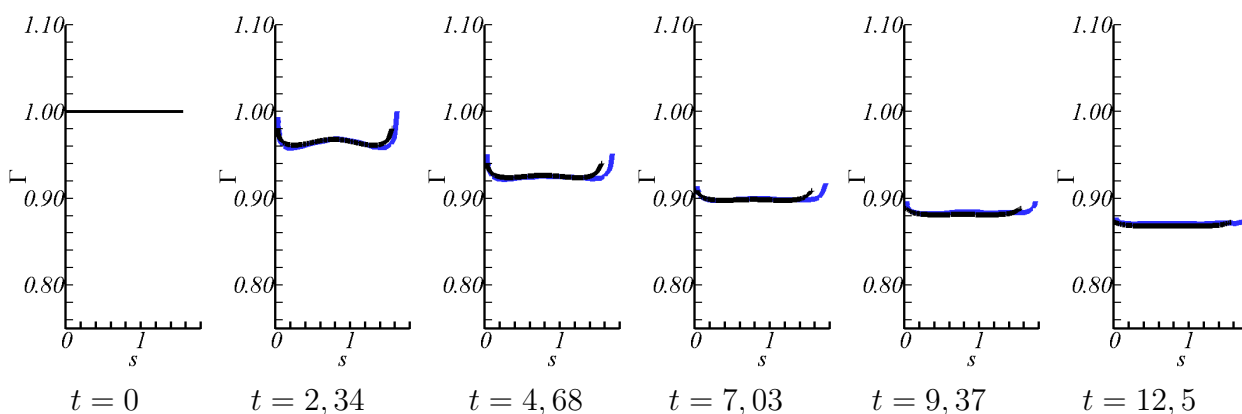


Figura 5.42 – Distribuição de concentração de surfactante ao longo da interface para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (—).

Como se observa através da Fig. 5.42, a concentração de surfactante vai diminuindo com a evolução do tempo. Isso acontece porque a interface vai se espalhando e o comprimento da interface vai aumentando. Porém, a massa de surfactante total na interface deve se conservar, resultando assim, numa diminuição da concentração de surfactante (massa de surfactante por unidade de comprimento). A diferença entre a massa de surfactante para cada instante de tempo e a massa de surfactante inicial ($m(t) - m(0)$) para estas simulações também alcançou precisão da ordem de erro de máquina.

Nas Figuras 5.44 e 5.46, são mostrados os campos das componentes horizontais e verticais da velocidade para o caso onde se tem a gota limpa e nas Fig. 5.45 e 5.47 para a gota

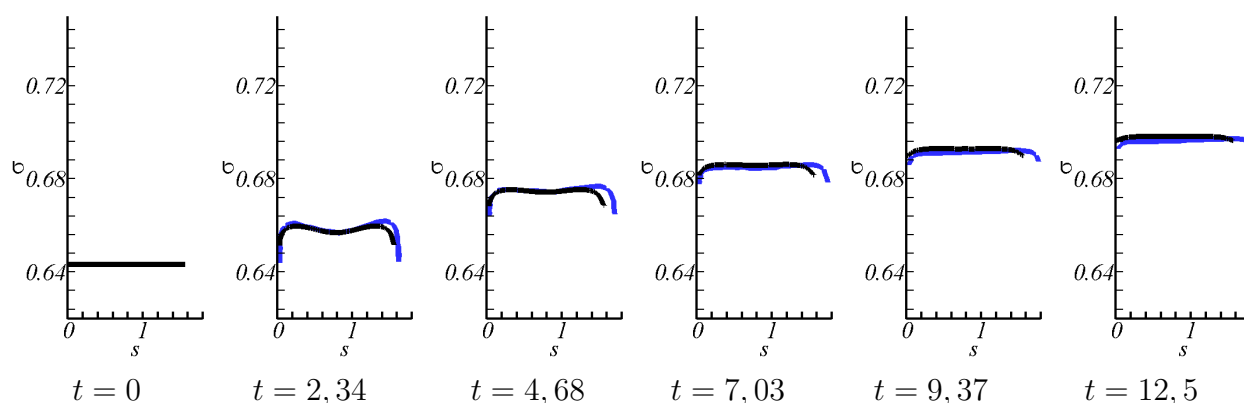


Figura 5.43 – Distribuição de tensão superficial ao longo da interface para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida. Resultados do presente trabalho (—) e resultados de Lai, Tseng e Hung (2010) (—).

contaminada. Pelas figuras da componente horizontal u de velocidade (Fig. 5.44 e 5.45), observa-se que a região próxima ao ponto de contato direito tem velocidade positiva e a região próxima ao ponto de contato do lado esquerdo tem velocidade negativa, isso indica o espalhamento da gota. Note que com a evolução do tempo, ambas as componentes da velocidade tendem a diminuir, isso porque, a gota vai progressivamente chegando ao equilíbrio. Observa-se também que, comparando gota limpa e contaminada, os campos para a gota contaminada apresentam-se com intensidade maior para ambas as componentes da velocidade.

Nas Figuras 5.48 e 5.49, têm-se o campo de vorticidade para o caso onde se tem a gota limpa e contaminada, respectivamente. Observa-se que nos pontos de contato é onde se tem os maiores valores de intensidade de vorticidade. Em analogia com os resultados anteriormente apresentados, onde regiões de alta curvatura têm alta vorticidade, regiões com pequena angulatura também apresentam vorticidade maior e quanto menor a angulatura, maior a vorticidade. Isso é observado quando se compara os campos para as gotas limpa e contaminada, para um mesmo tempo, a interface contaminada apresenta ângulo de contato menor e nota-se que a intensidade de vorticidade para este caso é maior. Além disso, observa-se que, como para os campos anteriores, com a evolução temporal tem-se um decréscimo de vorticidade indicando que o escoamento vai chegando ao equilíbrio.

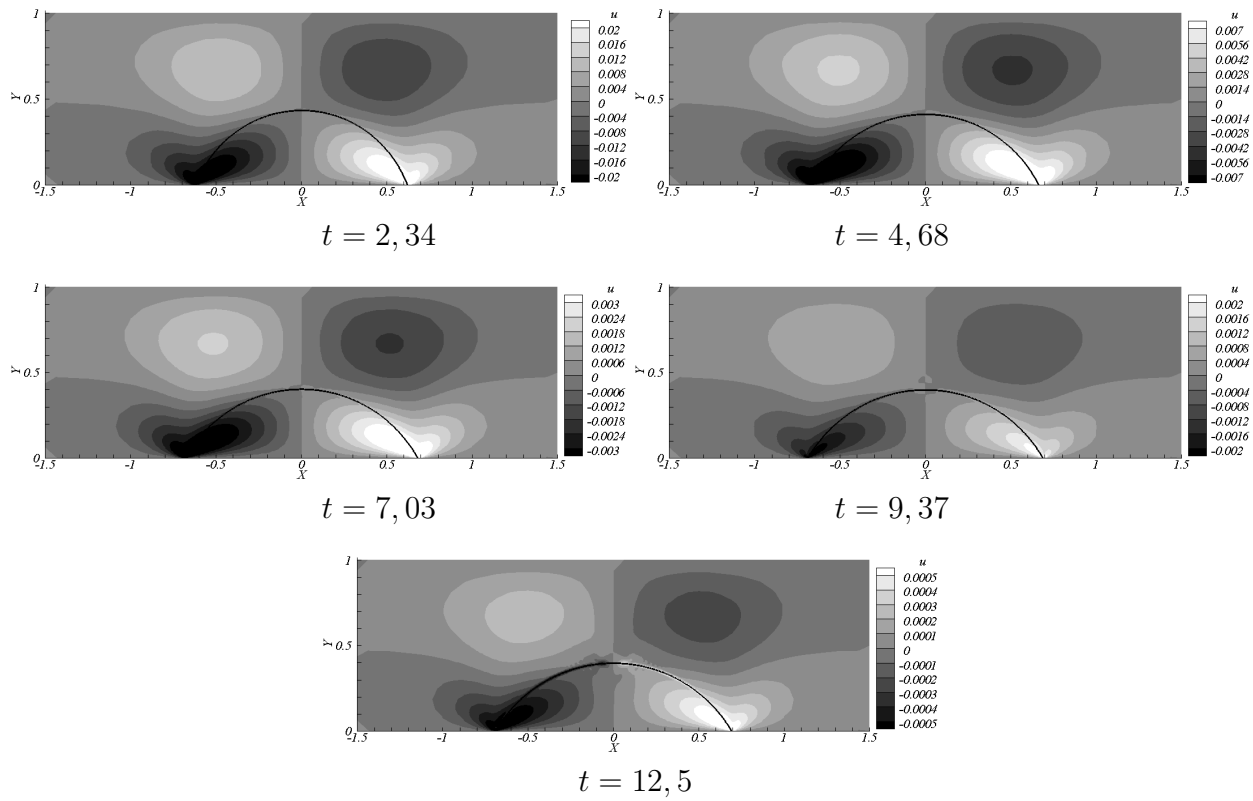


Figura 5.44 – Evolução temporal do campo da componente de velocidade u para a simulação de uma gota limpa apoiada em uma superfície sólida.

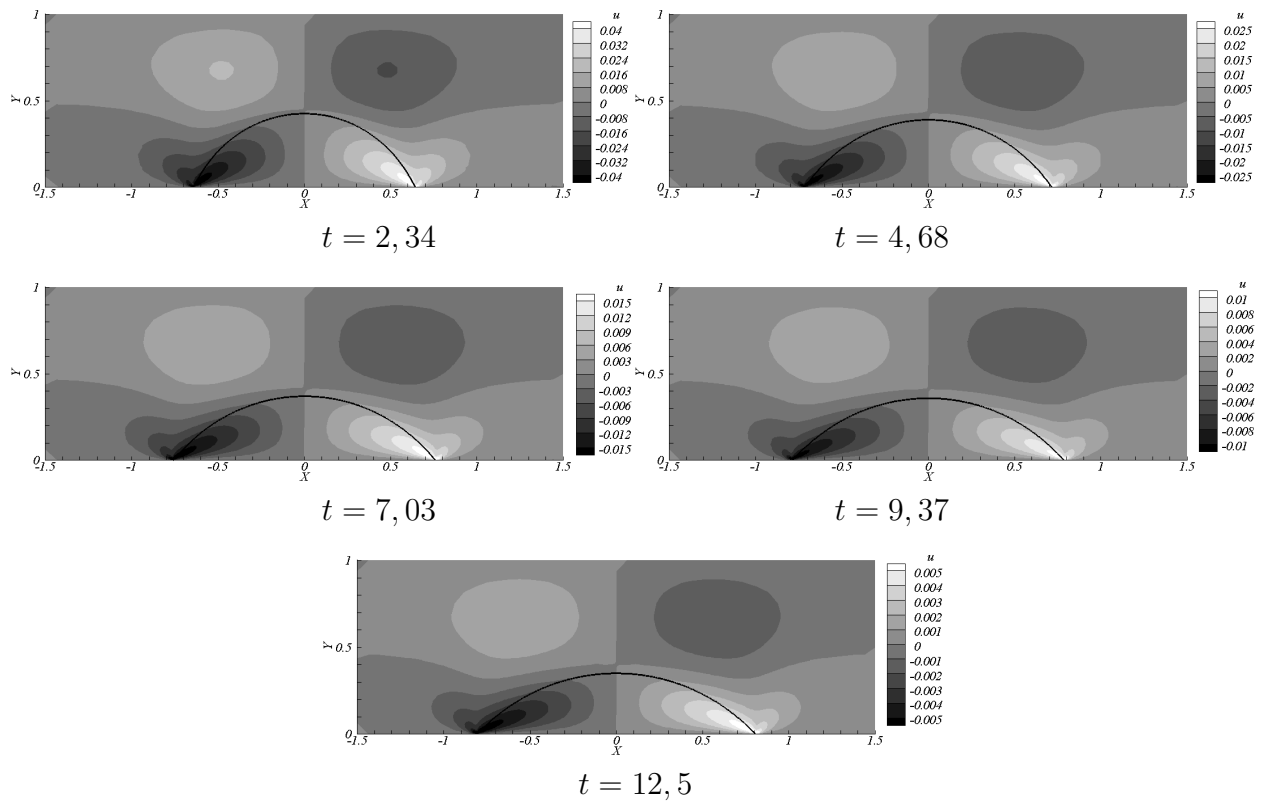


Figura 5.45 – Evolução temporal do campo da componente de velocidade u para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida.

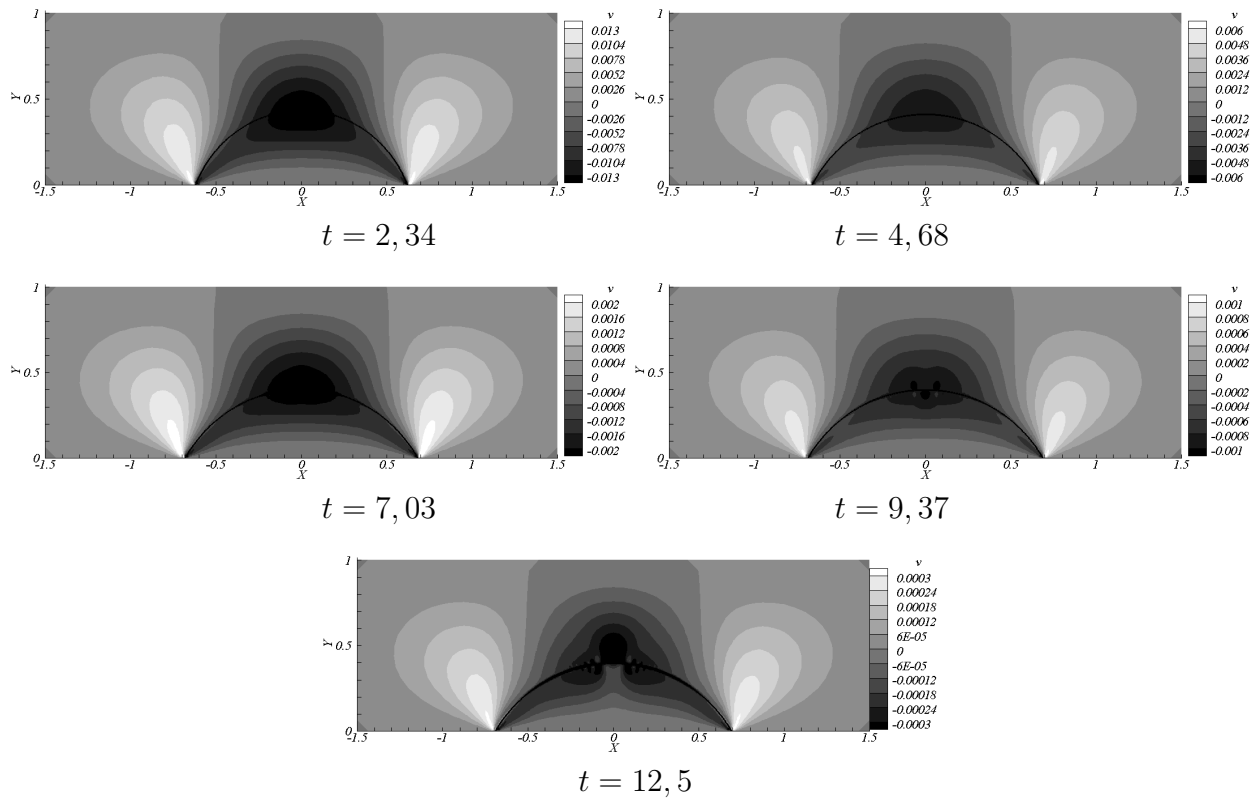


Figura 5.46 – Evolução temporal do campo da componente de velocidade v para a simulação de uma gota limpa apoiada em uma superfície sólida.

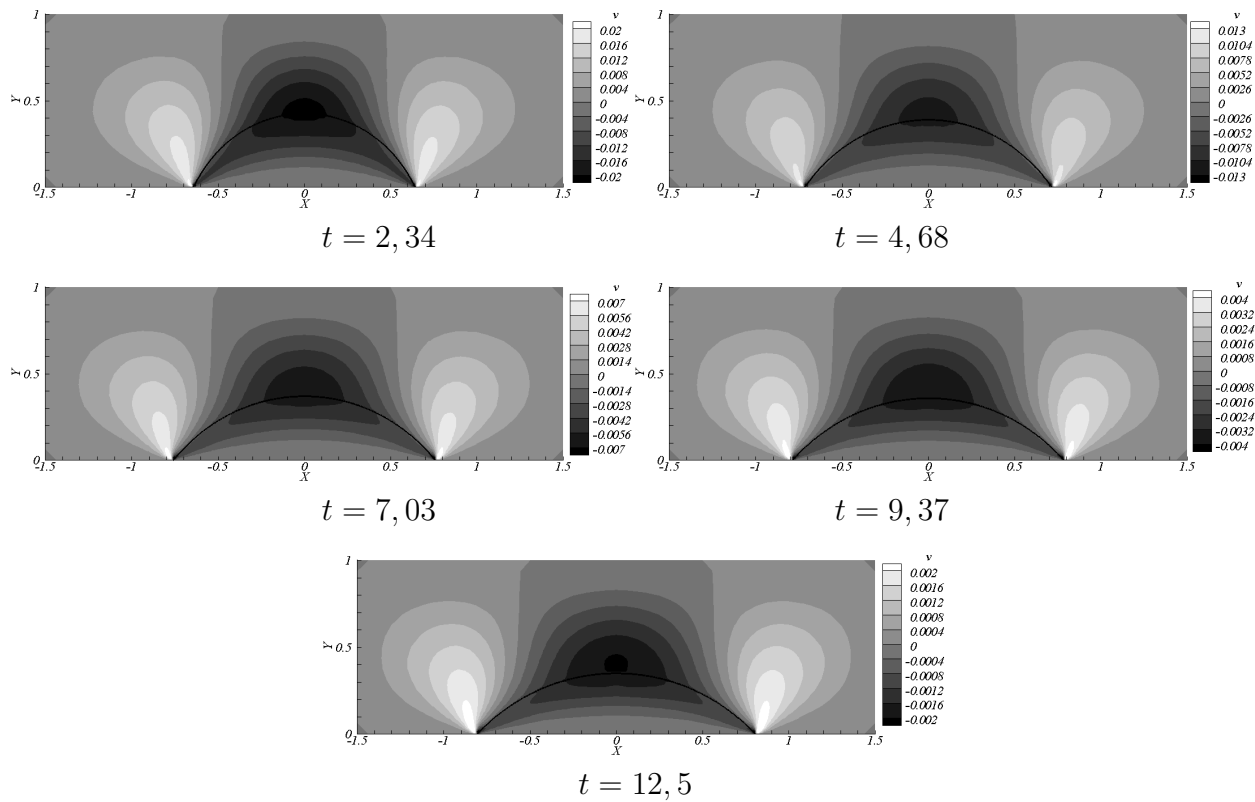


Figura 5.47 – Evolução temporal do campo da componente de velocidade v para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida.

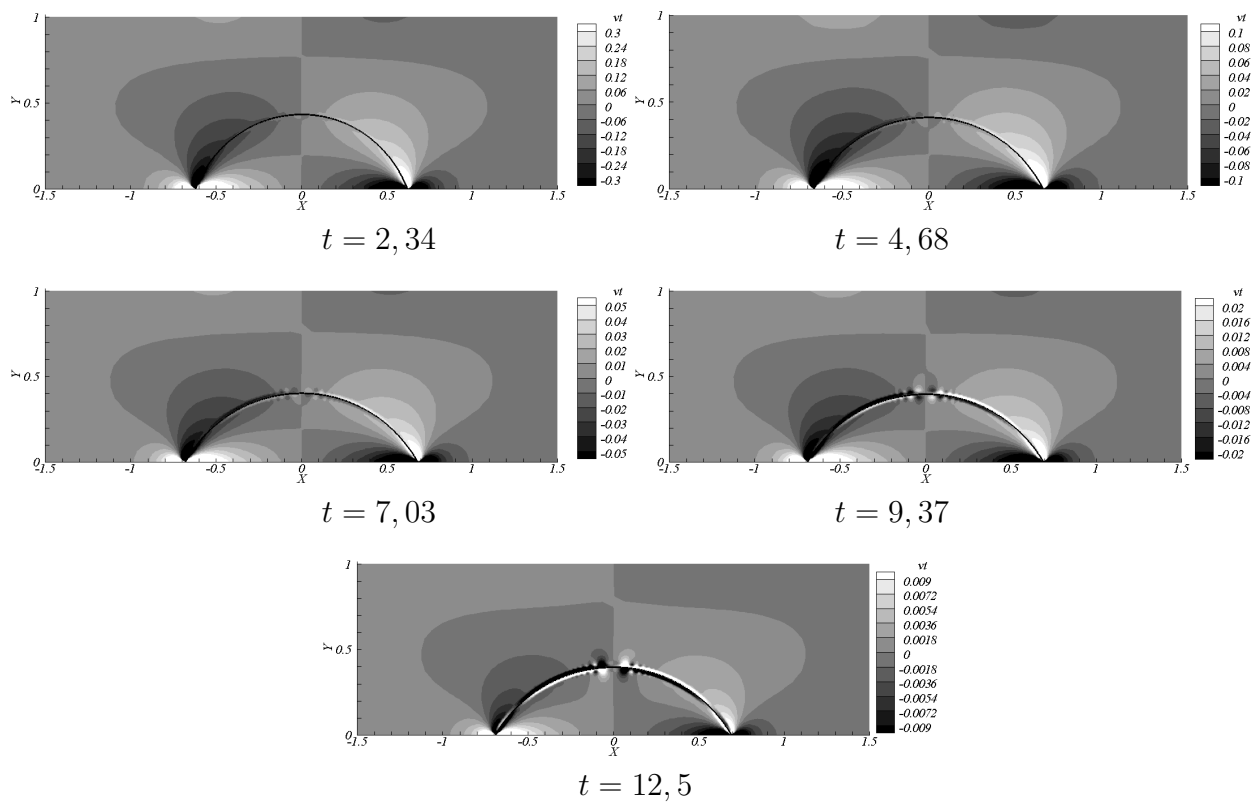


Figura 5.48 – Evolução temporal do campo de vorticidade para a simulação de uma gota limpa apoiada em uma superfície sólida.

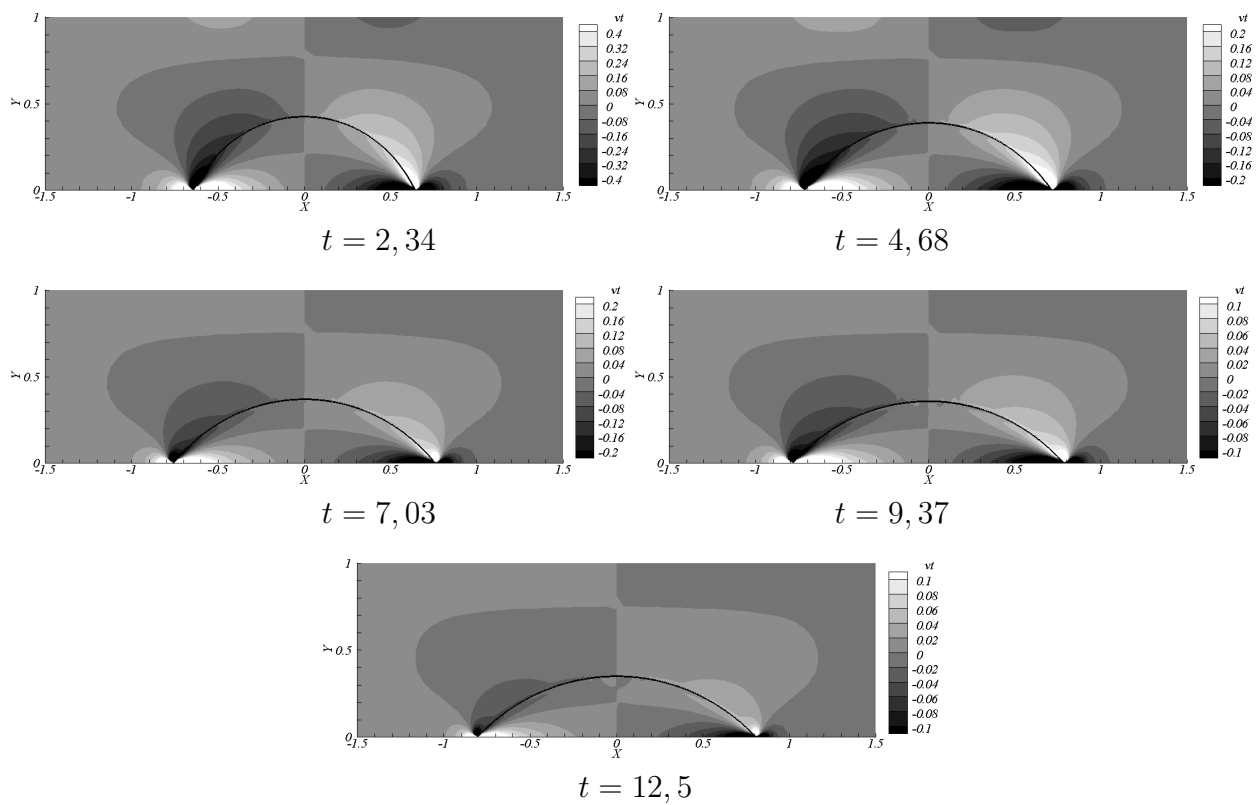


Figura 5.49 – Evolução temporal do campo de vorticidade para a simulação de uma gota contaminada apoiada em uma superfície sólida.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

O trabalho apresentado teve como objetivo o estudo de escoamentos bifásicos com a presença de surfactante insolúvel. Para tal, utilizou-se o código numérico AMR2D, desenvolvido por Villar (2007), onde as implementações sobre o surfactante foram incorporadas. Neste código tem-se a combinação de malhas adaptativas bloco-estruturadas, refinadas localmente com a discretização temporal semi-implícita de segunda ordem e técnicas multigrid-multinível lineares para a solução de sistemas lineares. Este código foi desenvolvido para o estudo de escoamentos bifásicos bidimensionais e o tratamento da interface é feito através do método *front-tracking*.

Lembrando-se que o surfactante dito insolúvel se conserva na interface, a equação de transporte para a concentração de surfactante foi deduzida partindo-se do princípio da conservação de massa de surfactante na interface. Na metodologia aqui empregada, utiliza-se uma derivação parametrizada da equação de transporte de surfactante sobre uma superfície deformável, desenvolvida por Lai, Tseng e Huang (2008), onde esta derivação é baseada na formulação lagrangiana da interface.

Os resultados apresentados envolvem uma verificação do código AMR2D através do cálculo de coeficiente de arrasto para uma bolha bidimensional, comparando resultados analíticos e numéricos. Também foi feita uma análise de convergência das implementações para a equação de transporte de concentração de surfactante, a qual apresentou segunda ordem de convergência.

Buscando fazer a comparação de interface limpa e contaminada, simulou-se um bolha imersa em um escoamento cisalhante. Pelos resultados, observou-se que a interface contaminada

apresentou maior deformação. Os resultados se mostraram qualitativamente semelhantes quando comparados com outros autores. Fez-se, também um teste para evidenciar a presença do efeito Marangoni em escoamentos contaminados. Neste teste, a interface se movimenta devido somente a força de Marangoni. A interação entre duas bolhas também é investigada para interfaces limpas e contaminadas. Neste teste tem-se duas bolhas imersas em um escoamento cisalhante. Os resultados mostram que quando tem-se as interfaces próximas, a distribuição de concentração de surfactante é afetada.

Por último fez-se um estudo de linhas de contato dinâmica. Este estudo trata da modelagem do ponto triplo de contato, onde se tem a interação das três fases presentes no escoamento. Para este caso, também estudou-se os efeitos do surfactante comparando com a interface limpa. Os resultados mostram que a bolha contaminada se espalha mais e tem ângulo de equilíbrio menor.

Dando continuidade a este trabalho, pretende-se estender este estudo para englobar os efeitos de surfactante solúvel. Para tal é necessário resolver uma equação de transporte de concentração de surfactante para o fluido ambiente e acopla-la à equação de concentração de surfactante da interface lagrangiana, de forma que a massa de surfactante seja conservada.

Outro ponto de futuras investigações é um estudo mais aprofundado de linhas de contato, abrangendo a implementação e comparação de outras condições de contorno para a fronteira onde se tem o ponto deslizante. Também o estudo de impacto de gotas é de grande interesse. Neste problema, os efeitos da gravidade são considerados e a gota chega à superfície sólida com uma velocidade de impacto. A investigação do efeito de surfactante nestes problemas seria um estudo inédito e importante do ponto de vista de engenharia.

CAPÍTULO VII

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

ASCHER, U. M.; RUUTH, S. J.; WETTON, B. T. Implicit-explicit methods for time-dependent pde's. **SIAM Journal on Numerical Analysis**. V. 32, n. 3, pp. 797-823, 1995.

ARIS, R. **Vectors, tensors, and the basic equations of fluid mechanics**. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1962. 282p.

BADALASSI, V. E.; CENICEROS, H. D.; BANERJEE, S. Computation of multiphase systems with phase field models. **Journal of Computational Physics**. v. 190, pp. 371-397, 2003.

BATCHELOR, G. K. **An introduction to fluid dynamics**. 1. ed. USA: Cambridge University Press, 1970. 614 p.

BERGER, M. J.; COLLELA, P. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. **Journal of Computational Physics**. v. 82, pp. 64-84, 1989.

BERGER, M. J.; RIGOUTSOS, I. An algorithm for point clustering and grid generation. **IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics**. v. 21, n. 5, pp. 1278-1286, 1991.

BOUSSINESQ, J. Sur l'existence d'une viscosité superficielle, dans la mince couche de tran-

sition séparant un liquide d'une autre fluide contigue. **Ann. Chim. Phys**, v. 191, 1913.

BUNNER, B.; TRYGGVASON, G. Dynamics of homogeneous bubbly flows Part1. Rise velocity and microstructure of the bubbles. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 466, pp. 17-52, 2002

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. **Communication in Computer Physics**. v. 8, n. 1, pp. 51-94, 2010.

CENICEROS, H. D.; ROMA, A. M. A multi-phase flow method with a fast, geometry-based fluid indicator. **Journal of Computational Physics**. v. 205, pp. 391-400, 2005.

CENICEROS, H. D. The effect of surfactants on the formation and evolution of capillary waves. **Physics of Fluids**. v. 15, n. 1, pp. 245-256, 2003.

CHAPRA, S. T.; CANALE, R. P. **Numerical methods for engineers**. 2.ed. USA: McGraw-Hill, INC, 1988. 839p.

CHAN, K. Y.; BORHAN, A. Surfactant-assisted spreading of a liquid drop on a smooth solid surface. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 287, pp. 233-248, 2005.

CHORIN, A. J.; MARSDEN, J. E. **A mathematical introduction to fluid mechanics**. 3.ed. USA: Academic Press, INC, 2000. 173p.

CLAY, M. A.; MIKSISA, M. J. Effect of surfactant on droplet spreading. **Physics of Fluids**. v. 16, n. 8, pp. 3070-3078, 2004.

CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. **Bubbles, drops and particles**. 1.ed. USA: Springer Verlag New York, INC, 1978. 380p.

CUENOT, B.; MAGNAUDET, J.; SPENNATO, B. The effects of slightly soluble surfactants on the flow around a spherical bubble. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 339, pp. 25-53, 1997.

DREW, D. A.; PASSMAN, S. L. **Theory of Multicomponent Fluids (Applied Mathematical Sciences, Vol. 135)**. 1.ed. USA: Springer, 1999. 341p.

EDWARDS, D. A.; BRENNER, H.; WASAN, D. T. **Interfacial transport processes and rheology**. 1.ed. USA: Butterworth-Heinemann, 1991. 558p.

FDHILA, R.B.; DUINEVELD, P. C. The effect of surfactant on the rise of a spherical bubble at high Reynolds and Peclet numbers. **Physics of Fluids**. v. 8, n. 2, pp. 310-321, 1996.

GANESAN, S.; TOBISKA, L. Modeling and Simulation of moving contact line problems with wetting effects. **Computer Visual Science**. v. 12, pp. 329-336, 2009.

HARPER, J. F. Surface activity and bubble motion. **Applied Scientific Research**. v. 38, pp. 343-352, 1982.

HOU, T. Y.; LOWENGRUB, J. S.; SHELLEY, M. J. Boundary Integral Methods for Multicomponent Fluids and Multiphase Materials. **Journal of Computational Physics**. v. 169, pp. 302-362, 2001.

HOU, T. Y.; LOWENGRUB, J. S.; SHELLEY, M. J. Removing the Stiffness from Interfacial Flows with Surface Tension. **Journal of Computational Physics**. v. 114, pp. 312-338, 1994.

HUANG, H.; LAI, M. C.; TSENG, H. C. A parametric derivation of the surfactant transport equation along a deforming fluid interface. **Frontiers of Applied and Computational Mathematics**. pp. 198-205, 2008.

ISHII, M; HIBIKI, T. **Thermo-fluid dynamics of two-phase flow**. 1.ed. USA: Springer Sci-

ence+Business Media, 2006. 462p.

JAMES, A. J.; LOWENGRUB, J. A surfactant-conserving volume-of-fluid method for interfacial flows with insoluble surfactant. **Journal of Computational Physics**. v. 201, pp. 685-722, 2004.

JAN, Y.-J.; TRYGGVASON, G. Computational studies of contaminated bubbles. In: I. Sahin, G. Tryggvason (Eds.), *Proceedings of a Symposium in the Dynamics of Bubbles and Vorticity Near Free Surfaces*, ASME. p. 46, 1991.

KILLEEN, J. Dirty, out-of-tune boilers cause problems in providence. Disponível em: <<http://www.heatingoil.com/blog/39971019/>>. Acesso em: 18 maio 2010.

LAI, M. C.; TSENG, Y. H.; HUANG, H. An immersed boundary method for interfacial flows with insoluble surfactant. **Journal of Computational Physics**. v 227, pp. 7179-7293, 2008.

LAI, M. C.; TSENG, Y. H.; HUANG, H. A Numerical simulation of moving contact lines with surfactant by immersed boundary method. **Communication in Computer Physics**. v. x, pp.1-23, 2010.

LEVICH, V. G.; KRYLOV, V. S. Surface-tension-driven flow phenomena. **Annual Review of Fluid Mechanics**. v. 1, pp. 293-316, 1969.

LI, X.; POZRIKIDIS, C. The effect of surfactants on drop deformation and on the rheology of dilute emulsions in Stokes flow. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 341, pp. 165-194, 1997.

MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; REZENDE, R. V. P.; GEORG, I. C. Interface forces calculation for multiphase flow simulation. In: 1° ENCONTRO BRASILEIRO SOBRE EBULIÇÃO, CONDENSAÇÃO E ESCOAMENTO MULTIFÁSICO LÍQUIDO-GÁS, 1, 2008, Florianópolis. **Anais do 1° Encontro Brasileiro sobre Ebulição, Condesação e escoamento Multifásico Líquido-**

Gás p. 1-10.

MILLIKEN, W. J.; STONE, H. A.; LEAL, L. G. The effect of surfactant on transient motion of Newtonian drops. **Physics of Fluids A**. v. 5, pp. 69-79, 1993.

MITTAL, R.; IACCARINO, G. Immersed Boundary Methods. **Annual Review of Fluid Mechanics**. v. 37, pp. 239-261, 2005.

MURADOGLU, M.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for computation of interfacial flows with soluble surfactant. **Journal of Computational Physics**. v. 227, pp. 2238-2262, 2008.

NIECKELE, A. O. Métodos computacionais para escoamentos multifásicos. **1° Escola de Escoamentos Multifásicos**. capítulo 6, 2010, pp. 6-1 à 6-70.

OSHER, S.; SETHIAN, J. A. Fronts propagation with curvatura-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. **Journal of Computational Physics**. v. 79, pp. 12-49, 1988.

PASANDIDEH-FARD, M.; QIAO, Y. M.; CHANDRA, S.; MOSTAGHIMI, J. Capillary effects during droplet impact on a solid surface. **Physics of Fluids**. v. 8, n. 3, pp. 650-659, 1996.

PAWAR, Y.; STEBE, K. J. Marangoni effects on drop deformation in an extensional flow: the role of surfactant physical chemistry, I. Insoluble surfactants, **Physics of Fluids**. v. 8, pp. 1738-1751, 1996.

PESKIN, C. S. Numerical Analysis of blood flow in the heart. **Journal of Computational Physics**. v. 25, pp. 220-252, 1977.

PUCKETT, E. G.; ALMGREN, A. S.; BELL, J. B.; MARCUS, D. L.; RIDER, W. A high-order

projection method for tracking fluid in variable density incompressible flows. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 130, pp. 269-282, 1997.

QIAN, T.; WANG, X. P.; SHENG, P. Molecular scale contact line hydrodynamics of immiscible flows. **Physical Review E**, v. 68, 016306, 2003.

REN, W.; E, W. Boundary conditions for the moving contact line problem. **Physics of Fluids**. v. 19, 2007.

RENARDY, Y. Y.; RENARDY, M.; CRISTINI, V. A new volume-of-fluid formulation for surfactants and simulations of drop deformation under shear at a low viscosity ratio. **European Journal of Mechanics**. v. 21, pp. 49-59, 2002.

RHODES, M. Fluidização de partículas por fluidos. Disponível em <<http://www.ufrnet.ufrn.br/~lair/Pagina-OPUNIT/Fluidiza-8.htm>>. Acesso em: 18 maio 2010.

ROMA, A. M. **A multilevel Self Adaptive Version of Immersed Method**, 1996. 101 f. Tese de Doutorado - School of Arts and Sciences, New York, EUA.

ROMA, A. M.; PESKIN, C. S.; BERGER, M. J. An adaptive version of the immersed boundary method. **Journal of Computational Physics**. v. 153, pp. 509-532, 1999.

RUDMAN, M. Volume-Tracking Methods for Interfacial Flow Calculations. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**. v. 24, pp. 671-691, 1997.

SALVO, R. V. **Efeitos de modelos submalha em escoamentos em ciclones**, 2009. 183 f. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG.

SAMIMY, M.; BREUNER, K. S.; LEAL, L. G.; STEEN, P. H. **A gallery of fluid motion**. 1.ed. UK: Cambridge University Press, 2004. 118p.

SCRIVEN, L. E. Dynamics of a fluid interface equation of motion for newtonian surface fluids. **Chemical Engineering Science**, v. 12, pp 98-108, 1960.

SILVA, A. A. N. **Simulação numérica de escoamentos bidimensionais com superfícies livres e linhas de contato dinâmicas**, 2010. 95 f. Dissertação de Mestrado - Universidade de São Paulo, São Carlos-SP.

SPELT, P. D. M. A level-set approach for simulation of flows with multiple moving contact lines with hysteresis. **Journal of Computational physics**, v. 207, pp. 389-404, 2005.

STONE, H. A. A simple derivation of the time-dependent convection-diffusion equation for surfactant transport along a deforming interface. **Physics of Fluids A**. v. 2, n. 1, pp. 111-112, 1990.

STONE, H. A.; LEAL, L. G. The effects of surfactants on drop deformation and breakup. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 222, pp. 161-186, 1990.

SUSSMAN, M.; SMERKA, O; OSHER, S. A level-set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 114, pp. 146-159, 1994.

TARIMALA, S.; DAI, L. L. Structure of microparticles in solid-stabilized emulsions. **Langmuir**. v. 20, n. 9, pp. 3492-3494, 2004.

TASOGLU, S.; DEMIRCI, U.; MURADOGLU, M. The effect of soluble surfactant on the transient motion of a buoyancy-driven bubble. **Physics of Fluids**. v. 20, n. 4, pp. 1-15, 2008.

TRYGGVASON, G.; BUNNER, B.; ESMAELI, A.; JURIC, D.; AL-RAWARI, 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, pp. 708-759, 2001.

ULUSOY, U. Impacts of physical attributes (size, psd, shape and surface roughness) of mineral powders on flotation and wetting. Disponível em: <http://www.scitopics.com/Impacts_of_physical_attributes_size_psd_shape_and_surface_roughness_of_mineral_powders_on_flotation_and_wetting.html>. Acesso em: 18 maio 2010.

UNVERDI, S. O.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multifluid flows. **Journal of Computational physics**, v. 100, pp 25-37, 1992.

VILLAR, M. M. **Análise numérica fina de escoamentos multifásicos bidimensionais**, 2007. 201 f. Tese de Doutorado - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia-MG.

WAXMAN, A. M. Dynamics of a couple-stress fluid membrane. **STUD. APPL. MATH.** v. 70, no. 1, pp. 63-86, 1984.

WHITAKER, S. **The method of volume averaging (Theory and Applications of Transport in Porous Media)**. 1.ed. USA: Springer, 1998. 240p.

WONG, H.; RUMSCHITZKI, D.; MALDARELLI, C. On the surfactant mass balance at a deforming fluid interface. **Physics of Fluids**. v. 8, n. 11, pp. 3203-3204, 1996.

WÖRNER, M. **A compact introduction to the numerical modeling of multiphase flows**. 1.ed. Alemanha: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 2003, 38p.

YEOH, G. H.; TU, J. **Computational techniques for multi-phase flows**. 1.ed. USA: Butterworth-Heinemann, 2010. 643p.

YON, S.; POZRIKIDIS, C. A finite-volume/boundary-element method for flow past interfaces in the presence of surfactants, with application to shear flow past a viscous drop. **Computers & Fluids**, v. 27, pp 879-902, 1998.

XU, J.-J.; LI, Z.; LOWENGRUB, J.; ZHAO, H. A level-set method for interfacial flows with surfactant. **Journal of Computational physics**, v. 212, pp 590-616, 2006.

ZALOSH, R. Discretized simulation of vortex sheet evolution with buoyancy tension effects. **AIAA J.**, v. 14, 1976.

ZHANG, J.; ECKMANN, D. M.; AYYASWAMY, P. S. A front tracking method for a deformable intravascular bubble in a tube with soluble surfactant transport. **Journal of Computational physics**, v. 214, pp 366-396, 2006.

CAPÍTULO VIII

APÊNDICES

8.1 APÊNDICE I - Cálculo do coeficiente de arrasto analítico

Considere R a região ocupada por um corpo imerso em um escoamento e Σ seu contorno, como mostra Fig. 8.1. O domínio contendo todo o fluido e o corpo corresponde à Ω e $\mathbb{R}^2$ é a região externa ao corpo $\mathbb{R}^2 = \Omega - R$.

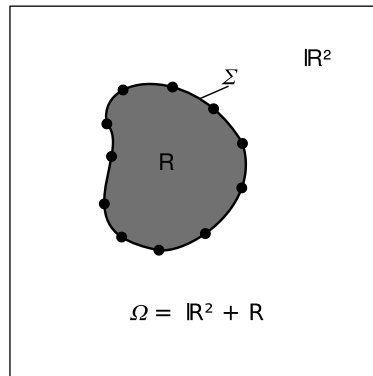


Figura 8.1 – Representação esquemática de uma interface Σ imersa no domínio Ω .

Na ausência de outras forças de contato, a força total que atua sobre o contorno de um corpo imerso devida ao escoamento de fluido ao seu redor, é

$$\mathbf{f} = \int_{\Sigma} \sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i ds, \quad (8.1)$$

onde n_j corresponde a j -ésima componente do vetor normal exterior sobre uma interface Σ , e o

tensor stress é dado por

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + 2\mu\left(\frac{\partial_j u_i + \partial_i u_j}{2}\right), \quad 1 \leq i, j \leq n, \quad (8.2)$$

onde p corresponde à pressão, μ é a viscosidade dinâmica e u_i e u_j são as componentes do vetor $\mathbf{u}$ (velocidade do fluido). Por simplicidade, no que se segue usa-se a “convenção de soma” para os subíndices (e.g. em Eq. (8.1) na definição da força total).

8.1.1 Força de arrasto

A força total que atua sobre o contorno de um corpo imerso pode ser escrita como a soma de duas parcelas: a *força de arrasto*, $\mathbf{f}_D$, na direção mas com sentido oposto ao do escoamento, e a *força de sustentação*, $\mathbf{f}_L$, perpendicular a ele. Para exemplificar o cálculo da força de arrasto, considere um corpo imerso num escoamento incompressível bidimensional em regime estacionário. Assumindo que o fluido tem propriedades materiais constantes, se o escoamento for uniforme ao “longe” com velocidade constante $\mathbf{U}$, sua velocidade satisfaz às equações

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{u}, \quad (8.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (8.4)$$

onde ρ é a massa específica, com a condição de contorno no “infinito”

$$\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{U} \quad \text{para } \mathbf{x} \rightarrow +\infty. \quad (8.5)$$

A condição de contorno na velocidade e/ou no tensor stress sobre o corpo serão abordadas em detalhes mais adiante. É possível mostrar que nas condições anteriores a potência total dissipada pelo fluido é dada por

$$-\mathbf{U} \cdot \mathbf{f} + \int_{\Sigma} \mathbf{u} \cdot \sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i dl = 2\mu \int_{\mathbb{R}^2} \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x}, \quad (8.6)$$

lembrando que $\mathbb{R}^2 = \Omega - R$ é a região exterior ao corpo e

$$\|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 = \left(\frac{\partial_i u_j + \partial_j u_i}{2} \right)^2, \quad (8.7)$$

é o quadrado da norma de Frobenius do tensor de deformação.

Se $\mathbf{U} = \|\mathbf{U}\| \mathbf{e}_\infty$, onde $\mathbf{e}_\infty$ é o versor na direção e sentido do escoamento ao longe, então a força de arrasto pode ser escrita como $\mathbf{f}_D = -\|\mathbf{f}_D\| \mathbf{e}_\infty$. De Equação (8.6), para um corpo imerso em repouso ($\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \mathbf{x} \in \Sigma$), para o qual não haja deslizamento sobre seu contorno, segue que

$$\|\mathbf{f}_D\| = \frac{2\mu}{\|\mathbf{U}\|} \int_{\mathbb{R}^2} \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x}, \quad (8.8)$$

pois $\mathbf{f} = \mathbf{f}_D + \mathbf{f}_L$ e $\mathbf{f}_L$ é perpendicular à direção do escoamento.

Para demonstrar a validade de Eq. (8.6) para escoamentos incompressíveis em regime estacionário, é conveniente definir uma velocidade auxiliar $\mathbf{v}(t, \mathbf{x})$ de forma que

$$\mathbf{v}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{x} - \mathbf{U}t) - \mathbf{U}, \quad (8.9)$$

onde $\mathbf{u}$ é a solução de Eqs. (8.3)-(8.5), o problema em regime estacionário. Note que a velocidade auxiliar $\mathbf{v}$ tende a zero no infinito, isto é,

$$\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{0} \text{ para } \mathbf{x} \rightarrow +\infty. \quad (8.10)$$

Além disso, decorre de Eq. (8.9) que $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ pois $\partial_j v_i = \partial_j u_i$ e, por ser $\mathbf{u}$ a velocidade do escoamento em regime estacionário, que $\mathbf{v}$ satisfaz $\rho[\mathbf{v}_t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{v}$, a equação de Navier-Stokes para um escoamento incompressível transiente.

Se B_r for um círculo de raio r que contém completamente o corpo em seu interior, então

$$\begin{aligned} 2\mu \int_{\mathbb{R}^2} \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} &= 2\mu \int_{\mathbb{R}^2} \|\text{Def } \mathbf{v}\|^2 d\mathbf{x} = 2\mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \left(\frac{\partial_i v_j + \partial_j v_i}{2} \right)^2 d\mathbf{x} \\ &= \mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \left[\partial_j (v_i \partial_j v_i + v_i \partial_i v_j) - \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v} \right] d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (8.11)$$

onde $Sr = Br - R$. A última igualdade pode ser verificada diretamente por inspeção lembrando que o escoamento é incompressível.

Aplicando o Teorema de Gauss à primeira parcela da última igualdade da Eq. (8.11) tem-se

$$\mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{Sr} \partial_j (v_i \partial_j v_i + v_i \partial_i v_j) d\mathbf{x} = \mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{\partial Sr} \mathbf{v} \cdot \left[(\partial_j v_i + \partial_i v_j) \tilde{n}_j \right] \mathbf{e}_i dl, \quad (8.12)$$

onde $\tilde{n}_j$ é a j -ésima componente do versor normal exterior ao contorno de Sr (e, portanto, do versor normal *interior* ao longo do contorno de R). Partindo da Eq. (8.12), após somar e subtrair a integral de $p \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{n}}$ no contorno de Sr , a Eq. (8.11) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} 2\mu \int_S \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} &= \\ &= \mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{\partial Sr} \mathbf{v} \cdot \left\{ [-p\delta_{ij} + \mu(\partial_j v_i + \partial_i v_j)] \tilde{n}_j \right\} \mathbf{e}_i dl \\ &\quad + \mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{\partial Sr} p \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{n}} dl - \mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{Sr} \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v} d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (8.13)$$

É preciso analisar cautelosamente os três limites do lado direito da Eq. (8.13). No primeiro, subentende-se que, da aplicação do Teorema de Gauss, o contorno Sr é percorrido no sentido positivo e que, portanto, o trecho ∂Br é percorrido no sentido anti-horário e o trecho Σ é percorrido no sentido horário. Observando que a integral sobre Σ percorrido no sentido horário com $\tilde{\mathbf{n}}$ apontando para o interior não se altera quando Σ é percorrido no sentido anti-horário com $\mathbf{n}$ apontando para o exterior e lembrando que $\partial_j v_i = \partial_j u_i$ tem-se para o primeiro limite do lado direito da Eq. (8.13)

$$\mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{\partial Sr} \mathbf{v} \cdot \left\{ [-p\delta_{ij} + \mu(\partial_j u_i + \partial_i u_j)] n_j \right\} \mathbf{e}_i dl = \mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{\partial Sr} \mathbf{v} \cdot \sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i dl. \quad (8.14)$$

Como a velocidade auxiliar $\mathbf{v} = \mathbf{u} - \mathbf{U}$ tende a zero no infinito, se o tensor stress se mantiver com norma limitada, decorre das Eqs. (8.1) e (8.14) que

$$\mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{\partial Sr} \mathbf{v} \cdot \sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i dl = -\mu \int_{\Sigma} (\mathbf{U} - \mathbf{u}) \cdot \sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i dl = -\mathbf{U} \cdot \mathbf{f} + \int_{\Sigma} \mathbf{u} \cdot \sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i dl. \quad (8.15)$$

É possível mostrar que a soma dos dois últimos limites do lado direito da Eq. (8.13)

vale zero. Se assim o for, então

$$2\mu \int_{\mathbb{R}^2} \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} = -\mathbf{U} \cdot \mathbf{f} + \int_{\Sigma} \mathbf{u} \cdot \sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i dl. \quad (8.16)$$

Note que a Eq. (8.16) vale apenas quando o corpo mantiver sua geometria inalterada. Em particular, para corpos imersos em repouso, se for assumida condição de não deslizamento para a velocidade no contorno do corpo, a potência total dissipada pelo fluido é dada por

$$-\mathbf{U} \cdot \mathbf{f} = 2\mu \int_{\mathbb{R}^2} \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x}. \quad (8.17)$$

Quando Σ representa a interface de separação entre duas fases imiscíveis num escoamento bifásico, desde que a geometria da interface se preserve inalterada e a fase em seu interior ocupe a mesma região R ao longo do tempo, as considerações anteriores ainda assim se aplicam. Se neste novo contexto a força stress $\sigma_{ij} n_j \mathbf{e}_i$ for decomposta ao longo do contorno em componentes normal e tangencial, f_n e f_τ respectivamente, é possível reescrever a Eq. (8.16) como

$$2\mu \int_S \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} = -\mathbf{U} \cdot \mathbf{f} + \int_{\Sigma} \mathbf{u} \cdot (f_n \mathbf{n} + f_\tau \mathbf{t}) dl. \quad (8.18)$$

Assumindo-se impenetrabilidade ($\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$) e a condição de stress tangencial nulo ($f_\tau = 0$), chega-se novamente a Eq. (8.17). Note que a condição de impenetrabilidade é mais branda que a de não deslizamento. Neste caso, mesmo que a região R se preserve inalterada, poderá haver movimento de partículas sobre Σ . É surpreendente a validade da Eq. (8.17) para duas situações físicas tão distintas, assumindo-se apenas incompressibilidade e que o escoamento esteja em regime estacionário.

Para finalizar, é preciso mostrar que a soma dos dois limites da Eq. (8.13) vale zero. A aplicação do Teorema de Gauss à integral de $p \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{n}}$ no contorno de S_r resulta em

$$\int_{\partial S_r} p \mathbf{v} \cdot \tilde{\mathbf{n}} dl - \mu \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v} d\mathbf{x} = \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \nabla(p\mathbf{v}) - \mu \mathbf{v} \cdot \Delta \mathbf{v} d\mathbf{x}, \quad (8.19)$$

uma vez que $\mathbf{v}$ tende a zero no infinito. Usando na Eq. (8.19) a incompressibilidade e o fato

da velocidade auxiliar satisfazer a equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis transientes tem-se

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \mathbf{v} \cdot (\nabla p - \mu \Delta \mathbf{v}) d\mathbf{x} = - \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \rho \mathbf{v} \cdot [\mathbf{v}_t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] d\mathbf{x}. \quad (8.20)$$

Voltando novamente na velocidade auxiliar $\mathbf{v}(t, \mathbf{x})$ e lembrando-se da Eq. (8.9), verifica-se então que

$$\mathbf{v}_t = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}_i} \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}_i} \mathbf{U}_i = (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{v}, \quad (8.21)$$

logo,

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}_t = \mathbf{v} \cdot [(\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{v}] = \nabla \cdot \left(\frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} \mathbf{U} \right), \quad (8.22)$$

e,

$$\mathbf{v} \cdot [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] = \mathbf{v} \cdot \nabla \frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} = \nabla \cdot \left(\frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} \mathbf{v} \right). \quad (8.23)$$

Utilizando as Eqs. (8.21) e (8.22) na Eq. (8.20) e aplicando mais uma vez o Teorema de Gauss tem-se:

$$- \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \rho \mathbf{v} \cdot [\mathbf{v}_t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] d\mathbf{x} = -\rho \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{x} - \rho \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \frac{\|\mathbf{v}\|^2}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} d\mathbf{x}. \quad (8.24)$$

Lembrando que no limite quando $r \rightarrow +\infty$, então $\mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{U}$. Assim o termo se anula:

$$- \lim_{r \rightarrow +\infty} \int_{S_r} \rho \mathbf{v} \cdot [\mathbf{v}_t + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] d\mathbf{x} = 0 \quad (8.25)$$

8.1.2 Coeficiente de arrasto

O coeficiente de arrasto é definido por

$$C_D = \frac{\|\mathbf{f}_D\|}{L \rho \frac{\|\mathbf{U}\|^2}{2}}, \quad (8.26)$$

onde L é um comprimento característico. Da Eq. (8.8), tem-se que

$$C_D = \frac{4Re^{-1}}{\|\mathbf{U}\|^2} \int_S \|\text{Def } \mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x}, \quad (8.27)$$

onde o número de Reynolds é dado por $Re = L\rho\|\mathbf{U}\|\mu^{-1}$. A Equação (8.27) é válida tanto para corpos imersos quanto para interfaces de separação entre fluidos imiscíveis desde que a região R se preserve inalterada (no tempo e no espaço), que o escoamento seja incompressível e que ele tenha atingido o regime estacionário.

8.1.3 Coeficiente de arrasto em bolhas a alto Reynolds

Considere um escoamento incompressível bifásico de dois fluidos imiscíveis no qual, devido a forças de empuxo, há uma bolha ascendendo em regime permanente cuja geometria se mantém. Se o fluido ambiente se encontra em repouso ao longe (no “infinito”) e se $\mathbf{U}$ é a velocidade uniforme de ascensão do centro de massa da bolha, então, uma vez mais, é possível mostrar por cálculos similares aos anteriores a validade da Eq. (8.16). Pelas mesmas considerações que seguem a Eq. (8.18), chega-se à conclusão da validade da Eq. (8.17).

Assume-se este escoamento com alto número de Reynolds o qual permite que os conceitos de camada limite sejam aplicáveis e que não há separação da camada limite na superfície da bolha. Finalmente supõe-se que o movimento do escoamento interno não afeta o movimento do fluido e que não há a ação de surfactantes na superfície da bolha. Nestas condições, a vorticidade está restrita a uma fina camada limite na superfície da bolha e em um estreita esteira simétrica. Dessa forma, o escoamento irrotacional fora desta região é aproximadamente o mesmo, se comportando como um líquido praticamente invíscido. Assim, para um cilindro de raio a , então a velocidade potencial pode ser dada por:

$$\phi = \frac{-a^2 \cos \theta}{r}, \quad (8.28)$$

onde r e θ são coordenadas polares com origens no centro do cilindro.

A Eq. (8.17) pode ser então avaliada em função da velocidade potencial, para isto as

seguintes hipóteses são admitidas:

$$\mathbf{v} = \nabla \tilde{\phi},$$

$$\nabla \times \mathbf{v} = 0,$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \Rightarrow \Delta \tilde{\phi} = 0$$

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}, \text{ para } \mathbf{x} \in \Sigma$$

onde $\tilde{\phi} = \|\mathbf{U}\|\phi$, logo:

$$\Delta \tilde{\phi} = \|\mathbf{U}\| \nabla \phi = 0,$$

$$\Delta \tilde{\phi} = \|\mathbf{U}\| \Delta \phi \cdot \mathbf{n} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}.$$

Se $\mathbf{v}_1 = \partial_1 \tilde{\phi} = \|\mathbf{U}\| \partial_1 \phi$, $\mathbf{v}_2 = \partial_2 \tilde{\phi} = \|\mathbf{U}\| \partial_2 \phi$ e tomando o vetor deformação como:

$$\text{Def } \mathbf{v} = \frac{1}{2}(\partial_i \mathbf{v}_j + \partial_j \mathbf{v}_i) = D \mathbf{v} = \|\mathbf{U}\| \partial_i \partial_j \phi, \quad (8.29)$$

então,

$$\begin{aligned} \mathbf{U} \cdot \mathbf{f} &= -2\mu \int_S \|\mathbf{U} \partial_i \partial_j \phi\|^2 d\mathbf{x}, \\ &= -2\mu \int_S \left[(\|\mathbf{U}\| \partial_1 \partial_1 \phi)^2 + 2(\|\mathbf{U}\| \partial_1 \partial_2 \phi)^2 + (\|\mathbf{U}\| \partial_2 \partial_2 \phi)^2 \right] d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (8.30)$$

Para o campo de velocidade potencial apresentado na Eq. (8.28) em coordenadas cartesianas, tal que $\phi = -a^2 \frac{\mathbf{x}_1}{r^2}$ e $r^2 = \mathbf{x}_1^2 + \mathbf{x}_2^2$, tem-se:

$$\partial_1 \partial_1 \phi = a^2 \|\mathbf{U}\| \left[\frac{2\mathbf{x}_1}{r^4} - \frac{4\mathbf{x}_1}{r^6} (\mathbf{x}_1^2 - \mathbf{x}_2^2) \right], \quad (8.31)$$

$$\partial_1 \partial_2 \phi = a^2 \|\mathbf{U}\| \left[\frac{2\mathbf{x}_2}{r^4} - \frac{4\mathbf{x}_2}{r^6} (\mathbf{x}_1^2 - \mathbf{x}_2^2) \right], \quad (8.32)$$

$$\partial_2 \partial_2 \phi = a^2 \|\mathbf{U}\| \left[\frac{2\mathbf{x}_1}{r^4} - \frac{4\mathbf{x}_2}{r^6} (2\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2) \right]. \quad (8.33)$$

Reescrevendo as Eqs. (8.31), (8.32) e (8.33) em coordenadas polares, tem-se:

$$\partial_1 \partial_1 \phi = 2 \frac{a^2}{r^3} \|\mathbf{U}\| \cos \theta (1 - 2 \cos 2\theta), \quad (8.34)$$

$$\partial_1 \partial_2 \phi = 2 \frac{a^2}{r^3} \|\mathbf{U}\| \sin \theta (1 - 2 \cos 2\theta), \quad (8.35)$$

$$\partial_2 \partial_2 \phi = 2 \frac{a^2}{r^3} \|\mathbf{U}\| \cos \theta (1 - 4 \sin^2 \theta). \quad (8.36)$$

Substituindo as Eqs. (8.34), (8.35) e (8.36) na Eq. (8.30), obtém-se:

$$-\mathbf{U} \cdot \mathbf{f} = -2 \|\mathbf{U}\|^2 \mu \int_a^\infty \int_0^{2\pi} \frac{8a^4}{r^6} r dr d\theta, \quad (8.37)$$

o que leva a:

$$\mathbf{f}_D = 8\mu\pi \|\mathbf{U}\|, \quad (8.38)$$

e

$$C_D = \frac{\mathbf{f}_D}{2a \frac{\rho \|\mathbf{U}\|^2}{2}} = \frac{16\pi}{Re}. \quad (8.39)$$