

MARIANA FERNANDES DOS SANTOS VILLELA

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE ESCOAMENTOS
BIFÁSICOS USANDO O MÉTODO ESPECTRAL DE
FOURIER**



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA**

2011

MARIANA FERNANDES DOS SANTOS VILLELA

**MODELAGEM MATEMÁTICA DE ESCOAMENTOS
BIFÁSICOS USANDO O MÉTODO ESPECTRAL DE FOURIER**

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: Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos.

Orientador: Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto

Co-orientador: Dra. Millena Martins Villar

Uberlândia - MG

2011

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

V735m Villela, Mariana Fernandes dos Santos, 1985-
Modelagem matemática de escoamentos bifásicos usando o Metodo Espectral de Fourier / Mariana Fernandes dos Santos Villela.
- 2011.
100 f. : il.

Orientador: Aristeu da Silveira Neto.
Co-orientadora: Millena Martins Villar.

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

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

CDU: 621

À minha mãe e à minha vó Maria Cândida...

AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Uberlândia e à Faculdade de Engenharia Mecânica pela oportunidade de realizar este Curso.

Ao Prof. Dr. Aristeu da Silveira Neto pela orientação, paciência e ensinamentos, dados a mim durante toda essa jornada.

À pesquisadora Dra. Milena M. Villar pela co-orientação, apoio e experiência na área, transmitidos ao longo desse trabalho.

Aos membros do Laboratório de Mecânica dos Fluidos da UFU - MFLab -, em especial e com muito carinho ao meu amigo Felipe Pamplona Mariano, pela paciência, apoio, idéias e ajudas que foram de extrema importância durante toda essa dissertação.

À minha mãe Maristela Fernandes dos Santos Nassar e a minha avó Maria Cândida Aparecida dos Santos pela atenção, educação e amor dedicados a mim por todos esses anos de minha vida e por sempre acreditarem em mim.

Ao meu avô Maurélio dos Santos que, mesmo ausente nesta etapa de minha vida, contribuiu com extrema importância na concretização desse sonho.

Ao meus irmãos Sarah Fernandes Nassar, Rodrigo Fernandes dos Santos Nassar e ao meu padrasto Reginaldo Ferreira Nassar pelo carinho.

Ao meu tio Marcelo Fernandes dos Santos pelo incentivo.

Ao Ismael Rodrigues de Oliveira Júnior e sua família pelo amor dedicados à mim e por estar do meu lado nos momentos que mais precisei.

Ao CNPQ pelo apoio financeiro através da bolsa de estudos e à FEMEC e coordenação de pós-graduação pela infra-estrutura.

VILLELA, M. F. S., **Modelagem matemática de escoamentos bifásicos usando o método espectral de Fourier** 2011. 168 f. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

RESUMO

A simulação numérica de escoamentos bifásicos requer alta acurácia para se obter maiores detalhes do escoamento. Além disso, busca-se baixo custo computacional, pois de modo geral, as metodologias necessitam de um elevado refinamento da malha ou possuem um grande estêncil de discretização, o que as torna onerosas. Portanto, o presente trabalho propõe a utilização do método pseudo-espectral de Fourier para resolver problemas de escoamentos multifásicos, o qual tem alta ordem de convergência numérica e um baixo custo computacional, devido ao algoritmo denominado FFT (*Fast Fourier Transform*). Além destas vantagens, este método, ao resolver as equações de Navier-Stokes, desacopla a pressão da velocidade, através do método da projeção, sem a necessidade de resolver a equação de Poisson. Para tratar escoamentos bifásicos com geometria móvel e deformável, utiliza-se o método pseudo-espectral de Fourier acoplado com o método híbrido *Front-Tracking/ Front-Capturing*. Este método híbrido trabalha com dois domínios, sendo um euleriano, onde se resolvem as equações para o fluido (equação de conservação de massa e as equações de Navier-Stokes) e o outro, móvel, lagrangiano, utilizado para as interfaces. Para este método, ambos os domínios são acoplados pelo processo de interpolação e distribuição e não apresentam restrição quanto ao movimento da malha lagrangiana sobre o domínio euleriano e quanto à deformação da fase dispersa. A verificação da metodologia é apresentada através da técnica da solução manufaturada e a validação através de testes de correntes espúrias e *vortex flow*. Os resultados para ascensão de uma única bolha são apresentados e comparados com dados experimentais de Clift, Grace e Weber (1978).

Palavras Chave: Método pseudo-espectral de Fourier, Método híbrido Front-Tracking/ Front-Capturing, Escoamentos bifásicos.

VILLELA, M. F. S., **Mathematics modeling of two-phase flows using spectral method of Fourier**. 2011. 168 f. Masters dissertation, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

ABSTRACT

Numerical simulations of two-phase flow require high accuracy in order to obtain detailed information of the flow. Low computational cost is also very important, because in general, numerical simulation require a high grid refinement, which makes them onerous. Thus, in the present work the authors propose the use of Fourier pseudo-spectral method to solve multiphase flow problems. This method presents high order numerical convergence and low computational cost, due to the algorithm called FFT (*Fast Fourier Transform*). In addition, when this method is applied to solve the Navier-Stokes equations, decouples the pressure and velocity through the projection method, without the need to solve the pressure Poisson equation. To handle the two-phase flow with moving and deformable geometries, Fourier pseudo-spectral method coupled with the hybrid method Front-Tracking/ Front-Capturing. This hybrid method works with two fields, one Eulerian, where the Navier-Stokes and continuity equations are solved for the fluid and the Lagrangean equations are solved for interfaces. For this method, both domains are coupled by interpolation and distribution process. Nevertheless, the lagrangean interface are transported through the Eulerian domain. The verification and validation is presented using manufactured solution. Spurious currents and vortex flow were simulated and good results were obtained. The results for the rise of a single bubble are presented and compared with experimental data Clift, Grace e Weber (1978).

Keywords: Pseudo-spectral method of Fourier, hybrid method Front-Tracking/ Front-Capturing, two-phase flows

LISTA DE FIGURAS

1.1	Exemplo de escoamento gás-líquido ((KILLEEN, 2010) apud (MIRANDA, 2010)).	3
1.2	Classificação dos escoamentos gás-líquido em um tubo vertical. Adaptado de Yeoh e Tu (2010).	4
1.3	(a) Escoamento sobre um prisma quadrado (MARIANO et al., 2010) e (b) campo de pressão em uma cavidade com tampa deslizante (MARIANO et al., 2010) resolvidos com o método pseudo-espectral de Fourier.	7
1.4	Escoamento de um jato em desenvolvimento espacial (MOREIRA, 2010). . .	7
3.1	Representação dos domínios euleriano $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ e lagrangiano Γ para um corpo imerso de geometria arbitrária.	14
3.2	Linhas de corrente ao redor de uma interface circular, onde $\rho(\phi)$ é a massa específica variável na interface estendida.	17
3.3	Parâmetro s para uma interface Γ representada por uma curva fechada. . . .	18
3.4	Diagrama de Clift, Grace e Weber (1978).	21
3.5	Definição do plano π (SILVEIRA-NETO, 2002).	26
3.6	Projeção dos termos fonte, advectivo, difusivo e do termo gravitacional sobre o plano π	28
4.1	Representação esquemática da malha euleriana e da malha lagrangiana. . . .	33
4.2	Comparação entre a resolução da TDF e da FFT (MARIANO, 2009).	35
4.3	Representação esquemática da malha lagrangiana, sobre a malha euleriana. .	40

4.4	Exemplo de fenômeno de Gibbs em uma função do tipo onda quadrada (NAVARRA, 1994).	44
5.1	Campo da componente: (a) velocidade u e (b) pressão p , para propriedades físicas constantes.	49
5.2	Campo da componente: (a) velocidade u e (b) pressão p , para propriedades físicas variáveis.	51
5.3	(a) salto de pressão e (b) correntes espúrias.	54
5.4	Campo da função indicadora em $t = 0$ [s]	55
5.5	Perfil horizontal do campo da função indicadora em $t = 0$ [s] e $y = 0,5$ [m] .	55
5.6	Evolução temporal do campo da função indicadora: (a) $t = 5$ [s]; (b) $t = 20$ [s]; (c) $t = 40$ [s]; (d) $t = 60$ [s]; (e) $t = 75$ [s]; (f) $t = 80$ [s].	56
5.7	Esquema do domínio de cálculo utilizado para a simulação numérica de uma única bolha ascendente.	57
5.8	Evolução temporal do campo de massa específica para $Eu = 1$ e $M = 0,01$. .	58
5.9	(a) Linhas de corrente em uma bolha ascendente e (b) visualização experimental da recirculação interna em uma bolha ascendente (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978).	59
5.10	Evolução temporal do campo de pressão para $Eu = 1$ e $M = 0,01$	60
5.11	Salto de pressão ao longo de x e y na altura do centro da bolha para $t^* = 9,53$ para $Eu = 1$ e $M = 0,01$	60
5.12	Evolução temporal do campo da componente horizontal de velocidade para $Eu = 1$ e $M = 0,01$	61
5.13	Evolução temporal do campo da componente vertical de velocidade para $Eu = 1$ e $M = 0,01$	62
5.14	Evolução temporal do campo de vorticidade para $Eu = 1$ e $M = 0,01$	62
5.15	Perfil horizontal do campo de vorticidade em $t^* = 0.00067$, na altura do centro da bolha, para $Eu = 1$ e $M = 0,01$	63
5.16	Evolução temporal do número de Reynolds para $Eu = 1$ e $M = 0,01$	63

5.17	Evolução vertical do transporte da interface sem o processo de equidistribuição e remalhagem.	64
5.18	Malha euleriana sobreposta pela malha lagrangiana sem o processo de equidistribuição e remalhagem.	65
5.19	(a) Velocidade horizontal em $t^* = 19,07$ para $Eo = 1$ e $M = 0,01$ e (b) vorticidade em $t^* = 19,07$ para $Eo = 1$ e $M = 0,01$	66
5.20	Malha euleriana sobreposta pela malha lagrangiana.	67
5.21	Evolução temporal do número de Reynolds.	68
5.22	Evolução temporal do campo de massa específica para $Eo = 100$ e $M = 10.000$	69
5.23	Evolução temporal do campo de vorticidade para $Eo = 100$ e $M = 10.000$	69
5.24	Evolução temporal do número de Reynolds.	70
5.25	Evolução temporal do campo de massa específica para $\lambda = 1/100$	71
5.26	Perfil horizontal do campo de massa específica para diferentes λ	72
5.27	Perfil horizontal do campo de massa específica para diferentes λ em $t^* = 1,65$ na altura do centro da bolha.	72
5.28	Evolução temporal do número de Reynolds terminal para diferentes razões de massa específica λ	73

LISTA DE TABELAS

4.1	Coefficientes dos esquema RK46 (ALLAMPALLI et al., 2009)	39
5.1	Norma L_2 para u, v e p com ρ e μ constantes em $t = 5$ [s].	48
5.2	Norma L_2 para u, v e p com ρ e μ variáveis em $t = 5$ [s].	50
5.3	Magnitude da corrente espúrias Ca para uma malha fixa 32×32 para diferentes La	53
5.4	Magnitude das correntes espúrias Ca para La fixo e a malha variável.	53

LISTA DE SÍMBOLOS

Siglas

<i>AUX</i>	-	variável auxiliar do Runge-Kutta
<i>CFD</i>	-	“Computational Fluid Dynamics”
<i>TDF</i>	-	transformada discreta de Fourier
<i>TDIF</i>	-	transformada discreta inversa de Fourier
<i>EDP</i>	-	Equação Diferencial Parcial
<i>FEMEC</i>	-	Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Uberlândia
<i>FFT</i>	-	“Fast Fourier Transform”, transformada rápida de Fourier
<i>IMERSPEC</i>	-	Metodologia da Fronteira Imersa acoplada com a metodologia pseudo-espectral de Fourier
<i>AMR2D</i>	-	Adaptative mesh refinement two-dimension
<i>MFI</i>	-	Metodologia da Fronteira Imersa
<i>MFLab</i>	-	Laboratório de Mecânica dos Fluidos da Universidade Federal de Uberlândia
<i>MPEF</i>	-	Metodologia Pseudo-Espectral de Fourier
<i>TNL</i>	-	termo não linear das equações de Navier-Stokes
<i>UFU</i>	-	Universidade Federal de Uberlândia
<i>DIF</i>	-	termo viscoso (difusivo) das equações de Navier-Stokes
<i>GRAV</i>	-	termo gravitacional das equações de Navier-Stokes
<i>TIF</i>	-	transformada inversa de Fourier
<i>sen</i>	-	seno
<i>cos</i>	-	cosseno

Operadores

∂	- derivada parcial
$\int$	- integral
$\oint$	- integral de linha
$\max$	- máximo valor
$\min$	- mínimo valor
$\sum$	- somatória
$\wp$	- projeção
D	- derivada total
∂	- derivada parcial
$\langle \rangle$	- média espacial
$ $	- módulo
$\cdot$	- produto vetorial
$\lim$	- limite
$*$	- produto de convolução
∇	- laplaciano
$\log$	- logaritmo
$\times$	- rotacional ou multiplicação
int	- valor inteiro
$'$	- primeira derivada
$''$	- segunda derivada
Π	- produtório
$\in$	- pertence

Subscritos

l	- índice da notação tensorial
k	- índice da notação tensorial
∞	- infinito
q	- posição dos pontos lagrangianos
c	- fase contínua
d	- fase dispersa
b	- centróide ou bolha
n	- posição do vetor x

Sobrescritos

e	- variável analítica
it	- iteração atual
$\hat{}$	- variável no espaço espectral de Fourier
n	- ordem da derivada
$*$	- adimensional

Letras gregas

α	- variável auxiliar do Runge-Kutta, uma constante qualquer ou razão volumétrica (razão do volume entre a fase dispersa e fase contínua)
β	- variável auxiliar do Runge-Kutta
Δt	- discretização do tempo em $[s]$
Δs	- discretização do comprimento do domínio lagrangiano em $[m]$
Δx	- discretização do comprimento do domínio na direção x em $[m]$
Δy	- discretização do comprimento do domínio na direção y em $[m]$
Δp	- salto de pressão
θ	- função filtro ou ângulo da circunferência
Γ	- domínio lagrangiano
μ	- viscosidade dinâmica do fluido em $[Ns/m^2]$
π	- plano de divergência nula, ou número real constante $\pi = 3,14159265359$
ρ	- massa específica do fluido em $[kg/m^3]$
ρ_o	- massa específica do fluido em $[kg/m^3]$ obtida a partir da razão volumétrica
ϕ	- função qualquer
Ω	- domínio euleriano
Ω_1	- domínio euleriano externo à interface lagrangiana
Ω_2	- domínio euleriano interno à interface lagrangiana
τ	- tangente unitária
δ	- função delta de Dirac ou delta de Kronecker
κ	- curvatura unitária
σ	- coeficiente de tensão superficial
λ	- razão entre as massas específicas da fase dispersa e da fase contínua
γ	- razão entre as viscosidades da fase dispersa e da fase contínua
$\vec{\omega}$	- rotacional do divergente da velocidade ou função filtro

Letras latinas

$\vec{f}$	- campo de força euleriano em $[N/m^3]$
$\vec{F}$	- campo de força lagrangiano em $[N/m^3]$
h	- espessura da interface ou espaçamento entre pontos da malha euleriana
$\vec{k}$	- vetor número de onda em $[m^{-1}]$
L	- comprimento do domínio em $[m]$ ou norma do erro ou comprimento de onda
N_x	- número de pontos de colocação na direção x
N_y	- número de pontos de colocação na direção y
p	- campo de pressão euleriano em $[N/m^2]$
P	- campo de pressão lagrangiano em $[N/m^2]$
s	- superfície lagrangiana
$\vec{r}$	- vetor distância entre o centro de massa de uma partícula até um ponto lagrangiano
Re	- número de Reynolds
RHS	- variáveis que estão do lado direito de uma equação diferencial parcial
t	- tempo em $[s]$
$\vec{u}$	- velocidade euleriana em $[m/s]$
$\vec{U}$	- velocidade lagrangiana em $[m/s]$
$\vec{x}$	- vetor posição de um ponto euleriano $[m]$
$\vec{X}$	- vetor posição de um ponto lagrangiano $[m]$
W	- função peso utilizada nos processos de distribuição e interpolação
$\vec{g}$	- aceleração gravitacional
g	- função filtro
I	- função indicadora ou tensor identidade
n	- normal unitária
M	- total de pontos lagrangianos ou número de Morton
u_a	- velocidade auxiliar
Eu	- número de Eötvös
N	- número de Galileo ou número de pontos da malha
d_d	- diâmetro da bolha
r_b	- posição do centróide
A_b	- área da bolha
V_b	- velocidade terminal da bolha
r	- raio da bolha
i	- número complexo $\sqrt{-1}$
e	- exponencial
$\vec{r}$	- parâmetro de transformação
$\vec{s}$	- parâmetro de transformação
O	- número de operações
D	- núcleo de Dirac
x_{cent}	- coordenada x do centro da circunferência
y_{cent}	- coordenada y do centro da circunferência
La	- número de Laplace
Ca	- número de capilaridade
tc	- tempo característico

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Organização do trabalho	6
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	8
2.1	Escoamentos multifásicos	8
2.2	Método espectral de Fourier	10
3	MODELO MATEMÁTICO	13
3.1	Modelagem matemática para escoamentos bifásicos	13
3.1.1	Formulação euleriana	14
3.1.2	Formulação lagrangiana	17
3.1.3	Acoplamento euleriano-lagrangiano	19
3.1.4	Parâmetros adimensionais	19
3.2	Modelagem matemática usando a metodologia espectral de Fourier	23
3.2.1	Transformadas de Fourier	23
3.2.2	Propriedades da Transformada de Fourier	24
3.2.3	Transformação das equações de Navier-Stokes para o espaço espectral de Fourier	25
3.2.4	Acoplamento das malhas lagrangiana e euleriana no espaço espectral de Fourier	29
3.3	Resumo do modelo matemático	31
4	MÉTODO NUMÉRICO	33
4.1	Discretização das equações pertencentes ao domínio euleriano	34

4.1.1	Discretização espacial	34
4.1.1.1	DFT e FFT	34
4.1.1.2	Tratamento do termo não-linear	36
4.1.1.3	Cálculo das propriedades físicas	38
4.1.2	Discretização temporal das equações de Navier-Stokes	39
4.2	Discretização das equações pertencentes ao domínio lagrangiano	39
4.2.1	Discretização da força lagrangiana	40
4.2.2	Discretização do avanço da interface	42
4.3	Discretização espacial para o acoplamento lagrangiano-euleriano	42
4.4	Processo de filtragem	43
4.5	Resumo dos passos da solução numérica	44
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	46
5.1	Verificação do código numérico	46
5.1.1	Propriedades físicas constantes	48
5.1.2	Propriedades físicas variáveis	50
5.2	Correntes espúrias	52
5.3	Validação da função indicadora	54
5.4	Simulações numéricas de escoamentos bifásicos	57
5.4.1	Ascensão de uma bolha cilíndrica sem remalhagem lagrangiana	58
5.4.2	Ascensão de uma bolha cilíndrica com remalhagem dos pontos lagrangianos	65
5.4.3	Ascensão de uma bolha deformando com remalhagem dos pontos lagrangianos	68
5.4.4	Ascensão de uma bolha para altas razões de densidade com remalhagem dos pontos lagrangianos	69
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	74
6.1	Conclusões	74
6.2	Trabalhos futuros	76

7 REFERÊNCIAS

77

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A dinâmica dos fluidos estuda o comportamento físico macroscópico dos fluidos. Existem, basicamente, duas maneiras para compreendê-la: os métodos experimentais e os métodos teóricos. Ambas buscam a representação dos fenômenos físicos o mais próximos possível da realidade.

Os estudos experimentais evoluíram com o advento de instrumentos de dimensões praticamente microscópicas e de alta precisão, os quais são aplicadas a escoamentos complexos. Porém, ainda assim, o ensaio experimental se torna, em muitos casos, de difícil reprodução, devido às condições de operações extremas de temperaturas, pressões, velocidades ou geometrias complexas. Desta maneira, a utilização de CFD se torna uma excelente opção de estudo tanto qualitativo como quantitativo.

A classe dos métodos teóricos é formada pelos métodos analíticos e os métodos numéricos. Ambos tem por objetivo resolver as equações diferenciais que formam os modelos matemáticos. A solução dos modelos matemáticos analiticamente é aplicável apenas a problemas físicos muito simples, porém são extremamente importantes para verificação de códigos numéricos, os quais, uma vez verificado, podem ser aplicados a problemas mais complexos.

Dentre os métodos teóricos encontra-se a dinâmica dos fluidos computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) a qual baseia-se nos desenvolvimentos e utilização de ferramentas numéricas e computacionais para estudar escoamentos de fluidos e os fenômenos

ligados a eles.

A experimentação numérica ou a dinâmica dos fluidos computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) baseia-se nos desenvolvimentos e utilização de ferramentas numéricas e computacionais para estudar escoamentos de fluidos e os fenômenos ligados a eles. Através desta ferramenta torna-se possível resolver problemas complexos com condições de contorno igualmente complexas. Além disso, com o grande desenvolvimento de computadores de alta velocidade e de alta capacidade de armazenamento, os códigos numéricos apresentam resultados com elevada rapidez.

Na engenharia, pratica-se a associação de simulação numérica com experimentos laboratoriais. A união resulta em projetos melhores e mais baratos. Além disso, ambos caminham juntos no sentido de validação dos resultados obtidos através das experimentações realizadas.

O desenvolvimento de CFD iniciou-se em meados de 1960, obtendo excelentes resultados na década de 1970. As aplicações na indústria teve início na década de 1980. Em 1990, com o uso das ferramentas de CFD em projetos aeronáuticos e veiculares, a aceitação e divulgação da metodologia teve um grande desenvolvimento. A partir daí, essa ferramenta tornou-se objeto de estudo de físicos, matemáticos, engenheiros, químicos, biólogos, entre outros.

A presente dissertação encontra-se no contexto da dinâmica dos fluidos computacional aplicada à escoamentos multifásicos, os quais são escoamentos que apresentam duas ou mais fases escoando simultaneamente. Em geral, podem ser encontrados em diferentes formas: escoamentos gás-sólido, líquido-sólido, gás-líquido, ou em uma forma mais complexa, gás-líquido-sólido.

Os escoamentos gás-líquido, podem ser exemplificado com o movimento de bolhas em um líquido ou gotas líquidas em um gás. Pode-se citar, como aplicação industrial, os sistemas de dessalinização de reatores químicos, motores de combustão interna, o escoamento que acontece em uma caldeira (MIRANDA, 2010) e na extração de petróleo, entre outros (YEOH; TU, 2010). A Fig. 1.1 ilustra uma caldeira, onde, no interior do reservatório, a água é aquecida e tem-se a mistura água mais bolhas de vapor. Em processos naturais pode-se citar as ondas do oceano. No âmbito biológico tem-se, como exemplo, o fluxo sanguíneo (YEOH; TU, 2010). Devido a vasta aplicação, estudar escoamentos bifásicos é de grande

importância para o desenvolvimento e entendimento nas áreas industriais, biológicas e nos fenômenos naturais.

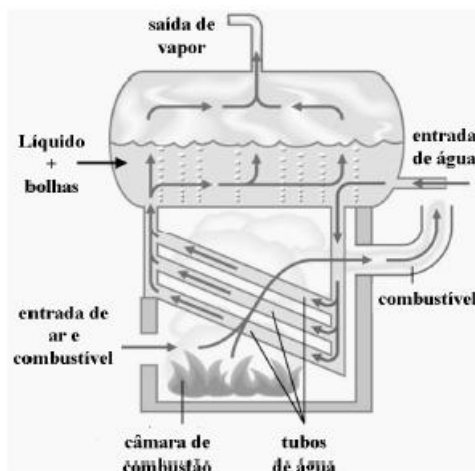


Figura 1.1: Exemplo de escoamento gás-líquido ((KILLEEN, 2010) apud (MIRANDA, 2010)).

De forma mais abrangente, os escoamentos gás-líquido são constituídos de um fluido ambiente chamado fase contínua e da fase dispersa, que são as bolhas ou gotas presentes no escoamento (YEOH; TU, 2010). 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-líquido estão mostradas na Fig. 1.2 adaptada de Yeoh e Tu (2010).

Para simular numericamente este tipo de escoamento é necessário alta acurácia ¹ numérica para aproximar os resultados do problema estudado dos detalhes físicos envolvidos neste tipo de escoamento. Porém, para atingir alta acurácia pode-se utilizar metodologias de baixa ordem aliada com um grande refinamento de malha, o que eleva, consideravelmente, o custo computacional ². Outra forma é utilizar metodologias de alta ordem, como os métodos dos volumes finitos e das diferenças finitas de alta ordem de convergência ³ numérica, as quais

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

²Custo computacional são relativos ao tempo de CPU e uso de memória RAM.

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

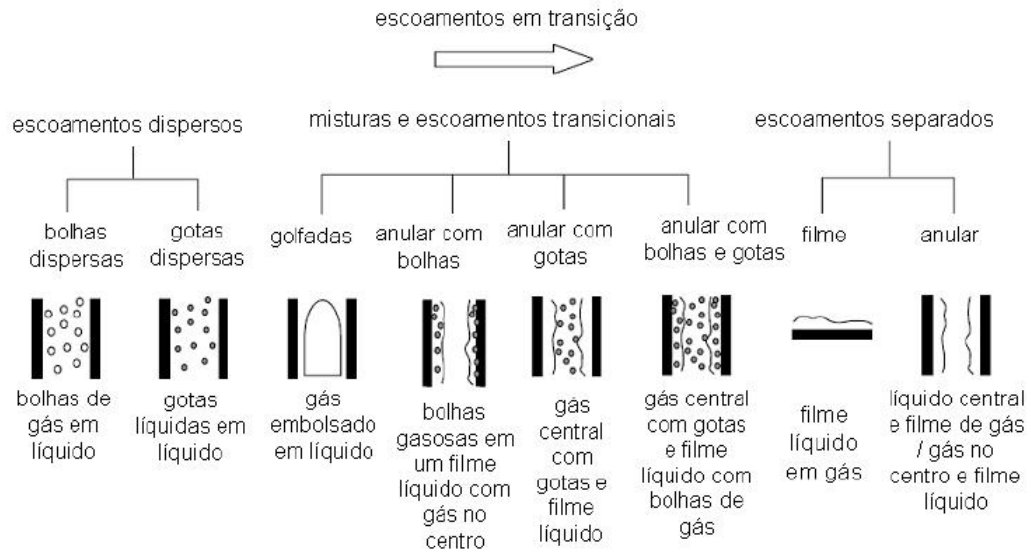


Figura 1.2: Classificação dos escoamentos gás-líquido em um tubo vertical. Adaptado de Yeoh e Tu (2010).

demandam elevado custo computacional devido ao grau de estencil de discretização. Dessa maneira, busca-se métodos que tenham acurácia e eficiência computacional, principalmente devido a fina interface que separa a fase contínua da fase dispersa.

Devido à estas dificuldades, propõe-se no presente trabalho, a resolução de escoamentos bifásicos gás-líquido utilizando o método pseudo-espectral de Fourier acoplado com o método híbrido *Front-Tracking/ Front-Capturing*.

O método pseudo-espectral de Fourier é utilizado, dentre as metodologias de alta ordem devido à sua alta precisão e alta ordem de convergência numérica, as quais alcançam até 10 dígitos de precisão. Com o método das diferenças finitas, ou método dos elementos finitos obteriam dois ou três dígitos (TREFETHEN, 2000).

Além da alta precisão e convergência numérica, outra vantagem de se trabalhar com este método vem do trabalho de Cooley e Tukey (1965) apud Briggs e Henson (1995), os quais desenvolveram o algoritmo denominado Transformada Rápida de Fourier (FFT). A FFT trabalha com um procedimento denominado rotação de bit, o que torna o cálculo da Transformada Discreta de Fourier (TDF) muito eficiente. Esse custo computacional torna atrativa a utilização do método pseudo-espectral de Fourier para resolver equações diferenciais parciais.

Especificamente quando se trabalha com as equações de Navier-Stokes, aplicadas à

escoamentos incompressíveis, no espaço espectral é possível utilizar o método da projeção do termo gradiente de pressão (CANUTO et al., 2007), levando à eliminação do cálculo da pressão, via equação de Poisson. Isso torna a metodologia vantajosa, pois não precisa resolver sistemas lineares para solucionar equações elípticas. Esse fato se torna especialmente interessante quando se trabalha com fluidos que possuem propriedades físicas altamente diferentes.

A grande desvantagem do método pseudo-espectral de Fourier está nas condições de contorno (CANUTO et al., 1987). Para utilizar a transformada discreta de Fourier é preciso trabalhar apenas com condições de contorno periódicas, limitando à utilização deste método à simulação de alguns tipos de escoamentos, como por exemplo, jatos em desenvolvimento temporal (SOUZA, 2005; MOREIRA, 2007) e turbulência homogênea isotrópica (POPE, 2000), ou seja, a problemas periódicos em todas as direções.

Os estudos sobre o método pseudo-espectral de Fourier iniciou-se no MFLab-UFU, com o trabalho de Souza (2005). Atualmente, existem, no MFLab, três frentes de pesquisa em desenvolvimento. Uma delas é o acoplamento do método da fronteira imersa com o método pseudo-espectral de Fourier (MARIANO, 2007, 2009). Para isso foi desenvolvido um código bidimensional, o qual está sendo utilizado para a implementação e testes desta nova metodologia. A outra linha de estudos é focada em escoamentos turbulentos, e utiliza esta metodologia para simular jatos periódicos temporais e espaciais em um código computacional tridimensional (MOREIRA, 2007) e jatos em desenvolvimento espacial (MOREIRA, 2010). A terceira frente de pesquisa, assunto do presente trabalho, baseia-se na utilização deste método para simular escoamentos bifásicos bidimensionais (VILLELA et al., 2010).

Como dito anteriormente, o objetivo do presente trabalho é a simulação numérica de escoamentos bifásicos, e, mais especificamente, é a simulação numérica da ascensão de uma bolha. Este problema envolve a análise de escoamentos ao redor de geometrias complexas que podem ser móveis e deformáveis, como o caso de bolhas em movimento. Métodos clássicos têm sido empregados na busca de se determinar maiores detalhes de escoamentos multifásicos, sendo que, cada método possui suas vantagens e desvantagens. No presente trabalho, utiliza-se o método *Front-Tracking/Front-Capturing* proposto por Esmaeeli e Tryggvason (1992), o qual se baseia no cálculo direto das forças interfaciais atuando no elemento diferencial da

interface aliado com a presença de uma função indicadora para atualização das propriedades físicas.

O método híbrido *Front-Tracking/Front-Capturing* faz uso de um conjunto de pontos, chamados de pontos lagrangianos e são responsáveis por acompanhar a interface, sobre uma malha cartesiana fixa, denominada malha euleriana, onde são resolvidas as equações de Navier-Stokes (ANNALAND et al., 2006). Para o cálculo das propriedades físicas utiliza-se uma função indicadora, que deve, a cada passo no tempo, ser atualizada. Este método, embora a alta acurácia, para alguns casos, torna-se complexo de se implementar, pois a remalhagem dinâmica da interface lagrangiana e os mapeamentos desses pontos são necessários e devem ser realizados a cada passo do tempo.

A desvantagem do método aparece na interação de múltiplas bolhas, pois pode haver rompimento e coalescência entre elas. O método trabalha com uma separação de malhas para cada interface, requerendo técnicas geométricas para realizar esta fase da simulação.

No presente trabalho parte-se de um código desenvolvido no MFLab (MARIANO; MOREIRA; SILVEIRA-NETO, 2010), o qual utiliza a metodologia denominada IMERSPEC, contendo o método pseudo-espectral de Fourier e o método da fronteira-imersa para a representação de interfaces rígidas. Esse código numérico bidimensional foi validado utilizando problemas clássicos da Mecânica dos Fluidos (MARIANO et al., 2010), tais como, escoamento sobre prisma quadrado (Fig. 1.3, (a)) e cavidade com tampa deslizante (Fig. 1.3, (b)). Análises tridimensionais também tem sido estudadas com esta metodologia. A Fig. 1.4 ilustra a aplicação desta técnica em 3D.

O objetivo do presente trabalho é a adaptação do código IMERSPEC 2D para a simulação de escoamentos bifásicos, onde deve-se considerar que a interface é uma fronteira móvel e deformável. Desta forma, amplia-se a gama de problemas que o método pseudo-espectral de Fourier pode ser aplicado em CFD.

1.1 Organização do trabalho

A presente dissertação está dividida em seis capítulos, sendo que, no Capítulo I apresenta-se a motivação para o trabalho. No capítulo II é apresentado um levantamento

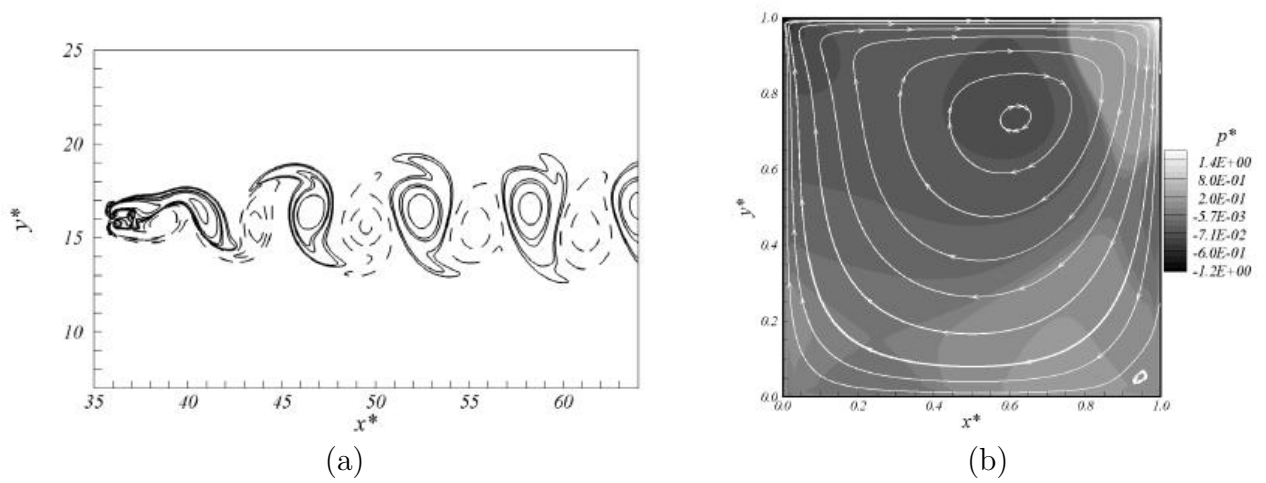


Figura 1.3: (a) Escoamento sobre um prisma quadrado (MARIANO et al., 2010) e (b) campo de pressão em uma cavidade com tampa deslizante (MARIANO et al., 2010) resolvidos com o método pseudo-espectral de Fourier.

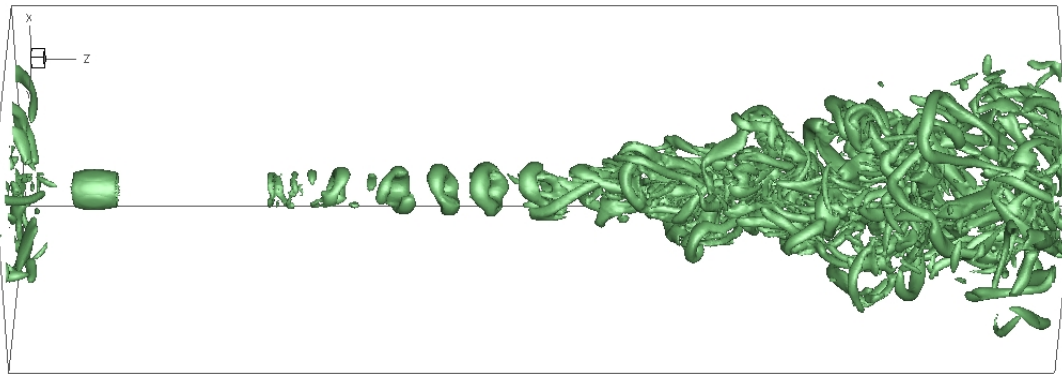


Figura 1.4: Escoamento de um jato em desenvolvimento espacial (MOREIRA, 2010).

bibliográfico sobre os temas relevantes ao desenvolvimento do trabalho principalmente em temas ligados ao método pseudo-espectral de Fourier para aplicação numérica em problemas de escoamentos multifásicos. O modelo matemático utilizado é apresentado no Capítulo III. No Capítulo IV apresenta-se uma descrição do método numérico. Os resultados obtidos para aplicação do problema de interesse, assim como a validação das modificações apresentadas no código, são encontradas no Capítulo V. O Capítulo VI conclui-se o presente trabalho e apresenta sugestões para desenvolvimentos futuros.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo apresenta-se uma revisão bibliográfica sobre a modelagem matemática e a metodologia implementada para a simulação numérica de escoamentos bifásicos bidimensionais. Os temas abordados se baseiam em escoamentos multifásicos e as possíveis técnicas de modelagem que envolvem este problema. Além disso, é feita uma revisão da literatura abordando os métodos espectrais.

2.1 Escoamentos multifásicos

A complexidade física envolvida nos escoamentos multifásicos, assim como a dinâmica das partículas, tem-se destacado na pesquisa científica. Iniciou-se, os estudos experimentais de ascensão de bolhas de gases em um fluido estático na década de 60, com os trabalhos de Datta, Napier e Newitt (1950), Peebles e Garber (1953), Davidson e Schuler (1960), Ramakrishnan, Kumar e Kuloor (1969) e Khurana e Kumar (1969).

Clift, Grace e Weber (1978) relataram, através do Diagrama de Clift, dados experimentais da ascensão de bolhas isoladas, descrevendo sua forma geométrica a partir dos números adimensionais como número de Reynolds, número de *Eötvös* e número de Morton que serão definidos na seção 3.

A simulação numérica de escoamentos multifásicos que contém a presença de interface móvel e deformável requer um conjunto de equações que interagem entre si. As principais

dificuldades encontradas para este tipo de simulação é que a interface móvel e deformável é parte da solução e as propriedades físicas, densidade e viscosidade, e a pressão são funções descontínuas na interface. Existem, basicamente, duas técnicas utilizadas para este tipo de modelagem: captura (*capturing*) e acompanhamento (*tracking*) (VILLAR, 2007b).

Em captura da interface, a fronteira é implicitamente definida por meio de uma função global, por exemplo a densidade e função distância, a qual tem o papel de função indicadora. A principal vantagem do método é que não é necessária intervenção quando ocorre alguma transição topológica na interface que separa as fases. Porém, a desvantagem do método é a perda de acurácia devida à difusão da interface sobre várias células. Como exemplo pode-se citar *Level-set method* (SUSSMAN; SMERKA; OSHER, 1994; FEDKIW; OSHER, 2001), *shock-capturing method* (IDA, 2000) e *volume of fluid* (BUSSMAN; MOSTAGHIMI; S., 1999; SCARDOVELLI; ZALESKI, 1999).

O método de acompanhamento da interface é um método explícito e a interface move-se de forma independente sobre a malha em que está inserida. É um método mais acurado que o método de captura de interface, porém apresenta uma complexidade maior em relação ao algoritmo a ser implementado. Como exemplo destaca-se *Volume Tracking* (RUDMAN, 1997), *Boundary Integral* (ZALOSH, 1976; HOU; LOWENGRUB; SHELLEY, 2001) e *Immersed Boundary* (PESKIN, 1977).

Esmaeeli e Tryggvason (1992) utilizam o método de acompanhamento da interface, onde o domínio do escoamento é discretizado por diferenças finitas em uma malha estacionária e a interface é representada explicitamente por uma malha não-estruturada que se move através da malha estacionária. Devido ao fato que a interface se deforma continuamente é necessário reestruturar sua malha a cada passo no tempo, através da inserção e retirada de pontos. O tratamento explícito na interface, e também a presença de uma função indicadora para atualização das propriedades físicas, faz com que o método desenvolvido por Esmaeeli e Tryggvason (1992) se enquadre dentro dos modelos híbridos *Front-Tracking/Front-Capturing Method* derivado do Método da Fronteira Imersa desenvolvido por Peskin (1977). Segundo Esmaeeli e Tryggvason (1992), este método evita difusão numérica e oscilações, e, permite que a tensão superficial seja incorporada de uma forma natural.

A partir do estudo de Esmaeeli e Tryggvason (1992), Triggvason e co-autores tem con-

tribuído de forma significativa aos estudos de escoamentos multifásicos com baixos, médios e altos números de Reynolds. Isso pode ser comprovado nos trabalhos Esmaceli e Tryggvason (1998), Tryggvason et al. (2001), Tryggvason, Esmaceli e Al-Rawahi (2005), Tryggvason et al. (2006). De modo geral, essas contribuições se baseiam em simulações numéricas de bolhas isoladas e múltiplas bolhas em um domínio bidimensional e tridimensional, para diferentes Reynolds, obtendo resultados significativos para literatura.

Duas seqüências desta mesma técnica podem ser observadas no trabalho de Villar et al. (2010) e Miranda (2010). Villar et al. (2010), desenvolveu o código numérico denominado AMR2D, o qual resolve as equações de Navier-Stokes aplicando uma aproximação por diferenças finitas e para a modelagem da interface utiliza o método híbrido proposto por Esmaceli e Tryggvason (1992). Usou-se uma malha bloco estruturada refinada localmente que se adapta dinamicamente para recobrir as regiões de interesse do escoamento. Posteriormente, Miranda (2010) implementou, no código AMR2D desenvolvido originalmente por Villar (2007a), a presença de surfactantes no escoamento.

2.2 Método espectral de Fourier

As metodologias de alta ordem possuem ordem de convergência numérica maior que dois (FERZIGER; PERIC, 1996). Estes métodos costumam ter elevado custo computacional quando comparado com métodos de baixa ordem, porém atingem uma maior acurácia com o mesmo refinamento de malha. São muito utilizados em problemas de aeroacústica, simulação numérica direta (DNS) e simulação de grandes escalas (LES) (UZUN, 2003).

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

Os métodos espectrais são caracterizados pela expansão da solução em termos de

séries truncadas de funções de aproximação globais das variáveis independentes (BOYD, 2000). Como exemplo tem-se as séries de Fourier (GOTTLIEB; TADMOR, 1991), séries de polinômios de Legendre e séries de polinômios de Chebyshev (BOTELLA, 1997).

Em CFD, os métodos espectrais surgiram em meados de 1970 com o desenvolvimento dos métodos transformados, o qual realiza transformações entre os espaços físicos e espaços espectrais, com os trabalhos de Orzag (1970), Gottlieb e Orszag (1986).

Morchoisne (1984) desenvolveu um método utilizando o método espectral para estudar escoamentos incompressíveis em geometrias bidimensional e tridimensional simples. Patera (1984) desenvolveu o método dos elementos espectrais e o testou com polinômios de Chebyshev na equação de advecção-difusão unidimensional. Aplicou-o na simulação de escoamentos laminares bidimensionais sobre um canal com degrau. Além disso, outros autores contribuíram na utilização dos métodos espectrais aplicados a CFD, tais como, Deville e Mund (1985), Henderson e Karniadakis (1995), entre outros.

O método espectral de Fourier, o qual tem como expansão as séries de Fourier, utiliza as transformadas de Fourier e suas propriedades no intuito de algebrizar as equações diferenciais parciais (FIGUEIREDO, 2007). Com base nisso e no uso do algoritmo *Fast Fourier Transform* (FFT), desenvolvido por Cooley e Tukey (1965), calcula-se de forma eficiente, ou seja, com baixo custo computacional, a transformada de Fourier. Assim, tornou-se atrativo utilizá-las para resolver as equações de Navier-Stokes. Canuto et al. (1987) mostra que o custo computacional reduz de $O(N^2)$ para $O(N \log_2 N)$ quando se utiliza a FFT, comparando com a transformada discreta de Fourier, sendo N o número de pontos da malha, Fig. 4.2. Além disso, este método apresenta alta precisão e alta convergência numérica (TREFETHEN, 2000; BOYD, 2000).

Silveira-Neto (2002) utiliza o método espectral de Fourier para solução das equações de Navier-Stokes. Para desacoplar a pressão da velocidade, o autor propõe o método da projeção, eliminando a necessidade de se resolver a equação de Poisson para a pressão. Comparando com esquemas clássicos, esse procedimento equivale substituir a solução da equação de Poisson por um produto vetor-matriz que, em termos numéricos, tem um custo computacional mais baixo. Em termos físicos, ambos têm a mesma função, que é de garantir a conservação de massa.

Esta metodologia, no entanto, em presença de descontinuidades, surge o fenômeno de Gibbs (CANUTO et al., 1987). Isto acontece devido a existência do Teorema de Fourier (FIGUEIREDO, 2007), o qual prova que a convergência do método só acontece uniformemente se a função a ser transformada é contínua.

O fenômeno de Gibbs é caracterizado pelo aparecimento de oscilações nas soluções numéricas (CANUTO et al., 2007), e, para contornar as limitações dadas por ele, Kopriva (1986) apud Canuto et al. (2006) e Navarra (1994) propuseram a utilização do processo de filtragem. Ambos os autores estudaram a influência dos filtros na convergência numérica da solução e, concluíram que há um aumento significativo na ordem de convergência com este procedimento. Porém, o uso do filtro faz com que a acurácia do método espectral de Fourier diminua.

Mariano (2007) propôs acoplar, ao método pseudo-espectral de Fourier, com método da fronteira imersa (SILVA, 2002), afim de estender a metodologia espectral a problemas com condições de contorno não-periódicos. Para validar esta nova metodologia, a qual denomina-se IMERSPEC, o autor aplicou à problemas como cavidade com tampa deslizante e escoamentos sobre um prisma quadrado (MARIANO et al., 2010). Moreira (2010) utiliza esta metodologia aplicadas à escoamentos cisalhantes livres tridimensionais.

Especificamente, em problemas de escoamentos bifásicos, Liu e Shen (2003) usam o modelo de campo de fase para resolver problemas de mistura de dois fluidos incompressíveis, e, para aproximação numérica deste modelo o autor utiliza o método espectral de Fourier semi-discreto com condições de contorno periódicas.

No presente trabalho é utilizada a metodologia IMERSPEC, desenvolvida por Mariano et al. (2010), e adaptada para aplica-lá à escoamentos bifásicos. Para isso, foi acoplado à metodologia um método híbrido *Front-Tracking/Front-Capturing Method* para tratar interfaces móveis e deformáveis.

CAPÍTULO III

MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo trata-se da formulação matemática para a solução de problemas de escoamentos bifásicos utilizando o método pseudo-espectral de Fourier acoplado com o método híbrido *Front-Tracking/ Front-Capturing*. A modelagem matemática para escoamentos bifásicos é tratada na seção 3.1, onde se encontra tanto a formulação matemática adotada para o fluido, como um todo, como para a interface. Na seção 3.2 encontra-se a modelagem matemática da metodologia espectral de Fourier, onde se encontra a definição da transformada de Fourier e suas propriedades. Em seguida, será mostrada, a transformação das equações de Navier-Stokes para o espaço espectral de Fourier.

3.1 Modelagem matemática para escoamentos bifásicos

Nesta seção é apresentada a formulação matemática para escoamentos incompressíveis, isotérmicos e com a presença de dois fluidos newtonianos imiscíveis com propriedades físicas distintas. Esta formulação é fundamentada na mecânica do contínuo, onde o modelo matemático é expresso pelas equações do balanço de massa e da quantidade de movimento linear.

Os problemas aqui estudados são baseados na metodologia da fronteira imersa desenvolvida por Peskin (1977). Como mostrado na Fig. 3.1, o fluido, como um todo, é representado por um domínio ($\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$). A interface Γ é denominada domínio la-

grangiano, a qual pode se deslocar e deformar. Os subdomínios Ω_1 e Ω_2 representam a parte externa e interna da interface, respectivamente. As equações de Navier-Stokes, são usadas para modelar e descrever a dinâmica do fluido no domínio Ω e uma formulação lagrangiana modela a dinâmica da interface Γ .

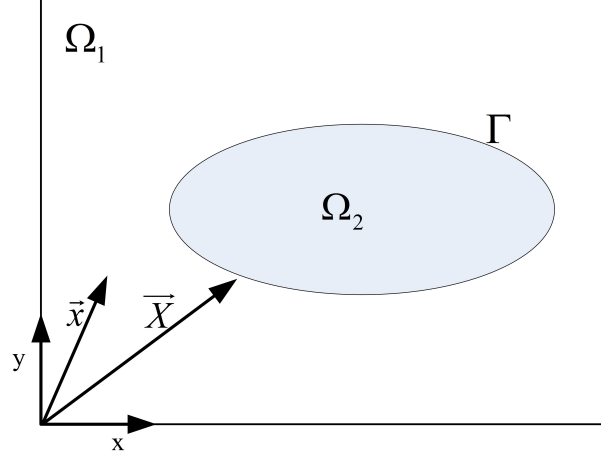


Figura 3.1: Representação dos domínios euleriano $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$ e lagrangiano Γ para um corpo imerso de geometria arbitrária.

3.1.1 Formulação euleriana

A formulação euleriana, para o domínio Ω , empregada para descrever a dinâmica de escoamentos, é dada pelas equações de Navier-Stokes. Essas operações, válidas para todo o domínio ($\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2$) são aqui apresentadas na forma tensorial, como em White (1991), para escoamentos incompressíveis e isotérmicos mas com propriedades físicas variáveis (Eqs. 3.1 e 3.2):

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

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

onde ρ e μ são respectivamente a massa específica e o coeficiente da viscosidade dinâmica do fluido, u_l é a componente l do vetor velocidade, p é o campo de pressão, f_l é a componente l do vetor campo de força externa que atua sobre uma partícula de fluido que se encontra em uma

interface, g_l é a componente l do vetor aceleração gravitacional e $l = 1, 2$, para problemas bidimensionais são as coordenadas espaciais, t é o tempo e k é o índice de somatório.

Para o cálculo das propriedades físicas da fase contínua, fase dispersa e para a região de transição entre ambas as fases utiliza-se relações de interpolações dadas pelas Eqs. 3.3 e 3.4:

$$\rho(\vec{x}, t) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)I(\vec{x}, t), \quad (3.3)$$

$$\mu(\vec{x}, t) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)I(\vec{x}, t), \quad (3.4)$$

onde μ_c e μ_d são os coeficientes de viscosidades e ρ_c e ρ_d são as massas específicas, da fase contínua (Ω_1) e dispersa (Ω_2), respectivamente, Fig. 3.1 e $I(\vec{x}, t)$ é a função indicadora ((SILVA, 2002)), calculada a cada passo no tempo, assume valores variando de 0 para fase contínua a 1 para fase dispersa (Eq. 3.5):

$$\frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_k} I(\vec{x}, t) = \frac{\partial}{\partial x_k} \int_{\Gamma} n_k(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}, \quad (3.5)$$

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

Como será visto, para se utilizar o método pseudo-espectral de Fourier é necessário o uso de condições de contorno periódicas. Deve-se, então, fazer um tratamento específico no termo gravitacional a fim de evitar uma aceleração descendente em todo fluido. Assim, é preciso adicionar às equações de Navier Stokes (Eq. 3.2) o termo $\rho_0 g$, onde $\rho_0 = (1 - \alpha)\rho_c + \alpha\rho_d$ e α é a fração volumétrica, ou seja, a razão entre o volume da fase dispersa (Ω_2) pelo volume da fase contínua (Ω_1).

Além disso, uma outra restrição é imposta a fim de tratar escoamentos bifásicos usando a modelagem para escoamentos incompressíveis e isotérmicos, ou seja, as propriedades físicas ρ e μ são constantes em cada fase, sofrendo variações apenas sobre a interface entre as duas fases.

Partindo-se da Eq. 3.1, decompondo o termo da advecção da massa e usando-se o fato que $\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$ para escoamentos incompressíveis, mostra-se que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_l \frac{\partial \rho}{\partial x_l} = \frac{D\rho}{Dt} = 0. \quad (3.6)$$

Isso mostra que ρ é constante sobre as linhas de corrente, exceto sobre aquelas que passam por uma interface. O mesmo raciocínio se aplica para a viscosidade dinâmica μ .

O termo fonte f_l (Eq. 3.7) permite a comunicação entre as equações de Navier-Stokes e as equações para o movimento da interface. Dessa forma, o termo fonte euleriano é diferente de zero sobre a interface e nulo fora da interface. Este comportamento é representado matematicamente usando a função delta de Dirac (δ), o que pode ser definido pelas Eqs. 3.8 e 3.9 (PESKIN, 1977).

$$f_l(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}, \quad (3.7)$$

onde,

$$\delta(\vec{x} - \vec{X}) = \begin{cases} 0 & \text{se } \vec{x} \neq \vec{X} \\ \infty & \text{se } \vec{x} = \vec{X} \end{cases}, \quad (3.8)$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x} = 1, \quad (3.9)$$

sendo $F_l(\vec{X}, t)$ a componente l da força lagrangiana calculada sobre as partículas de fluido que compõem a interface, a componente l do vetor x_l é a posição de uma partícula de fluido no domínio euleriano e a componente l do vetor X_l é a posição de uma partícula de fluido que está sobre o domínio lagrangiano (Γ), Fig. 3.1.

Como dito anteriormente, a distribuição da força lagrangiana para o domínio euleriano é feita através da Eq. 3.8, ou seja, $f_l(\vec{x}, t)$ é diferente de zero apenas quando há coincidência entre os domínios lagrangianos e eulerianos. Porém, numericamente, quase nunca existe essa coincidência, então faz-se o espalhamento dos pontos lagrangianos para os pontos eulerianos é feito por um conjunto finito de pontos.

Assim, a interface acaba se difundindo e se estendendo por alguns volumes discretos com espessura de ordem de discretização da malha, Δx , fazendo com que a conservação de massa não seja garantida nessa região. Isso ocorre pois as linhas de correntes que cruzam a interface estendida sofrem variação de massa específica, Fig. 3.2.

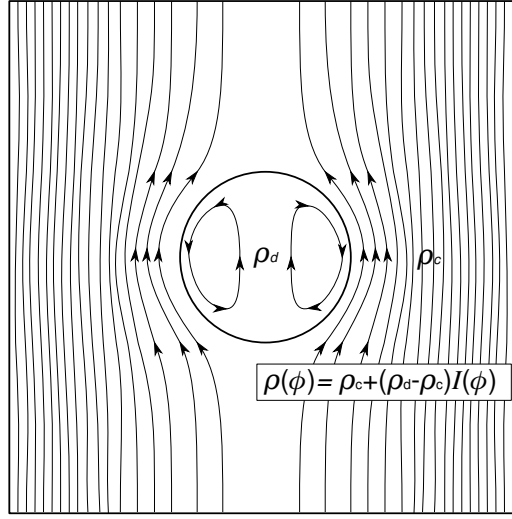


Figura 3.2: Linhas de corrente ao redor de uma interface circular, onde $\rho(\phi)$ é a massa específica variável na interface estendida.

Como observado por Villar (2007b), esta variação de massa é da ordem da espessura da interface estendida.

3.1.2 Formulação lagrangiana

A interface Γ é representada de forma paramétrica $(X(s, t), Y(s, t))$, que são as coordenadas dos pontos lagrangianos, e, $0 \leq s \leq L_b$, é o parâmetro de comprimento de arco da origem até a posição q , onde $1 \leq q \leq M$, sendo M o total de pontos lagrangianos. L_b é o comprimento total da interface (Fig. 3.3).

Para a modelagem da densidade de força lagrangiana $F_l(\vec{X}, t)$, Esmaceli e Tryggvason (1992) fizeram um balanço de força sobre um ponto arbitrário do segmento da interface, e, a partir dessa dedução, obtiveram:

$$F_l = \sigma \kappa n_l, \quad (3.10)$$

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

O movimento da interface é modelado utilizando-se Eq. 3.11:

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = U(\vec{X}, t), \quad (3.11)$$

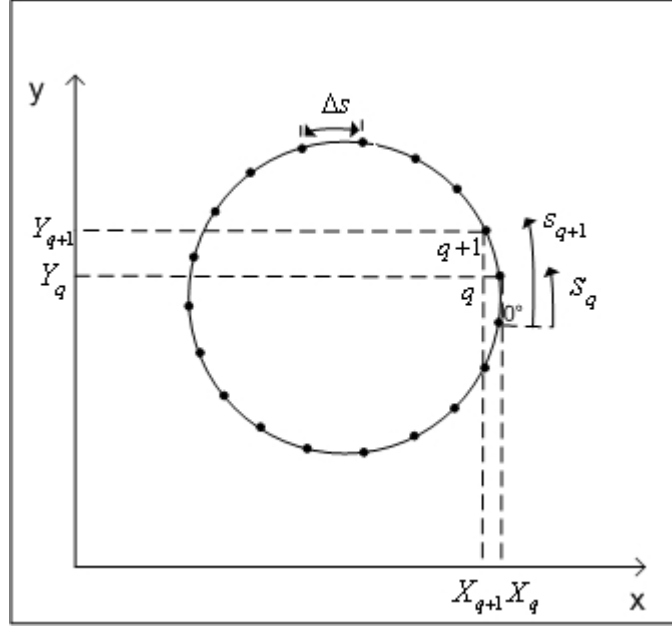


Figura 3.3: Parâmetro s para uma interface Γ representada por uma curva fechada.

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

$$U_l(s, t) = \int_{\Omega} u_l(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}. \quad (3.12)$$

Substituindo a Eq.3.12 na Eq.3.11 tem-se:

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = \int_{\Omega} u_l(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}. \quad (3.13)$$

Durante o escoamento, a interface se deforma e se estende, afetando a distribuição dos pontos lagrangianos, X_l . 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, 2007b). Para manter a acurácia dos cálculos, é necessária uma redistribuição dos pontos na interface, buscando assim 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 (CENICEROS; ROMA, 2004). Desta forma, a física do problema não é alterada. Assim, a Eq.3.13 pode ser reescrita como

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = \int_{\Omega} u_l(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X} + U_l^a(\vec{X}, t) \tau_l, \quad (3.14)$$

onde U_l^a é a componente l da velocidade auxiliar e foi proposta por Ceniceros e Roma (2004) como:

$$U_l^a(\vec{X}, t) = -U\tau_l(\vec{X}, t) + \int_0^s [\sigma_s \kappa U n_l - \langle \sigma_s \kappa U n_l \rangle] ds', \quad (3.15)$$

onde $U\tau_l = U_l\tau_l$, $Un_l = U_ln_l$, $\sigma_s = \sqrt{X^2 + Y^2}$, o operador $\langle \rangle$ define uma média espacial, (X, Y) são as coordenadas dos pontos lagrangianos e $l = 1, 2$ para problemas bidimensionais.

3.1.3 Acoplamento euleriano-lagrangiano

Na seção 3.1.1, a função delta de Dirac δ foi mencionada como dispositivo de comunicação entre os domínios euleriano e lagrangiano. Ela é responsável pela distribuição da densidade de força interfacial lagrangiana para os pontos eulerianos e pela interpolação das velocidades do domínio euleriano para os pontos pertencentes à interface lagrangiana. Tais operações são denominadas de distribuição e interpolação, e são representadas, respectivamente, pelas Eq.3.16 e Eq.3.17:

$$f_l(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X}, \quad (3.16)$$

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

Para a distribuição da força lagrangiana para o domínio euleriano, apresenta-se um novo procedimento no espaço espectral de Fourier descrito na seção 3.2. A interpolação da velocidade euleriana para os pontos na interface é realizada utilizando um núcleo de Dirac, o qual é semelhante a uma função distribuição Gaussiana.

3.1.4 Parâmetros adimensionais

O principal problema físico estudado na presente dissertação é a ascensão de uma bolha. Então, nesta seção são definidos os parâmetros adimensionais utilizados para controlar a simulação, sendo que dois desses parâmetros envolvem as razões entre as massas específicas e as viscosidades da fase contínua (c) e da fase dispersa (d), isto é, $\lambda = \rho_d/\rho_c$ e $\gamma = \mu_d/\mu_c$. Os outros dois parâmetros são definidos pela presença da aceleração da gravidade g [m/s^2],

pelo diâmetro da bolha d_d [m], pelo coeficiente de tensão superficial σ [N/m], pela massa específica ρ_c [kg/m³] e pela viscosidade do fluido μ_c [kg/ms]. Assim podem ser definidos:

$$N = \frac{\rho_c^2 d_d^3 g}{\mu_c^2}, \quad (3.18)$$

$$Eo = \frac{\rho_c g d_d^2}{\sigma}. \quad (3.19)$$

Na Eq.3.18, o parâmetro N é chamado de número de *Galileo* ou número de *Archimedes*, o qual mede a importância relativa das forças gravitacionais e das forças viscosas. O parâmetro Eo , conhecido como número de *Eötvös* é a razão entre as forças gravitacional e interfacial. Na literatura, N é freqüentemente substituído pelo número de Morton,

$$M = \frac{g \mu_c^4}{\rho_c \sigma^3} = \frac{Eo^3}{N^2}, \quad (3.20)$$

o qual é constante para um dado fluido quando a aceleração gravitacional e a força interfacial σ são constantes.

Tais parâmetros adimensionais definem o comportamento do movimento da bolha. Assim, quando as bolhas são pequenas e a tensão superficial é alta, as bolhas permanecem esféricas e a dinâmica é independente da tensão superficial (ESMAEELI; TRYGGVASON, 1998), definindo um baixo número de *Eötvös* e Morton. Para altos valores de M , elas se tornam elipsoidais. À medida que Eo aumenta, as bolhas eventualmente se deformam e assumem a forma de “calotas esféricas”. Para N moderados, as bolhas apresentam um movimento helicoidal. Para altos valores de M , a ascensão de uma bolha é normalmente instável. Para altos valores de Eo e M , as bolhas podem se deformar e até mesmo se fragmentar.

Um importante parâmetro adimensional é o número de Reynolds Re , o qual relaciona forças de inércia com forças viscosas. Em escoamentos multifásicos, só é possível determinar-se Re após o cálculo da velocidade terminal, ou seja, após determinar a velocidade para a qual a bolha apresenta aceleração nula ou se encontra em regime estacionário. Resultados experimentais de Clift, Grace e Weber (1978), apresentam, para diferentes números de *Eötvös* e Morton, o número de Reynolds para uma bolha em regime estacionário e as suas diferentes geometrias (Fig.3.4).

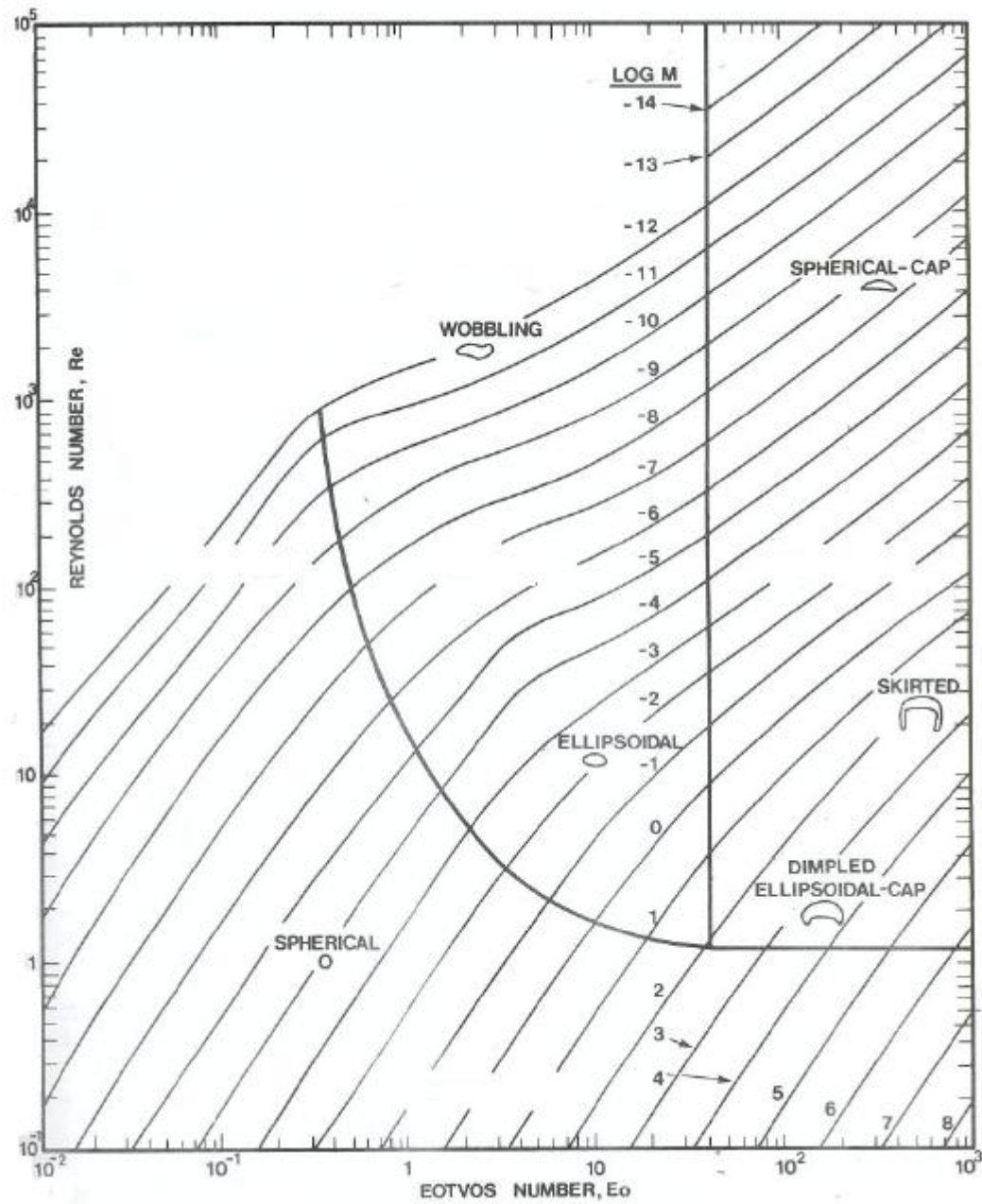


Figura 3.4: Diagrama de Clift, Grace e Weber (1978).

Os dados dessa figura são de grande importância para validação dos resultados numéricos e serão utilizado como referência no presente trabalho. A velocidade utilizada para calcular o número de Reynolds é a velocidade do centróide (centro de gravidade). A posição do centróide é dada por r_{bl} e a sua área é A_b . O método para o cálculo de r_{bl} e A_b foi proposto por Bunner e Tryggvason (2002) e é dado por:

$$A_b = \int_{A_b} dA = \frac{1}{2} \int_{A_b} \frac{\partial}{\partial x_k} X_k dA = \frac{1}{2} \oint_{\Gamma} X_l n_l ds, \quad (3.21)$$

$$r_{bl} = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} X_l dA = \frac{1}{2A_b} \int_{A_b} \frac{\partial}{\partial x_k} (X_k X_l) dA = \frac{1}{2A_b} \oint_{\Gamma} (X_l X_l) n_l ds. \quad (3.22)$$

A velocidade terminal da bolha, $V_b = (U_{bl}, V_{bl})$, pode ser obtida da mesma forma, dada por

$$V_{bl} = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} U_l dA = \frac{1}{A_b} \int_{A_b} \frac{\partial}{\partial x_k} (X_k U_l) dA = \frac{1}{A_b} \oint_{\Gamma} X_l (U_l n_l) ds, \quad (3.23)$$

onde U_l é a componente l do vetor velocidade da interface.

O número de Reynolds é então definido por

$$Re = \frac{\rho_c d_d V_b}{\mu_c}. \quad (3.24)$$

Devido à tensão interfacial surge um salto de pressão entre as duas fases, o qual pode ser calculado analiticamente pela Eq.3.25 (WHITE, 1991),

$$p_d - p_c = \frac{2\sigma}{d_d}. \quad (3.25)$$

Dividindo-se a Eq. 3.25 por $\rho_c g d_d$ e adimensionalizando-a, tem-se:

$$\Delta p^e = \frac{2}{Eo}. \quad (3.26)$$

onde e indica que o salto é analítico.

A Eq.3.26 é conhecida como a Lei de Young-Laplace. Esse resultado é utilizado como referência para validar os resultados com baixos valores de número de Eötvös onde há pouca deformação da interface.

3.2 Modelagem matemática usando a metodologia espectral de Fourier

Objetiva-se, nesta seção, desenvolver a modelagem matemática que rege os métodos espectrais de Fourier. Para isso, parte-se da definição das transformadas de Fourier e suas propriedades, para assim, proceder com a transformação das equações de Navier-Stokes para o espaço espectral de Fourier. Além disso, é mostrado o acoplamento euleriano-lagrangiano no espaço espectral de Fourier. De posse dos fundamentos teóricos, na seção 4 desenvolve-se a ferramenta numérica pseudo-espectral de Fourier utilizada no presente trabalho.

3.2.1 Transformadas de Fourier

Dada uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, sua transformada de Fourier é definida pela seguinte expressão (FIGUEIREDO, 2007):

$$\widehat{f}(\vec{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} f(\vec{x}) d\vec{x}, \quad (3.27)$$

sendo $-\infty < \vec{k} < \infty$ é o vetor número de onda e $i = \sqrt{-1}$.

A expressão 3.27 representa uma integral imprópria, a qual deve ser entendida da seguinte maneira

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

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

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

A transformada inversa de Fourier, a qual transforma uma função que está no espaço espectral de Fourier para o espaço físico, é dada pela Eq.3.29:

$$f(\vec{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\pi i \vec{k} \cdot \vec{x}} \widehat{f}(\vec{k}) d\vec{k}. \quad (3.29)$$

3.2.2 Propriedades da Transformada de Fourier

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

- Homogeneidade, (Eq.3.30):

$$\widehat{\alpha f}(\vec{k}) = \alpha \widehat{f}(\vec{k}), \quad (3.30)$$

onde α é uma constante.

- Aditividade, (Eq.3.31)

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

$$\widehat{(f + g)}(\vec{k}) = \widehat{f}(\vec{r}) + \widehat{g}(\vec{s}), \quad (3.31)$$

onde $\vec{k}$ é o parâmetro de transformação da adição, $\vec{r}$ é o parâmetro de transformação da função $f(\vec{x})$ e $\vec{s}$ é o parâmetro de transformação da função $g(\vec{x})$.

- Derivada, (Eq. 3.32)

A transformada da derivada de uma função é dada por:

$$\widehat{\frac{\partial^n f}{\partial x_l^n}}(\vec{k}) = (ik_l)^n \widehat{f}(\vec{k}), \quad (3.32)$$

onde n é a ordem da derivada.

- Produto de funções, (Eq. 3.33):

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

$$\widehat{fg}(\vec{k}) = \widehat{f}(\vec{r}) * \widehat{g}(\vec{s}). \quad (3.33)$$

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

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

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

Para transformar, as equações de Navier-Stokes e da continuidade, para o espaço espectral de Fourier, para escoamentos incompressíveis com condições de contorno periódicas em todas as direções (Eqs. 3.35 e 3.36), é necessário utilizar o método da projeção para o desacoplamento pressão-velocidade, além da aplicação das propriedades da transformada de Fourier (Subseção 3.2.2)(SILVEIRA-NETO, 2002; MARIANO, 2007). Reescrevendo as Eqs. 3.1 e 3.2 com as devidas simplificações, citadas anteriormente seção(3.1.1), têm-se:

$$\frac{\partial u_l}{\partial x_l} = 0, \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial u_l}{\partial t} + \frac{\partial u_l u_k}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_l} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \right] \right) + \left(\frac{\rho - \rho_0}{\rho} \right) g_l + \frac{1}{\rho} f_l. \quad (3.36)$$

A equação da continuidade (Eq. 3.35) transformada é representada por

$$ik_l \widehat{u}_l = 0. \quad (3.37)$$

De acordo com a geometria analítica, o vetor velocidade transformado, $\widehat{u}_l(\vec{k}, t)$, é perpendicular ao vetor número de onda, k_l , pois o produto escalar entre eles é nulo, Eq. 3.37. Define-se, então, um plano π , o qual é perpendicular ao vetor k_l e contém $\widehat{u}_l$, conforme a Fig. 3.5.

Transformando a Eq. 3.36, tem-se a Eq. 3.38

$$\begin{aligned} \widehat{\frac{\partial u_l}{\partial t}} + ik_k \widehat{(u_l u_k)} &= \\ &= -\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} + \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_k * [\widehat{\mu} * (ik_k \widehat{u}_l + ik_l \widehat{u}_k)] + \frac{1}{\widehat{\rho}} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_l + \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f}_l. \end{aligned} \quad (3.38)$$

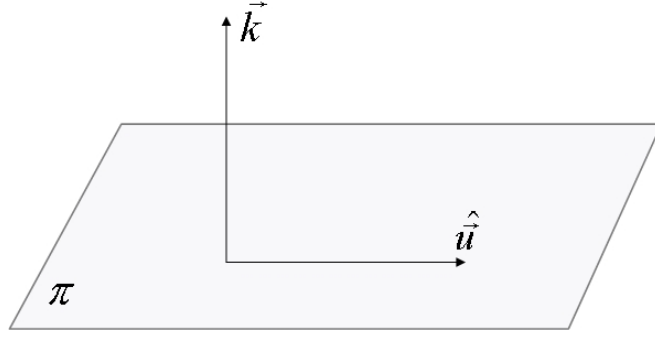


Figura 3.5: Definição do plano π (SILVEIRA-NETO, 2002).

Da Eq. 3.38, pode-se concluir que o termo da taxa de variação da quantidade de movimento linear, $\frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t}$, está contido no plano π , pois temos que

$$\frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t} = \frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t}. \quad (3.39)$$

Retomando-se a Eq. 3.37, tem-se que:

$$\frac{\partial}{\partial t}(k_l \widehat{u}_l) = k_l \frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t} = 0 \implies \frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t} \subset \pi. \quad (3.40)$$

O termo gradiente de pressão produto de convolução com $\frac{1}{\rho}$, $\frac{1}{\rho} * ik_l \widehat{p}$, é colinear ao vetor número de onda (k_l), pois $\widehat{p}$ e $\frac{1}{\rho}$ são escalares e portanto, o produto de convolução $\frac{1}{\rho} * ik_l \widehat{p}$ é ortogonal ao plano π .

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

Para desacoplar o campo de pressão do campo de velocidade, Silveira-Neto (2002) utiliza-se o método da projeção. Primeiramente, separam-se os termos que pertencem ao plano π dos demais (Eq. 3.41)

$$\underbrace{\left[\frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t} \right]}_I + \underbrace{\left[ik_k(\widehat{u_l u_k}) + \frac{1}{\rho} * ik_l \widehat{p} - \frac{1}{\rho} * ik_k * [\widehat{\mu} * (ik_k \widehat{u}_l + ik_l \widehat{u}_k)] - \frac{1}{\rho} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_l - \frac{1}{\rho} * \widehat{f}_l \right]}_{II} = 0. \quad (3.41)$$

Observe que, como dito anteriormente, $I \subset \pi$, e por definições, vinda da geometria analítica, se a soma de dois vetores é nula, então os dois vetores são colineares. Assim, II é

colinear a I e está contido no plano π .

Definindo, então, o tensor projeção (Eq. 3.42)

$$\wp_{lk}(\vec{k}) = \delta_{lk} - \frac{k_k k_l}{k^2}, \quad (3.42)$$

onde δ_{lk} é o delta de Kronecker (Eq. 3.43):

$$\delta_{lk} = \begin{cases} 1 & \text{se } l = k, \\ 0 & \text{se } l \neq k \end{cases}. \quad (3.43)$$

O tensor projeção $\wp_{lk}$ projeta qualquer vetor sobre o plano π (MARIANO, 2009).

De posse da definição do tensor projeção e da conclusão referente à Eq. 3.41 tem-se que

$$\left[\widehat{TNL_l} - \frac{1}{\hat{\rho}} * ik_l \widehat{p} - \widehat{DIF_l} - \widehat{GRAV_l} - \frac{1}{\hat{\rho}} * \widehat{f_l} \right] \subset \pi, \quad (3.44)$$

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

$$\begin{aligned} \left[\widehat{TNL_l} + \frac{1}{\hat{\rho}} * ik_l \widehat{p} - \widehat{DIF_l} - \widehat{GRAV_l} - \frac{1}{\hat{\rho}} * \widehat{f_l} \right] &= \\ &= \wp_{lm} \left[\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\hat{\rho}} * \widehat{f_m} \right]. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Nota-se na Eq. 3.45, que o termo referente ao gradiente de pressão no espaço de Fourier, $\frac{1}{\hat{\rho}} * ik_l \widehat{p}$, desaparece no lado direito do sinal de igualdade, pois a projeção de um vetor ortogonal a um plano, sobre esse mesmo plano, é nula. Esta afirmação fica clara visualizando a Fig. 3.6. Nela têm-se os vetores que não estavam contidos no plano π projetados sobre este plano. Com isso, percebe-se que o vetor que representa o gradiente de pressão desaparece quando projetado. Este procedimento faz o desacoplamento pressão-velocidade da equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis no espaço espectral de Fourier.

Finalmente, substituindo o lado direito da Eq. 3.45 na Eq. 3.41, obtém-se as equações de Navier-Stokes na espaço espectral de Fourier (Eq. 3.46)

$$\frac{\partial \widehat{u_l}}{\partial t} = \wp_{lm} \left[\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\hat{\rho}} * \widehat{f_m} \right]. \quad (3.46)$$

Algumas observações devem ser tecidas a respeito da Eq. 3.46. A primeira, é a independência do termo de pressão, o qual foi substituído pela projeção dos termos fonte,

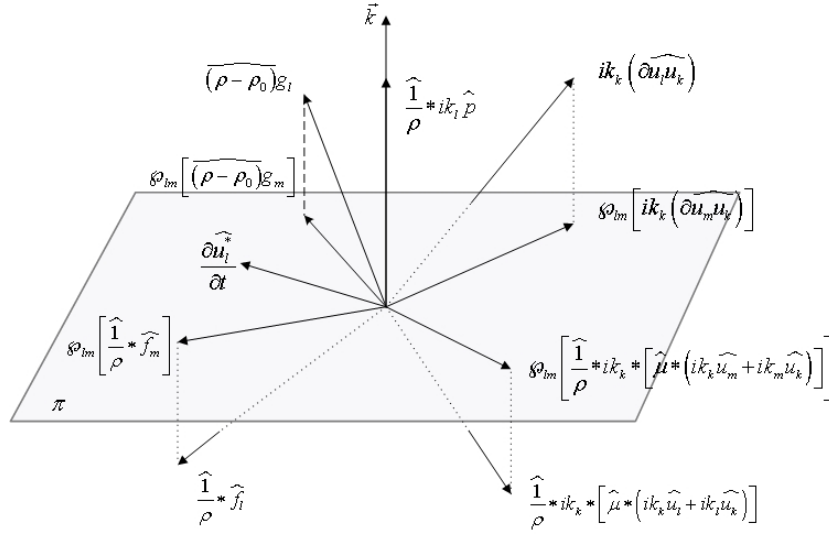


Figura 3.6: Projeção dos termos fonte, advectivo, difusivo e do termo gravitacional sobre o plano π .

advectivo, difusivo e gravitacional. Comparando com esquemas clássicos, esse procedimento equivale a substituir a solução de uma equação de Poisson por um produto vetor-matriz, que, em termos numéricos, é mais barato. Em termos físicos, ambos têm a mesma função, a qual é garantir a conservação de massa.

Uma segunda observação é a presença de integrais de convolução, que rigorosamente, devem ser resolvidas através de algum esquema de integração numérica. Caso isso seja feito, provavelmente, o ganho computacional obtido pela operação projeção seria perdido na resolução dessas integrais. Todavia, como será visto posteriormente, essas integrais de convolução são substituídas pelo método pseudo-espectral, tornando-se a resolução da Eq. 3.46 vantajosa quando comparada com métodos clássicos.

Uma última ressalva é que apesar do campo de pressão não aparecer nas equações de Navier-Stokes, ele pode ser recuperado por pós-processamento, a partir da Eq. 3.45. Isolando o termo referente ao gradiente de pressão, tem-se que

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{\rho} * ik_l \hat{p} &= \vartheta_{lm} \left[\widehat{TNL}_m - \widehat{DIF}_m - \widehat{GRAV}_m - \frac{1}{\hat{\rho}} * \widehat{f}_m \right] + \\
 &+ I_{lm} \left[\widehat{TNL}_m - \widehat{DIF}_m - \widehat{GRAV}_m - \frac{1}{\hat{\rho}} * \widehat{f}_m \right],
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

onde I_{lm} é o tensor identidade, o qual foi introduzido por conveniência, sem alterar a Eq. 3.47. Colocando-se em evidência os termos entre colchetes, tem-se

$$-\frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_l \widehat{p} = (\wp_{lm} - I_{lm}) \left[\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right]. \quad (3.48)$$

Para determinação do campo de pressão, transforma-se a Eq. 3.48 para o espaço físico e multiplica-se ambos os lados por ρ , obtendo-se

$$-\frac{\partial}{\partial x_k}(p) = \rho TIF \left[(\wp_{lm} - I_{lm}) \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} \widehat{f_m} \right) \right]. \quad (3.49)$$

onde TIF [] é a transformada inversa de Fourier.

Transformando-se a Eq. 3.49 para o espaço de Fourier, obtém-se:

$$-ik_l \widehat{p} = \widehat{\rho} * \left[(\wp_{lm} - I_{lm}) \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right) \right]. \quad (3.50)$$

Multiplica-se a Eq. 3.50 por ik_l , tem-se:

$$\widehat{p} = \frac{ik_l}{k^2} \left\{ \widehat{\rho} * \left[(\wp_{lm} - I_{lm}) \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right) \right] \right\}. \quad (3.51)$$

Mas,

$$(\wp_{lm} - I_{lm})k_l = \left(\delta_{lm} - \frac{k_l k_m}{k^2} - I_{lm} \right) k_l = -k_m. \quad (3.52)$$

Assim,

$$\widehat{p} = \frac{ik_m}{k^2} \left[\widehat{\rho} * \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_m} \right) \right]. \quad (3.53)$$

E, finalmente,

$$p(\vec{x}, t) = TIF \left[\widehat{\rho} \left(\widehat{TNL_m} - \widehat{DIF_m} - \widehat{GRAV_m} - \frac{1}{\widehat{\rho}} \widehat{f_m} \right) \right]. \quad (3.54)$$

3.2.4 Acoplamento das malhas lagrangiana e euleriana no espaço espectral de Fourier

Este tópico apresenta a utilização das propriedades da transformada de Fourier de forma a se obter o campo de força euleriano (Eq. 3.7) e a função indicadora (Eq. 3.5) no espaço espectral (MARIANO, 2009).

Aplicando, então, a transformada de Fourier na Eq. 3.7 obtém-se $\widehat{f}_l(\vec{k})$ diretamente no espaço espectral, Eq. 3.55:

$$\widehat{f}_l(\vec{x}, t) = \int_{\Omega} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left[\int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X} \right] d\vec{x}. \quad (3.55)$$

Invertendo-se a posição das integrais da Eq. 3.55, têm-se

$$\widehat{f}_l(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) \left[\int_{\Omega} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x} \right] d\vec{X}. \quad (3.56)$$

Utilizando a propriedade da função Delta de Dirac na Eq. 3.56, a qual implica que a integral de uma função multiplicada pela função delta de Dirac é igual a função avaliada no ponto $\vec{X}$, têm-se

$$\widehat{f}_l(\vec{k}, t) = \int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{X}} d\vec{X}. \quad (3.57)$$

De forma análoga, obtém-se a transformada para o espaço espectral de Fourier da função indicadora apresentada por Esmæeli e Tryggvason (1992), o qual determina a função indicadora a partir da normal avaliada em cada ponto lagrangiano, dada pela Eq. 3.5. No espaço espectral, esta equação é definida por:

$$\widehat{I}(\vec{x}, t) = \frac{-ik_l}{k^2} \int_{\Omega} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left[\int_{\Gamma} n_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{X} \right] d\vec{x}. \quad (3.58)$$

Invertendo-se a posição das integrais da Eq. 3.58, têm-se

$$\widehat{I}(\vec{x}, t) = \frac{-ik_l}{k^2} \int_{\Gamma} n_l(\vec{X}, t) \left[\int_{\Omega} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x} \right] d\vec{X}. \quad (3.59)$$

Utilizando, na Eq. 3.59, a mesma propriedade da função Delta de Dirac utilizada na Eq. 3.56, têm-se

$$\widehat{I}(\vec{k}, t) = -\frac{ik_l}{k^2} \int_{\Gamma} n_l(\vec{X}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{X}} d\vec{X}. \quad (3.60)$$

As Eqs. 3.57 e 3.60 são resolvidas numericamente utilizando a regra do trapézio (mais detalhes no Cap. 4).

3.3 Resumo do modelo matemático

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

$$\frac{\partial u_l}{\partial t} + \frac{\partial u_l u_k}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_l} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \left[\mu \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \right] \right) + \left(\frac{\rho - \rho_0}{\rho} \right) g_l + \frac{1}{\rho} f_l, \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial u_l}{\partial x_l} = 0, \quad (3.62)$$

$$\rho(\vec{x}, t) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c) I(\vec{x}, t), \quad (3.63)$$

$$\mu(\vec{x}, t) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c) I(\vec{x}, t), \quad (3.64)$$

$$\nabla^2 I(\vec{x}, t) = \vec{\nabla} \int_{\Gamma} n_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x}, \quad (3.65)$$

$$f_l(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) d\vec{x}, \quad (3.66)$$

$$F_l = \sigma \kappa n_l, \quad (3.67)$$

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = \int_{\Omega} u(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{X}) ds + u_a(\vec{X}, t) \tau_l, \quad (3.68)$$

$$u_a(\vec{X}, t) = -U_{\tau}(\vec{X}, t) + \int_0^s [\sigma_s \kappa U_n - \langle \sigma_s \kappa U_n \rangle] ds', \quad (3.69)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t} &= \wp_{lm} \left[ik_j (\widehat{u_j u_m}) \right] \\ &- \frac{\widehat{1}}{\rho} * ik_j * [\widehat{\mu} * (ik_j \widehat{u_j} + ik_j \widehat{u_m})] - \frac{\widehat{1}}{\rho} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_j - \frac{\widehat{1}}{\rho} * \widehat{f_j} \Big], \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$ik_l \widehat{u}_l = 0, \quad (3.71)$$

$$\widehat{f}_l(\vec{x}, t) = \int_{\Gamma} F_l e^{-i\vec{k} \cdot \vec{X}} d\vec{X}, \quad (3.72)$$

$$\widehat{I}_l(\vec{x}, t) = \frac{-ik_l}{k^2} \int_{\Gamma} n_l(\vec{X}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{X}} d\vec{X}. \quad (3.73)$$

As Eqs. 3.61-3.62 são as equações de Navier-Stokes e da continuidade para escoamentos incompressíveis, às quais percebem os efeitos da presença das interfaces móveis através do termo fonte. As Eqs. 3.63-3.69 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. 3.66 espalha as tensões superficiais da interface para o domínio euleriano, enquanto que a Eq. 3.68 interpola as velocidades do domínio euleriano para o lagrangiano. As Eqs. 3.66 e 3.68 são chamadas de espalhamento e interpolação, respectivamente.

As Eqs. 3.70 e 3.71 são as Eqs. 3.61 e 3.62 no espaço espectral de Fourier. Por último, as Eqs. 3.72 e 3.73 são as Eqs. 3.66 e 3.65 no espaço espectral de Fourier.

CAPÍTULO IV

MÉTODO NUMÉRICO

Neste capítulo apresentam-se a discretização do modelo matemático proposto para os domínios euleriano e lagrangiano. Apresentam-se a discretização das equações de Navier-Stokes e das equações de movimento da interface. As equações de Navier-Stokes são discretizadas numa malha euleriana enquanto que as equações para o movimento da interface são discretizadas numa malha lagrangiana (Fig. 4.1).

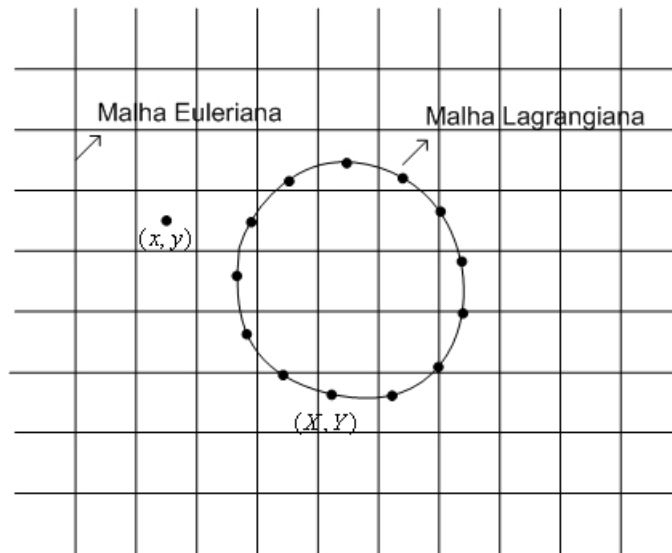


Figura 4.1: Representação esquemática da malha euleriana e da malha lagrangiana.

Serão abordados quatro pontos principais, sendo que o primeiro é o método pseudo-espectral, o qual é baseado no método espectral de Fourier. O segundo, é o conjunto de procedimentos necessários para o desenvolvimento de um código computacional pseudo-

espectral, como, por exemplo, o cálculo dos números de onda, avanço temporal e a filtragem. O terceiro ponto, é a discretização das equações de movimento da interface e, por último, tem-se o processo de discretização das equações de acoplamento entre os domínios euleriano e lagrangiano.

4.1 Discretização das equações pertencentes ao domínio euleriano

4.1.1 Discretização espacial

4.1.1.1 DFT e FFT

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

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

onde $\vec{k}$ é o vetor número de onda, N é o número de pontos da malha euleriana, $f(\vec{x})$ é a função a ser transformada, n fornece a posição do vetor $\vec{x}$ nos nós de colocação e $i = \sqrt{-1}$. A TDF transforma uma função f do espaço físico para o espaço espectral de Fourier. A Eq. 4.1 é uma aproximação numérica da transformada de Fourier. A Transformada Discreta Inversa de Fourier (TDIF) é apresentada pela Eq. 4.2:

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

Nota-se que para trabalhar com a TDF, a função a ser transformada para o espaço espectral deve ser periódica, ou seja:

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

onde L é o comprimento de onda considerado. Esta propriedade limita o uso da TDF à problemas modelados por equações diferenciais parciais com condições de contorno periódicas.

Cooley e Tukey (1965) desenvolveram um algoritmo denominado Fast Fourier Transform (FFT), o qual trabalha com um procedimento denominado rotação de bit, tornando o cálculo da TDF muito mais eficiente quando comparado com a Eqs. 4.1 e 4.2, pois o

número de operações reduz de $O(N^2)$ para $O(N \log_2 N)$ (Fig. 4.2). Com esse custo computacional torna-se atrativo resolver equações diferenciais parciais utilizando o método espectral de Fourier. Outra grande vantagem do método espectral é a precisão numérica, a qual será mostrada mais adiante através da verificação do código utilizando a técnica das soluções manufaturadas para problemas bifásicos. Porém, para se conseguir atingir uma melhor performance na utilização das FFTs é preciso usar 2^N pontos de colocação (onde N é um número inteiro) (BRIGGS; HENSON, 1995). Além disto a malha deve ser regular e os pontos de colocação uniformemente espaçados.

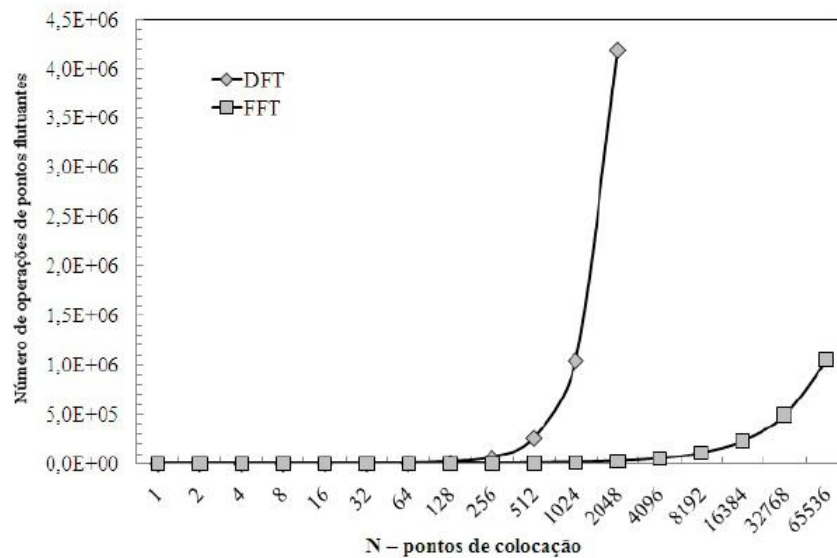


Figura 4.2: Comparação entre a resolução da TDF e da FFT (MARIANO, 2009).

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

Um procedimento muito importante a ser considerado é o cálculo dos números de onda k , que são usados na resolução das equações transformadas e são calculados no presente trabalho da seguinte forma:

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

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

4.1.1.2 Tratamento do termo não-linear

Quando se trabalha com a resolução das equações de Navier-Stokes de forma espectral (Eq. 3.70) deve-se tratar o termo não-linear desta equação de forma apropriada, pois sua resolução passa por uma integral de convolução, já que trata-se da transformação do produto de duas funções (Eq. 3.34). A resolução dessa integral, como já comentado, é inviável computacionalmente, portanto faz-se uso do método pseudo-espectral.

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

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

A forma rotacional é a que apresenta menor custo computacional, mas introduz oscilações nas altas frequências espaciais (CANUTO et al., 1987). No entanto, este processo

aumenta o custo do cálculo dos coeficientes de Fourier consideravelmente. A forma skew-simétrica é a mais estável e apresenta os melhores resultados, mas apresenta um custo computacional duas vezes maior. Apesar dessas observações a forma skew-simétrica é aqui adotada (MARIANO, 2009).

O algoritmo básico de um método pseudo-espectral para o cálculo do termo não-linear na forma skew-simétrica, utilizada no presente trabalho, está descrito abaixo:

1. Primeiro traz-se o campo $\widehat{u}_l$ para o espaço físico, sendo utilizado como condição inicial um campo que satisfaça à equação da continuidade;
2. Calcula-se os produtos necessários $u_l u_k$ no espaço físico;
3. Transforma-se os produtos $u_l u_k$ para o espaço de Fourier, obtendo-se $\widehat{u_l u_k}$;
4. Calcula-se as derivadas de $\widehat{u_l u_k}$ no espaço de Fourier obtendo as parcelas do termo não-linear calculadas na forma conservativa ($ik_k \widehat{u_l u_k}$);

Esta é a parte que trabalha com o termo não-linear na forma divergente. Agora, descreve-se o cálculo do termo não-linear na forma advectiva.

1. Conhecendo-se $\widehat{u}_k$, calcula-se as derivadas $ik_k \widehat{u}_k$;
2. Faz-se a transformada inversa da derivada $ik_k \widehat{u}_k$ e do campo de velocidade $\widehat{u}_l$;
3. Multiplica-se no espaço físico $u_l \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$;
4. Transforma-se o produto $u_l \frac{\partial u_k}{\partial x_l}$ para o espaço de Fourier, obtendo as parcelas do termo não-linear calculadas na forma não-conservativa $\widehat{u_l \frac{\partial u_k}{\partial x_l}}$;
5. Para finalizar o cálculo do termo não-linear faz-se as médias das parcelas obtidas no último passo, usando-se a forma conservativa e a forma não-conservativa, ou seja,

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

Desta forma obtém-se o termo não-linear das equações de Navier-Stokes (Eq. 3.70).

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

4.1.1.3 Cálculo das propriedades físicas

Além do termo não-linear das equações de Navier-Stokes, outros termos são tratados de forma pseudo-espectral. No presente trabalho, como citado anteriormente, busca-se resolver escoamentos incompressíveis com propriedades físicas variáveis. Dessa forma, como citado no Cap. 3, μ e ρ são constantes apenas sob uma linha de corrente, e, assim, devem ser tratados como produto de duas funções (Eq. 3.34). Nas Eqs. 4.6 e 4.7 apresenta o cálculo de ρ e μ no espaço espectral de Fourier.

$$\widehat{\rho}(\vec{k}, t) = \rho_c + (\rho_d - \rho_c)\widehat{I}(\vec{k}, t), \quad (4.6)$$

$$\widehat{\mu}(\vec{k}, t) = \mu_c + (\mu_d - \mu_c)\widehat{I}(\vec{k}, t). \quad (4.7)$$

Para os termos da Eq. 3.70 onde aparecem propriedades físicas variáveis, o produto é feito no espaço físico, e em seguida, transforma-se o produto para o espaço espectral de Fourier.

O que torna as Eqs. 4.6 e 4.7 variável é a função indicadora I (Eq. 3.5). A função indicadora, usada no presente trabalho, foi apresentada por Esmaeeli e Tryggvason (1992), e é calculada a partir da normal avaliada em cada ponto lagrangiano.

Como descrito no Cap. 3, a função I é distribuída dos pontos lagrangianos para os pontos eulerianos. Essa distribuição é feita no espaço espectral de Fourier (Eq. 3.60). A principal vantagem de resolver a função I através das transformadas de Fourier, advém do fato de não se utilizar sistemas lineares para a sua solução, o que reduz o custo computacional.

A Eq. 4.8 apresenta a equação da função I no espaço espectral de Fourier.

$$\widehat{I}(\vec{k}, t) = -\frac{ik_l}{k^2} \int_{\Gamma} n_l(\vec{X}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{X}} d\vec{X}. \quad (4.8)$$

A integral da Eq. 4.8 é resolvida numericamente através da Regra do Trapézio (CHAPRA; CANALE, 1985).

4.1.2 Discretização temporal das equações de Navier-Stokes

Nota-se na equação de Navier-Stokes no espaço espectral (Eq. 3.70) a derivada temporal $\frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t}$. Para resolvê-la é necessário utilizar um esquema de avanço temporal de alta ordem que seja compatível com o esquema de avanço espacial espectral (SOUZA, 2005).

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

$$\begin{aligned} AUX_{it} &= \alpha_{it} AUX_{it-1} + \Delta t [\widehat{RHS}_{it}] \\ \widehat{u}_{it+1} &= \widehat{u}_{it} + \beta_{it} AUX_{it}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde $it = 1, 2, \dots, 6$, AUX é uma variável auxiliar que, para o presente trabalho, representa a velocidade intermediária nos passos do RK46, α e β são constantes dadas na Tab. 4.1 e $\widehat{RHS}$ é o lado direito da Eq. 3.70, ou seja,

$$\widehat{RHS}_l = \wp_{lm} \left[ik_m (\widehat{u_l u_m}) - \frac{1}{\widehat{\rho}} * ik_m * [\widehat{\mu} * (ik_m \widehat{u_l} + ik_l \widehat{u_m})] - \frac{1}{\widehat{\rho}} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_l - \frac{1}{\widehat{\rho}} * \widehat{f_l} \right]. \quad (4.10)$$

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

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

Fazendo as seis iterações propostas na Eq.4.9 obtém-se a velocidade no espaço de Fourier, $(\widehat{u}_l)$ no tempo posterior, ou seja, $\widehat{u}_l^{t+\Delta t}$.

4.2 Discretização das equações pertencentes ao domínio lagrangiano

A discretização das equações que modelam o movimento da interface é realizada em uma malha lagrangiana. Os pontos discretizados são dispostos de maneira que $s_q = q\Delta s$,

$q = 1, \dots, M$ é a posição dos pontos lagrangianos $X_l(q)$ tal que $\vec{X} = (X(q), Y(q))$, ver Fig. 4.3.

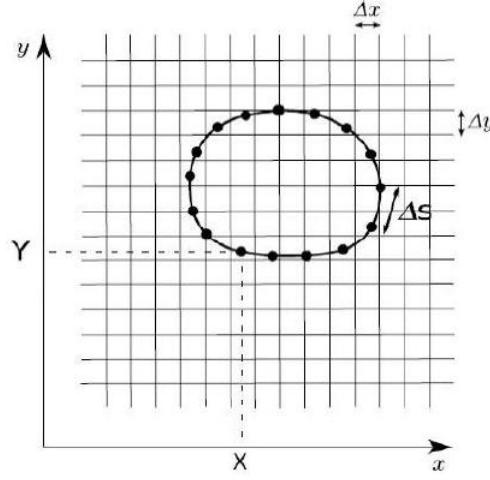


Figura 4.3: Representação esquemática da malha lagrangiana, sobre a malha euleriana.

A malha lagrangiana é definida por M pontos, tal que M é dependente da malha euleriana. No presente trabalho, adota-se a densidade de um ponto lagrangiano por célula da malha euleriana, logo define-se:

$$\begin{aligned} \Delta s &= \min [\Delta x, \Delta y] \\ M &= \text{int} \left(\frac{L_b}{\Delta s} \right), \end{aligned} \quad (4.11)$$

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

4.2.1 Discretização da força lagrangiana

Como visto na Eq. 3.67, a densidade da força lagrangiana é calculada em função da curvatura da interface (κ , Eq.4.15), da componente l do vetor tangente unitário (τ_l , Eq.4.14) e da componente l do vetor normal unitário (n_l , Eq.4.13), as quais são discretizadas recorrendo-se aos polinômios de Lagrange de grau 4.

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

do tipo

$$R = g(p)i + h(p)j, \quad (4.12)$$

onde p é um parâmetro dado, i é o vetor unitário na direção x e j é o vetor unitário na direção y . A partir da Eq. 4.12 e de Silva (2002), as definições de τ_l , n_l e κ são dados pelas Eqs. 4.13, 4.14 e 4.15, respectivamente.

$$n_l(\vec{X}, t) = \frac{-h' i + g' j}{\sqrt{h'^2 + g'^2}}, \quad (4.13)$$

$$\tau_l(\vec{X}, t) = \frac{g' i + h' j}{\sqrt{h'^2 + g'^2}}, \quad (4.14)$$

$$\kappa(\vec{X}, t) = \frac{g' h'' + g'' h'}{(h'^2 + g'^2)^{\frac{3}{2}}}, \quad (4.15)$$

onde $(')$ é a primeira derivada em relação ao parâmetro p , $('')$ é a segunda derivada em relação ao parâmetro p , $g(p)$ é definido pela Eq. 4.16 e $h(p)$ é definida pela Eq. 4.17.

$$g(p) = \sum_{q=1}^M L(p) X_l(p), \quad (4.16)$$

$$h(p) = \sum_{q=1}^M L(p) Y_l(p), \quad (4.17)$$

onde,

$$L(p) = \prod_{j \neq q, j=1}^M \frac{p - p_j}{p_q - p_j}. \quad (4.18)$$

O espaçamento $\Delta s(q)$ pode também ser definido a partir da equação vetorial paramétrica e é dado pela Eq. 4.19:

$$\begin{aligned} \Delta s_q(\vec{X}, t) = & \frac{1}{4} [\sqrt{g'^2(X_l(q-1)) + h'^2(X_l(q-1))} + \\ & + 2\sqrt{g'^2(X_l(q)) + h'^2(X_l(q))} + \sqrt{g'^2(X_l(q+1)) + h'^2(X_l(q+1))}]. \end{aligned} \quad (4.19)$$

A discretização da força interfacial é dada por:

$$F_l = \sigma \kappa(q) n_l(q), \quad (4.20)$$

para cada ponto X_l , é avaliada da seguinte forma,

$$F_x(q) = \sigma\kappa(q)n_x, \quad (4.21)$$

$$F_y(q) = \sigma\kappa(q)n_y. \quad (4.22)$$

4.2.2 Discretização do avanço da interface

A equação para o movimento da interface é dada por

$$\frac{\partial X_l}{\partial t} = U_l(\vec{X}, t), \quad (4.23)$$

onde U_l é a componente l do vetor velocidade sobre a interface, dado pela Eq. 4.25, que é o processo de interpolação da velocidade dos pontos de colocação eulerianos para os pontos lagrangianos.

Para discretização temporal para a Eq. 4.23 utiliza-se Euler de primeira ordem (CHAPRA; CANALE, 1985), descrita da seguinte forma:

$$X_l^{t+\Delta t} = X_l^t + dtU_l^t. \quad (4.24)$$

4.3 Discretização espacial para o acoplamento lagrangiano-euleriano

A comunicação entre os domínios euleriano e lagrangiano ocorre através das funções distribuição e interpolação. Na Eq. 3.17 é feita a interpolação das velocidades calculadas no domínio euleriano para os pontos pertencentes à interface lagrangiana. No presente trabalho, esse procedimento é feito utilizando um núcleo de Dirac, $D_h(\vec{X} - \vec{x})$, e é representado pelas Eqs. 4.25 e 4.26:

$$U_l(\vec{x}) = \sum_{\Omega} D_h(\vec{x} - \vec{X})u_l(\vec{x})\Delta s^2, \quad (4.25)$$

$$D_h(\vec{X} - \vec{x}) = \frac{1}{h^2}W\left(\frac{x_l - X_l}{h}\right)W\left(\frac{y_l - Y_l}{h}\right), \quad (4.26)$$

onde h é o espaçamento entre nós de colocação utilizados para discretizar as equações no domínio euleriano, Δs é o espaçamento entre os nós lagrangianos e W é uma função peso.

Segundo Mariano (2009), a função peso W que apresenta melhor convergência numérica é uma função cúbica, a qual é utilizada neste trabalho e é apresentada pela Eq. 4.27:

$$W = \begin{cases} 1 - \frac{1}{2}|r| - |r|^2 - \frac{1}{2}|r|^3 & \text{se } 0 \leq |r| < 1, \\ 1 + \frac{11}{6}|r| + |r|^2 - \frac{1}{6}|r|^3 & \text{se } 1 \leq |r| < 2, \\ 0 & \text{se } 2 \geq |r|. \end{cases} \quad (4.27)$$

A distribuição da densidade da força interfacial lagrangiana para os pontos eulerianos é feita através de um novo procedimento no espaço espectral de Fourier, sendo apresentado na seção 3.2.4. Logo, a força euleriana é dada por

$$\hat{f}_l(\vec{k}, t) = \int_{\Gamma} F_l(\vec{X}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{X}} d\vec{X}, \quad (4.28)$$

onde f_l é a componente l do vetor força euleriana, F_l é a componente l do vetor força lagrangiana e Γ é o domínio lagrangiano.

A integral da Eq. 4.28 é resolvida numericamente através da Regra do Trapézio (CHAPRA; CANALE, 1985).

4.4 Processo de filtragem

Quando se trabalha com métodos de alta ordem, por exemplo o método pseudo-espectral de Fourier, a solução das equações que apresentam descontinuidades no domínio de cálculo é influenciada pelo fenômeno de Gibbs (Fig. 4.4, Navarra (1994)), o qual produz erros numéricos nos pequenos comprimentos de ondas na forma de oscilações espúrias. Para combater esse problema a literatura aponta para processos de filtragem dos campos onde aparecem as descontinuidades (CANUTO et al., 2007).

No presente trabalho o processo de filtragem é imposto no campo de força euleriano, no campo de pressão e no cálculo da função indicadora, pois são os campos que apresentam descontinuidades, (Eqs. 3.53, 3.70 e 3.73). Este processo de filtragem é dado pela equação

$$\hat{g}(\vec{k}, t) = \omega \hat{g}(\vec{k}, t) \quad (4.29)$$

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

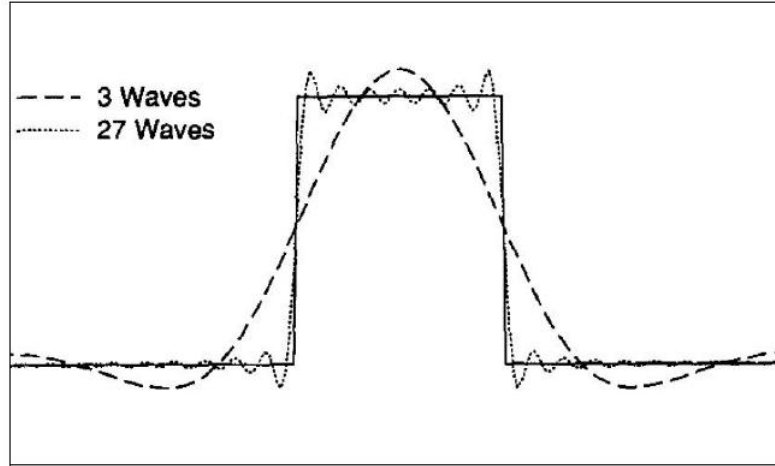


Figura 4.4: Exemplo de fenômeno de Gibbs em uma função do tipo onda quadrada (NAVARRA, 1994).

Baseado em Canuto et al. (2006), o filtro utilizado neste trabalho é o *Raised Cosine*, o qual é apresentado na Eq. 4.30

$$\omega = \frac{1}{4} \left[1 + \cos \left(\frac{L_x k_x}{N_x} \right) \right] \left[1 + \cos \left(\frac{L_y k_y}{N_y} \right) \right], \quad (4.30)$$

sendo L_x e L_y o comprimento do domínio na direção x e y , respectivamente, k_x e k_y é o vetor número de onda nas direções x e y e N_x e N_y é o número de pontos do domínio nas direções x e y .

4.5 Resumo dos passos da solução numérica

A partir das equações discretizadas anteriormente, o seguinte algoritmo é apresentado para a simulação de um escoamento bifásico.

1. Calcula-se, primeiramente, as posições iniciais dos pontos lagrangianos $X_l(q)$ que para uma interface cilíndrica 2D são:

$$X(q) = X_{cent} + r \cos(\theta) \quad (4.31)$$

$$Y(q) = Y_{cent} + r \sin(\theta),$$

onde X_{cent} e Y_{cent} são as coordenadas do ponto onde se encontra o centro da circunferência e $\theta = \frac{2\pi}{M}$, sendo M o total de pontos lagrangianos.

2. A partir disso, calcula-se os parâmetros geométricos da interface, os quais se referem ao vetor tangente unitário (Eq. 4.14), vetor normal unitário (Eq. 4.13) e curvatura (Eq. 4.15).
3. Dada uma condição inicial para as velocidades eulerianas, interpola-se o campo de velocidade para o domínio lagrangiano.
4. A partir dos campos de velocidades U^t e V^t , encontra-se as novas posições ($X^{t+\Delta t}$ e $Y^{t+\Delta t}$) para os pontos lagrangianos no tempo $t + 1$:

$$X_l^{t+\Delta t} = X_l^t + dt * U_l^t. \quad (4.32)$$

5. Calcula-se, então, as propriedades físicas μ e ρ , variáveis.
6. Calcula-se a força na interface:

$$F_l = \sigma \kappa n_l, \quad (4.33)$$

7. Distribui a força lagrangiana (F_l) para o domínio euleriano.
8. Resolve-se as equações de Navier-Stokes no espaço espectral de Fourier:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \widehat{u}_l}{\partial t} = & \wp_{lm} \left[ik_j (\widehat{u_j u_m}) \right. \\ & \left. - \frac{\widehat{1}}{\rho} * ik_j * [\widehat{\mu} * (ik_j \widehat{u_j} + ik_j \widehat{u_m})] - \frac{\widehat{1}}{\rho} * (\widehat{\rho - \rho_0}) g_j - \frac{\widehat{1}}{\rho} * \widehat{f_j} \right], \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$ik_l \widehat{u}_l = 0. \quad (4.35)$$

9. Após isso, avança-se no tempo e retorna ao item 2.

CAPÍTULO V

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, são apresentados os resultados obtidos para verificação e validação do código pseudo-espectral de Fourier para resolução de problemas de escoamentos bifásicos bidimensionais. Primeiramente, tem-se a verificação do código numérico através da solução manufaturada para propriedades físicas constantes e variáveis. Após isso, valida-se a função distribuição e função interpolação calculando a magnitude das correntes espúrias. Para validação da função indicadora utiliza-se casos testes, onde uma interface é submetida a altas deformações. Após tais verificações e validações, apresenta-se os resultados da ascensão de uma única bolha.

5.1 Verificação do código numérico

O objetivo da verificação da metodologia é garantir que as equações escolhidas para um dado modelo são resolvidas corretamente, além de quantificar o erro numérico da solução e obter a precisão e a ordem de convergência numérica.

A verificação realizada no presente trabalho é feita através da técnica das soluções manufaturadas, para a qual introduz-se um termo fonte nas equações diferenciais, criando um problema matemático que possui uma solução analítica.

Os testes aqui apresentados consideram as equações de Navier-Stokes, nas quais o termo gravitacional não é considerado. O termo f_l leva em conta apenas as informações do

termo fonte gerado pela solução analítica. As equações de Navier-Stokes assumem a forma:

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

onde f_l é o termo forçante obtido das equações analíticas (Eq. 5.2) adaptado de Nós (2007) para simulações bidimensionais.

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

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

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

onde u e v são os campos de velocidade horizontal e vertical, respectivamente, p é o campo de pressão, e subíndice e indica que a solução é analítica, nos quais $0 \leq t \leq 5$ e $(x, y) = x_l \in [0, 1] \times [0, 1]$.

Observa-se que o divergente do campo de velocidade analítico (Eq. 5.2) é nulo, e os termos fontes são dados por:

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

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

e as condições iniciais por $u(0, x) = u^e(0, x)$, $v(0, x) = v^e(0, x)$, ρ^e é a massa específica analítica e μ^e é a viscosidade dinâmica analítica.

No presente trabalho, o teste de verificação são utilizados para propriedades físicas constantes e variáveis com condições de contorno periódica em todas as direções.

5.1.1 Propriedades físicas constantes

Os resultados, aqui obtidos, são para verificação das equações de Navier-Stokes com propriedades físicas constantes, ou seja, na Eq. 5.7 ρ^e e μ^e são dadas por:

$$\begin{aligned}\rho^e &= 1, \\ \mu^e &= 1.\end{aligned}\tag{5.7}$$

Para estimar a precisão da metodologia, foi calculado o erro entre a solução analítica, ψ^e , (Eqs. 5.2 e 5.8) e a solução numérica obtida, ψ , através da norma L_2 .

$$L_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} (\psi_{ij}^e - \psi_{ij})^2}{n_x n_y}},\tag{5.8}$$

onde ψ , é a variável analisada, que, na presente seção, pode ser as componentes de velocidades (u e v) ou a pressão (p), n_x e n_y são os números de nós de colocação em cada direção. A Tab. 5.1 apresenta o erro da norma L_2 (Eq. 5.7), para uma sequência de malhas refinadas à razão de 2, utilizando $\Delta t = 10^{-5}$.

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

Malha	Variável	Norma L_2
32×32	u	6.2261×10^{-15}
	v	6.2207×10^{-15}
	p	3.9344×10^{-15}
64×64	u	$1,4015 \times 10^{-15}$
	v	$1,3909 \times 10^{-15}$
	p	$2,6063 \times 10^{-15}$
128×128	u	$1,2734 \times 10^{-15}$
	v	$1,2606 \times 10^{-15}$
	p	$2,9192 \times 10^{-15}$

Pela Tab. 5.1 observa-se que o erro, medido pela norma L_2 chega à ordem de erro de truncamento, ou seja, a erro de precisão de máquina, quando se utiliza dupla precisão. Comparando com o trabalho de Nós (2007), observa-se a elevada precisão do método pseudo-espectral de Fourier, uma vez que o autor obteve erros da ordem de 10^{-2} para uma malha com refinamento de 128×128 .

As Fig. 5.1 (a) e (b) mostram os isovalores da velocidade u e da pressão p , respectivamente em $t = 5$ [s] e uma malha de $128 \times 128 \times 128$.

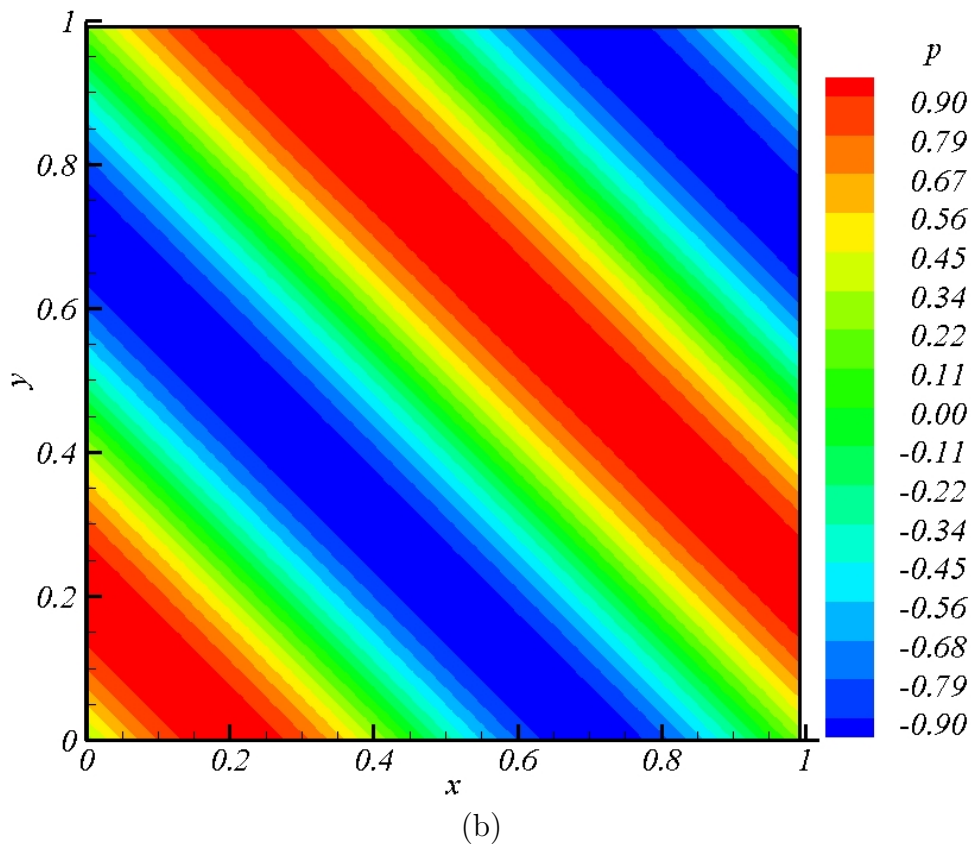
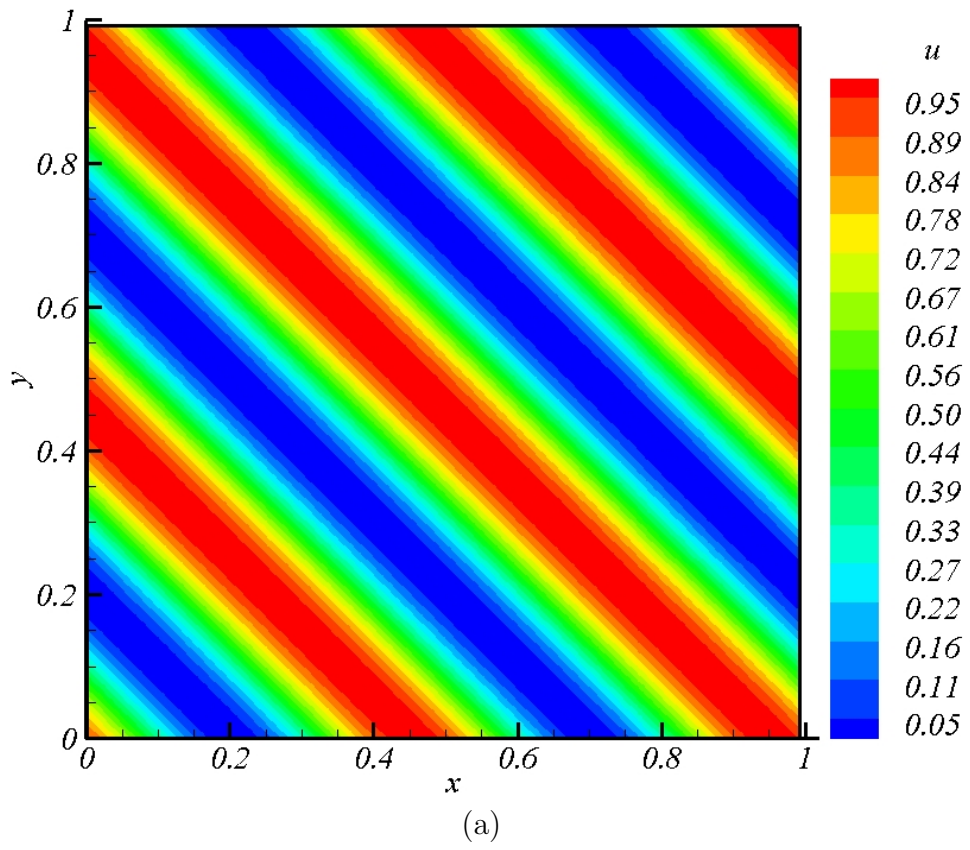


Figura 5.1: Campo da componente: (a) velocidade u e (b) pressão p , para propriedades físicas constantes.

5.1.2 Propriedades físicas variáveis

Para verificar a implementação das equações de Navier-Stokes com propriedades físicas variáveis, considerou-se agora a massa específica (ρ_e) e a viscosidade (μ_e) variáveis, as quais são dadas respectivamente por:

$$\rho_e(x, t) = 1 + 0,1(\sin^2(2\pi x + 2\pi y + t)), \quad (5.9)$$

$$\mu_e(x, t) = 1 + 0,2(\cos^2(2\pi x + 2\pi y + t)). \quad (5.10)$$

Segundo as Eqs. 5.9 e 5.10, ρ_e e μ_e variam 10% e 20%, respectivamente, em um domínio $[0, 1] \times [0, 1]$. Na Tab. 5.2 mostram-se os resultados do erro da norma L_2 obtidos para uma malha uniforme e com condições de contorno periódica, como descrita anteriormente, para as variáveis u , v e p .

Tabela 5.2: Norma L_2 para u , v e p com ρ e μ variáveis em $t = 5[s]$.

Malha	Variável	Norma L_2
32×32	u	$5,3265 \times 10^{-15}$
	v	$5,3222 \times 10^{-15}$
	p	$3,9150 \times 10^{-15}$
64×64	u	$1,5811 \times 10^{-15}$
	v	$1,5637 \times 10^{-15}$
	p	$2,7136 \times 10^{-15}$
128×128	u	$1,1230 \times 10^{-15}$
	v	$1,1084 \times 10^{-15}$
	p	$2,9079 \times 10^{-15}$

Pela Tab. 5.2 novamente percebe-se que o erro, dado pela norma L_2 , chega a erro de máquina, quando se utiliza dupla precisão. Comparando com o trabalho de Nós (2007), nota-se a elevada precisão do método pseudo-espectral de Fourier quando se trabalha com propriedades físicas, ρ e μ , variáveis, uma vez que o autor (Nós, 2007) obteve erros da ordem de 10^{-2} para uma malha com refinamento de $128 \times 128 \times 128$. Devido ao baixo valor apresentado no cálculo do erro, não é possível através dessas funções quantificar a ordem de convergência do método.

A Fig. 5.2 (a) e (b) mostram os isovalores da velocidade u e da pressão p , respectivamente, em $t = 5[s]$ e uma malha de 128×128 .

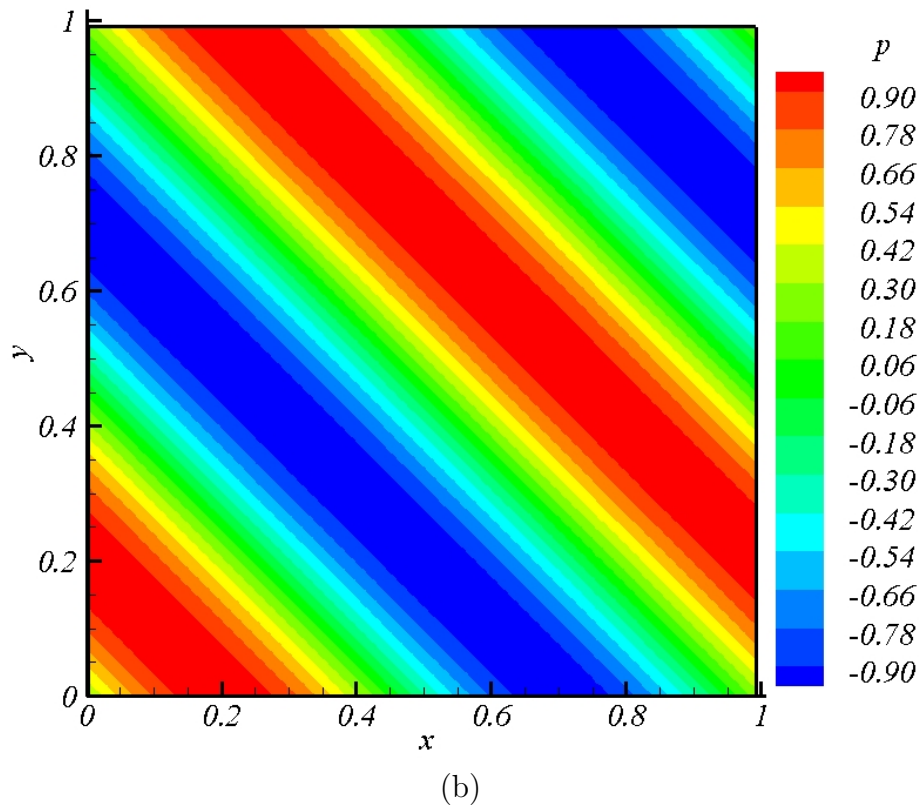
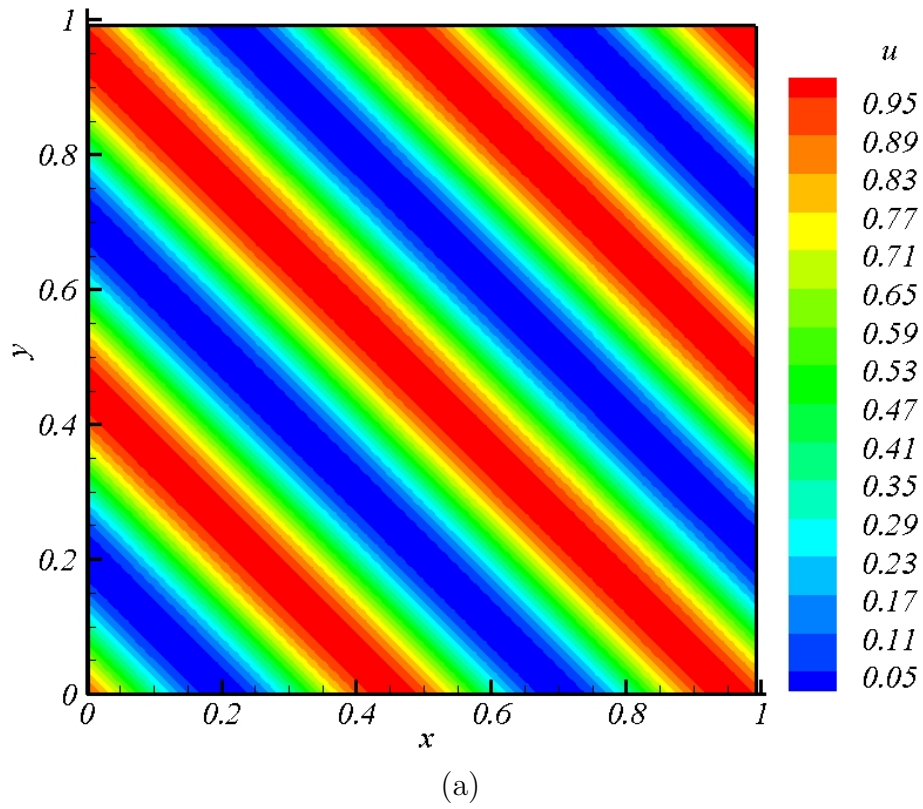


Figura 5.2: Campo da componente: (a) velocidade u e (b) pressão p , para propriedades físicas variáveis.

5.2 Correntes espúrias

Um teste comum para verificar o cálculo força interfacial e validar a função distribuição em escoamentos multifásicos é através da simulação de uma bolha cilíndrica estática, onde se observa a formação de correntes espúrias, ou seja de velocidades diferentes de zero. Conforme observado por Lafaurie et al. (1994) e Villar et al. (2010), dois fatores são responsáveis pela geração de correntes espúrias: a tensão superficial e a função distribuição. Em grande parte dos métodos *Front-tracking* as correntes espúrias apresentam elevada intensidade, o que pode afetar a acurácia da solução numérica avaliada, além de serem alimentadas ao longo de uma simulação.

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

$$La = \frac{\sigma \rho d_d}{\mu^2}, \quad (5.11)$$

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

A medida adimensional da força das correntes espúrias é o número de capilaridade, definido como:

$$Ca = \frac{U_{max}\mu}{\sigma}, \quad (5.12)$$

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

O domínio computacional considerado nesta verificação é um quadrado de tamanho $2d_d$, onde a bolha está localizada no centro do quadrado e as condições de contorno são periódicas. Os pontos lagrangianos, neste teste, são equidistribuídos e a interface da bolha é circular. Os resultados obtidos foram comparados com Villar et al. (2010) e a simulação foi realizada até o tempo $t = 250tc$, onde $tc = \mu d_d / \sigma$ é o tempo característico.

Primeiramente fixa-se a malha em 32×32 e varia o número de Laplace La de 1,2 até 12.000. Na Tab. 5.3 mostra-se a magnitude máxima das correntes espúrias (Ca) para diferentes La . No código espectral percebe-se que a influência das correntes espúrias na acurácia do método é mínima, ou seja, não se observa a influência da tensão superficial na geração de correntes espúrias, a qual atinge erro de truncamento na ordem de $9,63 \times 10^{-14}$. Os

resultados encontrados em Villar et al. (2010), as correntes espúrias, para o mesmo número de Laplace, é de $Ca = 6,81 \times 10^{-9}$, a qual utiliza os métodos convencionais como diferenças finitas para discretização espacial.

Tabela 5.3: Magnitude da corrente espúrias Ca para uma malha fixa 32×32 para diferentes La .

La	Ca (Híbrido,Villar et al. (2010))	Ca (Código espectral)
1, 2	$6,81 \times 10^{-9}$	$9,63 \times 10^{-14}$
12	$1,50 \times 10^{-10}$	$1,05 \times 10^{-14}$
120	$2,22 \times 10^{-12}$	$2,03 \times 10^{-15}$
1.200	$9,57 \times 10^{-13}$	$1,28 \times 10^{-15}$
12.000	$7,73 \times 10^{-14}$	$6,02 \times 10^{-16}$

Na Tab. 5.4 procurou-se verificar a influência do refinamento na geração de correntes espúrias. Para isso fixa-se o número de Laplace $La = 12.000$ e variando a malha de 16×16 até uma malha mais refinada de 256×256 . No método espectral percebe-se que a magnitude das correntes espúrias é praticamente eliminada com o aumento do refinamento da malha, ou seja, a força das correntes espúrias atinge o erro de truncamento na ordem de 10^{-17} , enquanto que nos resultados encontrados em Villar et al. (2010) as correntes espúrias, para a mesma malha, é de $5,55 \times 10^{-15}$.

Tabela 5.4: Magnitude das correntes espúrias Ca para La fixo e a malha variável.

$Malha$	Ca (Híbrido,Villar et al. (2010))	Ca (Código espectral)
32×32	$7,73 \times 10^{-14}$	$6,02 \times 10^{-16}$
64×64	$3,08 \times 10^{-14}$	$2,62 \times 10^{-17}$
128×128	$9,50 \times 10^{-15}$	$1,76 \times 10^{-17}$
256×256	$5,55 \times 10^{-15}$	$4,06 \times 10^{-17}$

Outra verificação possível de se realizar para a bolha estática é o salto de pressão, o qual pode ser comparado analiticamente com o valor dado pela Eq. 3.25. O salto de pressão é aqui avaliado para $La = 12.000$ na malha 32×32 , apresentando um valor de $\Delta p = 96.050$, 7 o que implica em erro de 0,05%. O cálculo do erro foi feito através da expressão Eq. 5.13.

$$Erro = \frac{\Delta p^e - \Delta p}{\Delta p^e} * 100\%, \quad (5.13)$$

onde Δp^e e Δp são os saltos de pressão analítico e numérico, respectivamente.

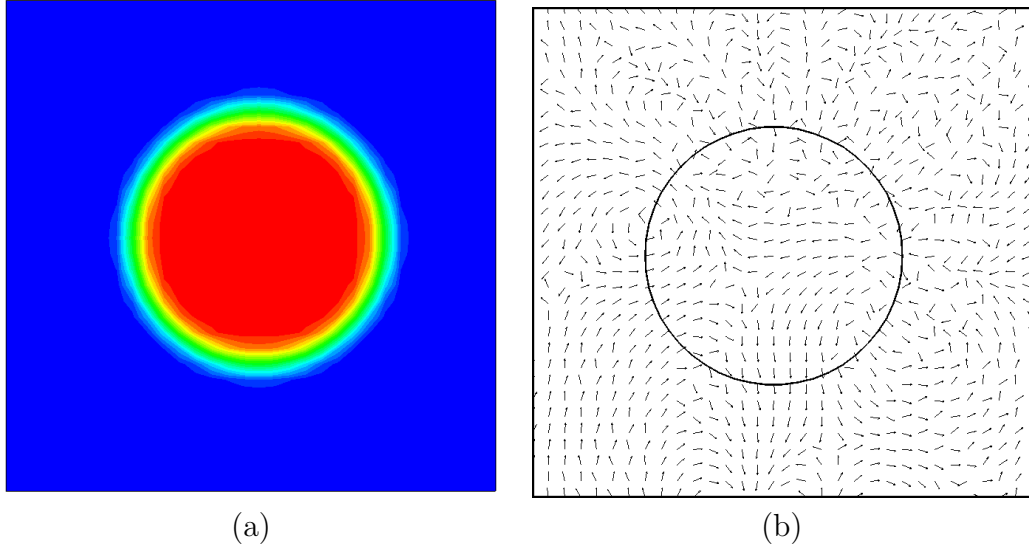


Figura 5.3: (a) salto de pressão e (b) correntes espúrias.

5.3 Validação da função indicadora

Para a validação da função indicadora (Eq. 3.5) é necessário deformar a interface, com o intuito de certificar se esta acompanha a deformação presente na malha lagrangiana, definindo com elevada precisão as propriedades físicas de cada fluido. O caso, portanto, utilizado foi o *vortex-flow* que consiste em uma interface circular a qual sofre um estiramento (VILLAR et al., 2010). Esta deformação da interface é gerada através da função corrente:

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

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

Para este caso foi admitida a remalhagem dos pontos lagrangianos (maiores detalhes deste procedimento decorre nas próximas seções deste capítulo). O domínio computacional é $[0, 1] \times [0, 1]$. A interface, inicialmente circular, tem raio de 0,15 e está centrada em $(0,50; 0,75)$ e $T = 8$ [s]. A malha euleriana é de 128×128 . A Fig. 5.4 mostra o campo da função indicadora em $t = 0$ [s].

A partir da Fig. 5.4, é traçado o perfil horizontal do campo da função indicadora na altura do centro da interface, Fig. 5.5. Observa-se a descontinuidade desta função e cabe ressaltar que apesar do salto, a função indicadora atinge o resultado esperado.

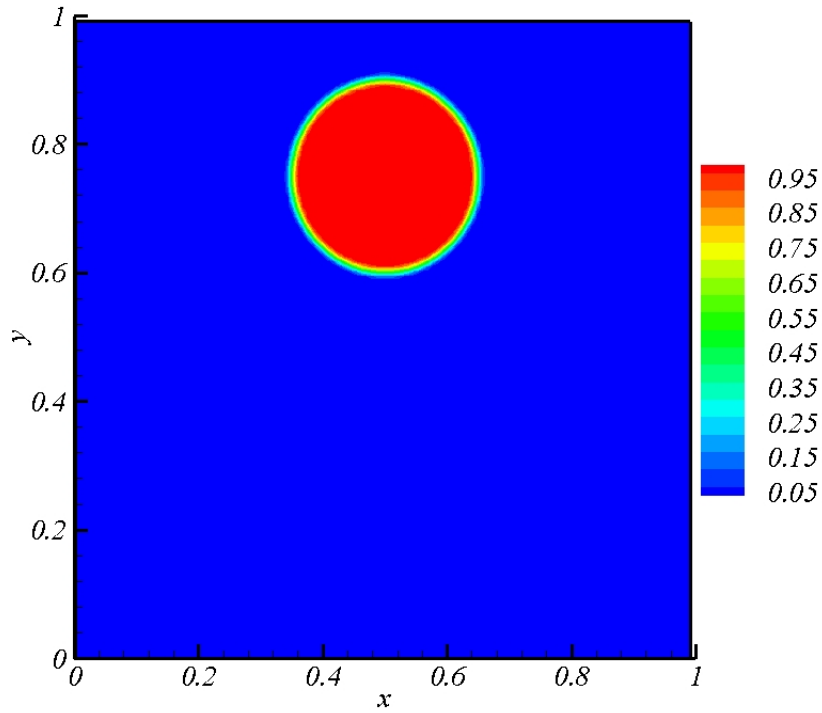


Figura 5.4: Campo da função indicadora em $t = 0$ [s]

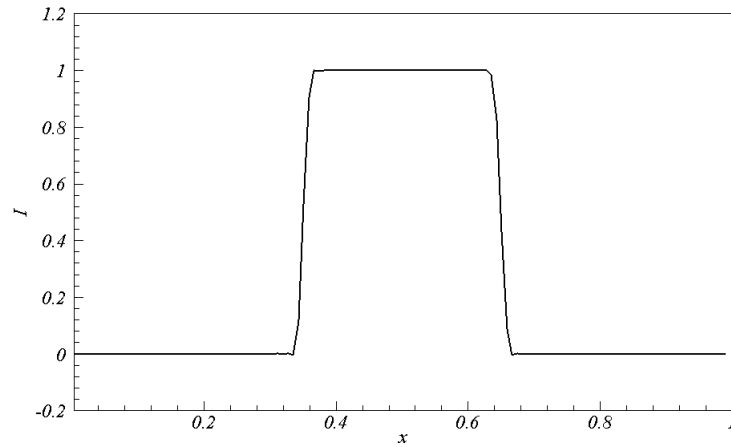


Figura 5.5: Perfil horizontal do campo da função indicadora em $t = 0$ [s] e $y = 0,5$ [m]

Na Fig. 5.6 apresenta-se a evolução no tempo do caso *vortex flow*. Nota-se o estiramento da interface ao longo do tempo e o acompanhamento da função indicadora à medida que a malha lagrangiana se deforma, o que valida a utilização desta função, mostrando que esta está qualitativamente e quantitativamente correta. A conservação de massa, a qual é calculada fazendo a subtração da área em $t = 0$ s pela área em $t = 80$ s, é de $5,74 \times 10^{-6}$.

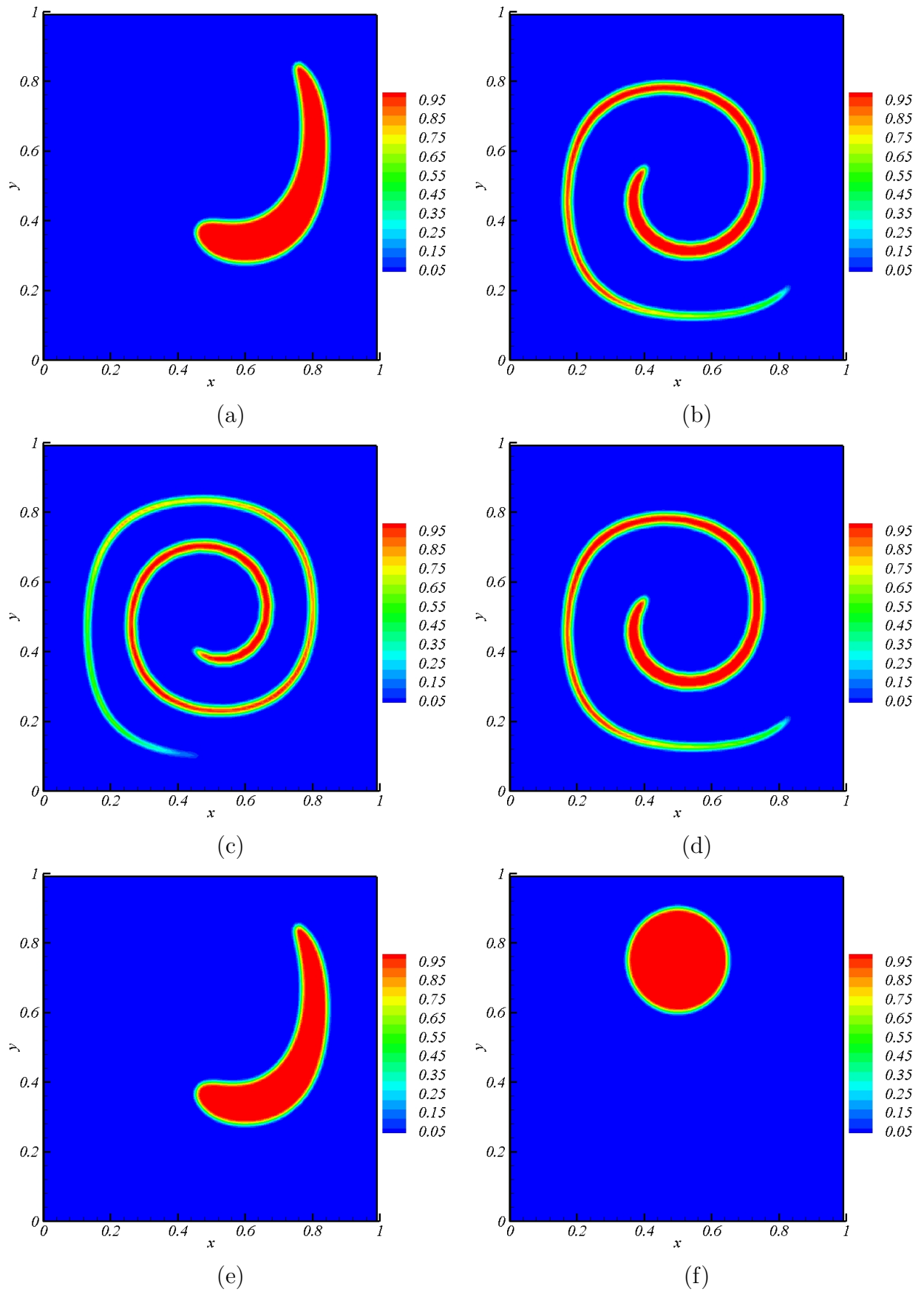


Figura 5.6: Evolução temporal do campo da função indicadora: (a) $t = 5$ [s]; (b) $t = 20$ [s]; (c) $t = 40$ [s]; (d) $t = 60$ [s]; (e) $t = 75$ [s]; (f) $t = 80$ [s].

5.4 Simulações numéricas de escoamentos bifásicos

Nesta seção busca-se simular um escoamento bifásico, através da ascensão de uma bolha no domínio bidimensional. Este estudo parte inicialmente de um fluido em repouso, em que utiliza-se um domínio periódico em ambas as direções.

A validação deste resultado é realizada através de dados experimentais fornecidos pela o diagrama de Clift, Grace e Weber (1978) (Fig. 3.4), onde para diferentes números de Eötvös e Morton, tal diagrama fornece o número de Reynolds para uma bolha em regime terminal e as suas diferentes geometrias.

Assim, os números de Eötvös e Morton são dados de entrada do código numérico, e a partir deles obtêm-se o número de Reynolds terminal. Com isso, pode-se comparar a geometria da bolha e o Reynolds terminal que ela deve atingir com os dados experimentais de Clift, Grace e Weber (1978), e assim validar o processo.

Para todos os testes apresentados, o domínio de cálculo (Fig. 5.7) é dado por $\Omega = [0; 4\pi] \times [0; 12\pi]$, a tensão superficial (σ) é de $1,0 [N/m]$, diâmetro da bolha $d_d [m]$ é de $0,7\pi [m]$, malha é de 128×384 e um $dt = 0,001 [s]$. Além disso, as adimensionalizações foram feitas apenas para pós-processamento. x e y foram adimensionalizados a partir do diâmetro da bolha e o tempo utilizado é um tempo adimensional dado por $t^* = \frac{t}{\sqrt{d_d/g}}$.

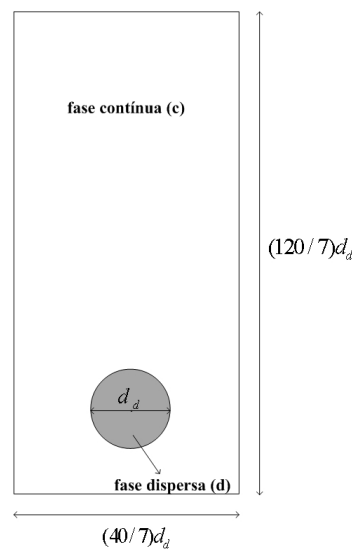


Figura 5.7: Esquema do domínio de cálculo utilizado para a simulação numérica de uma única bolha ascendente.

5.4.1 Ascensão de uma bolha cilíndrica sem remalhagem lagrangiana

No presente trabalho tem-se uma única bolha no domínio e a geometria desta não altera ao longo do tempo. Este teste é usado para validar o código na simulação do transporte completo de uma bolha.

Dois outros parâmetros governam o escoamento ascendente de uma bolha, os quais são as razões entre as massas específicas (λ) das diferentes fases e as razões entre as viscosidades (γ) das diferentes fases, que, para este caso, são 0,5 e 0,5, respectivamente.

Os números de Eötvös e Morton tem valores iguais a 1 e 0,01, respectivamente, o que, pelos dados experimentais de Clift, Grace e Weber (1978), a bolha se mantém em regime cilíndrico. Na Fig. 5.8, tem-se o campo da massa específica (ρ) para diferentes t^* , e assim observa-se o deslocamento da interface circular na direção vertical.

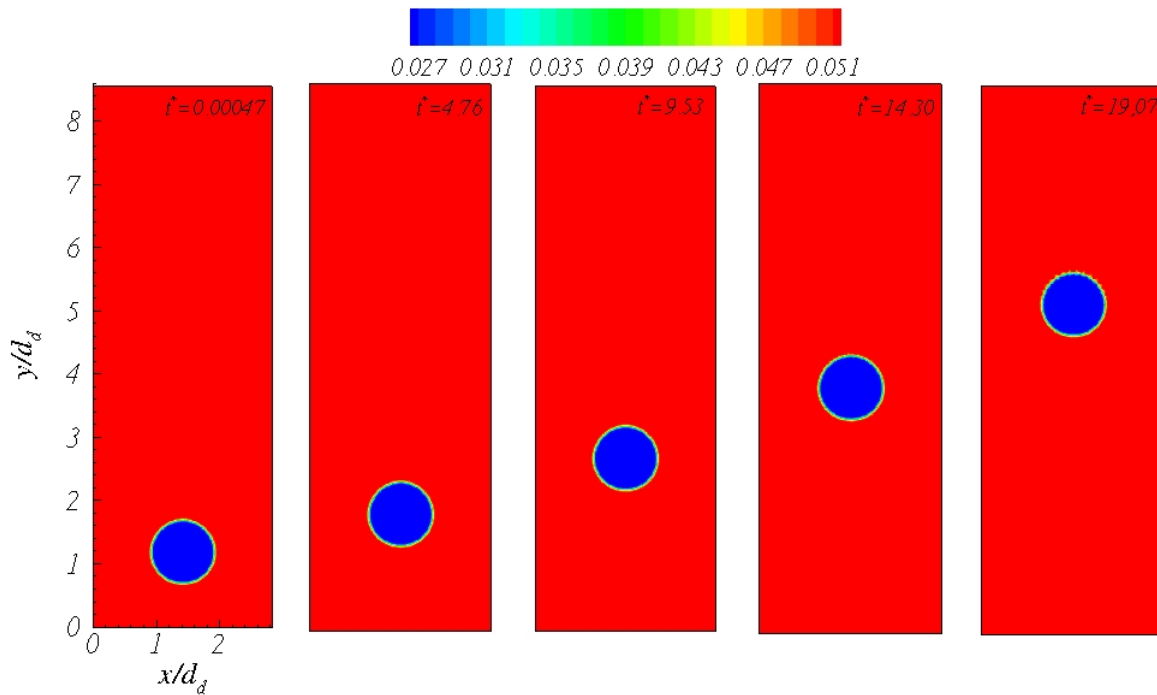


Figura 5.8: Evolução temporal do campo de massa específica para $Eu = 1$ e $M = 0,01$.

A Fig. 5.9 (a) mostra o campo de massa específica, superposto por linhas de corrente em $t^* = 14,30$. Observa-se a formação de duas recirculações internas, no mesmo sentido do movimento do fluido externo, o qual está qualitativamente consistente com o que se observa experimentalmente (Fig. 5.9 (b)). O resultado experimental mostra uma visualização das linhas de corrente de um escoamento interno à uma bolha de fluido (CLIFT; GRACE;

WEBER, 1978).

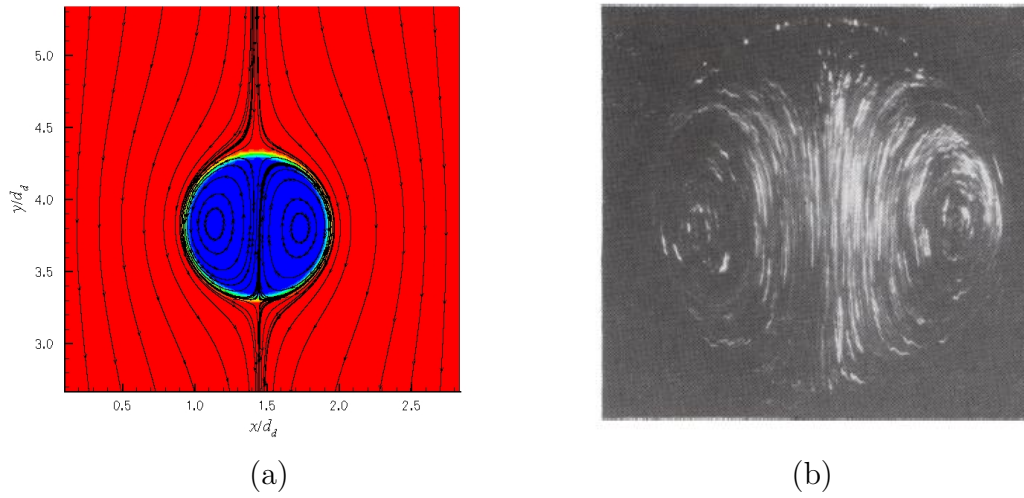


Figura 5.9: (a) Linhas de corrente em uma bolha ascendente e (b) visualização experimental da recirculação interna em uma bolha ascendente (CLIFT; GRACE; WEBER, 1978).

Na Fig. 5.10, tem-se o campo de pressão para diferentes t^* . Através da interface, observa-se um salto de pressão, o qual pode ser validado através de um salto de pressão analítico dado pela Lei de Young-Laplace (Eq. 3.25).

Para avaliar este salto de pressão, foi extraído um perfil horizontal do campo de pressão, no tempo $t^* = 9,53$, passando pelo centro da bolha. A Fig. 5.11 mostra, o perfil de pressão p^* , em que $p^* = \frac{p}{\rho_c U^2}$, e $U = \sqrt{d_d/g}$.

O salto de pressão, calculado numericamente, assume o valor de $p^*(x/d_d = 0.5) - p^*(x/d_d = 3) = 1.9823$. Analiticamente, o salto $\Delta p = 1.9999$, o que implica em um erro de 0.83%. O cálculo do erro foi feito através da expressão dada pela Eq. 5.13.

Villar (2007a) utilizando uma malha adaptativa com 3 níveis de refinamento, o que equivale a uma malha 128×384 , obteve um erro de 0.91%. Já Silva (2002), utilizando um Modelo Físico Virtual apresenta um erro igual a 0.67%. Portanto, o erro encontrado no presente trabalho é aceitável e permite afirmar que o salto de pressão está sendo simulado como esperado.

Nas Fig. 5.12 e Fig. 5.13, são mostrados os campos das componentes horizontal e vertical da velocidade. Na Fig. 5.13, a região em que apresenta uma maior velocidade é onde está localizada a bolha, e, além disso, esta velocidade positiva é devido à existência das

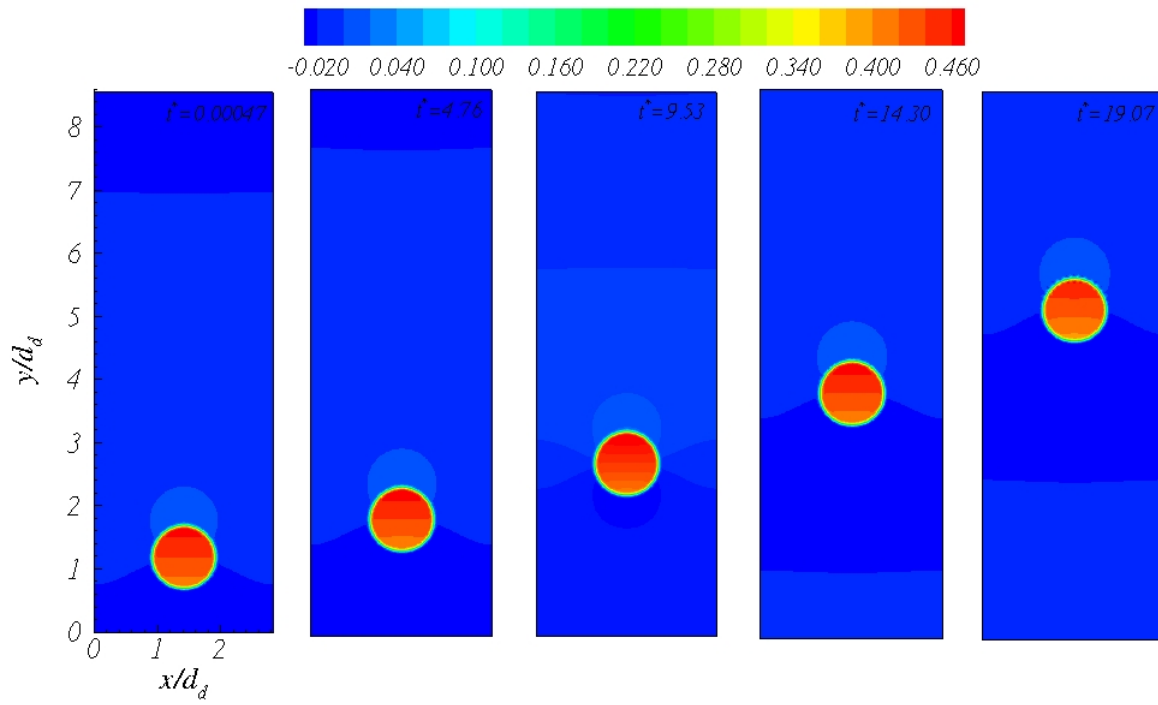


Figura 5.10: Evolução temporal do campo de pressão para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

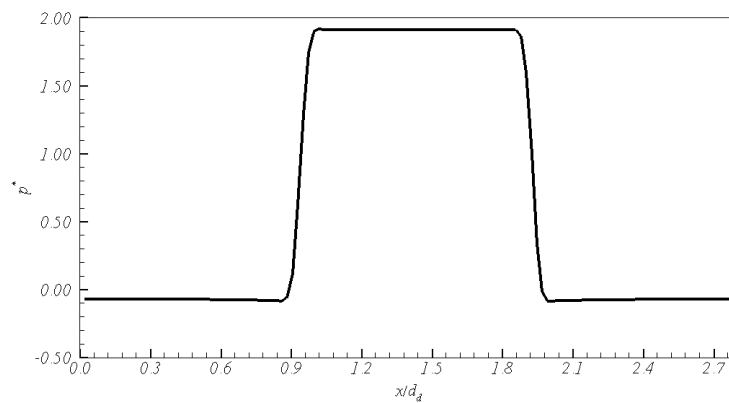


Figura 5.11: Salto de pressão ao longo de x e y na altura do centro da bolha para $t^* = 9,53$ para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

recirculações internas e ao movimento da bolha ascendente.

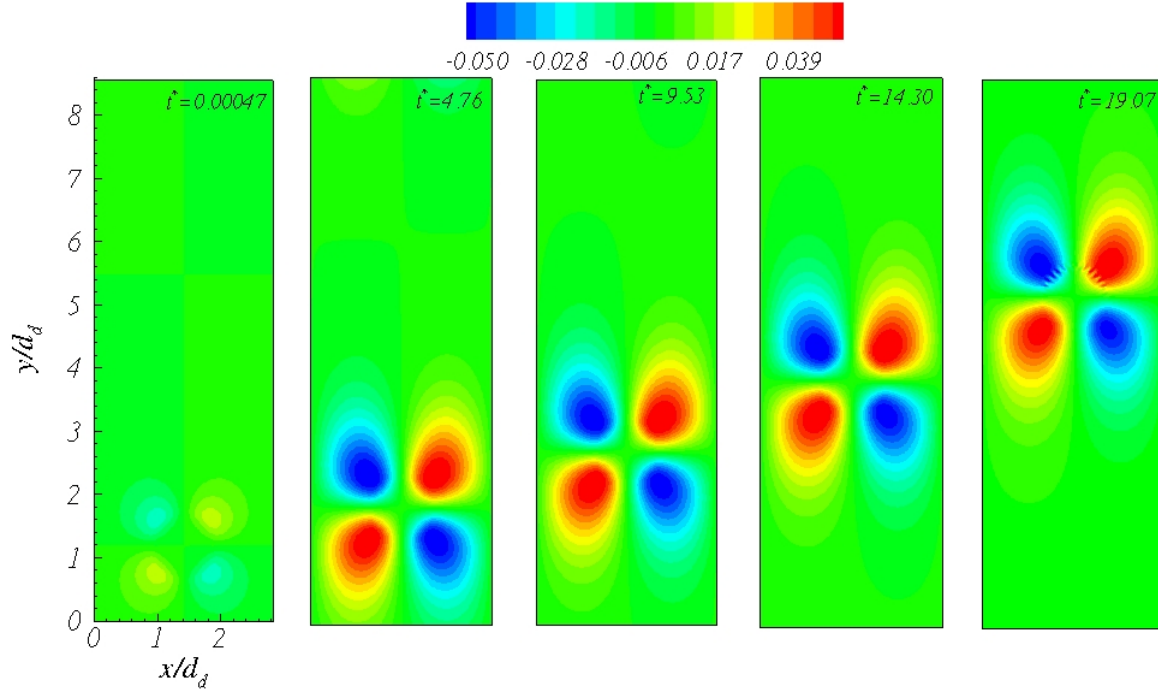


Figura 5.12: Evolução temporal do campo da componente horizontal de velocidade para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

O campo de vorticidade é apresentado na Fig. 5.14. Extraíndo um perfil horizontal deste campo de vorticidade em $t^* = 0,00047$ na altura do centro da bolha, Fig. 5.15, nota-se valores positivos e negativos da vorticidade o qual leva a formação de linhas de corrente no sentido horário, anti-horário fora e internamente à bolha.

A partir da Eq. 3.24 obtêm-se o número de Reynolds (Re). A Fig. 5.16 apresenta a evolução temporal de Re . Observando essa figura nota-se que a bolha tende a estabelecer regime estacionário em $Re = 0,77$. Clift, Grace e Weber (1978) apresenta, para os mesmos números de Eötvös e Morton, que neste caso são 1 e 0,01, respectivamente, um número de Reynolds para uma bolha ascendente tridimensional aproximadamente igual a 1. Observa-se que as relações de massa específica (γ e λ) são diferentes, o que explica o resultado numérico com o experimental serem diferentes. Além disso, os dados experimentais são tridimensionais, e, os resultados aqui presente são bidimensionais.

Nota-se na Fig. 5.16 que partir de $t^* = 15$, Re decresce e apresenta oscilações. Em resultados anteriores, como no campo de velocidade horizontal no $t^* = 19,07$ (Fig. 5.12)

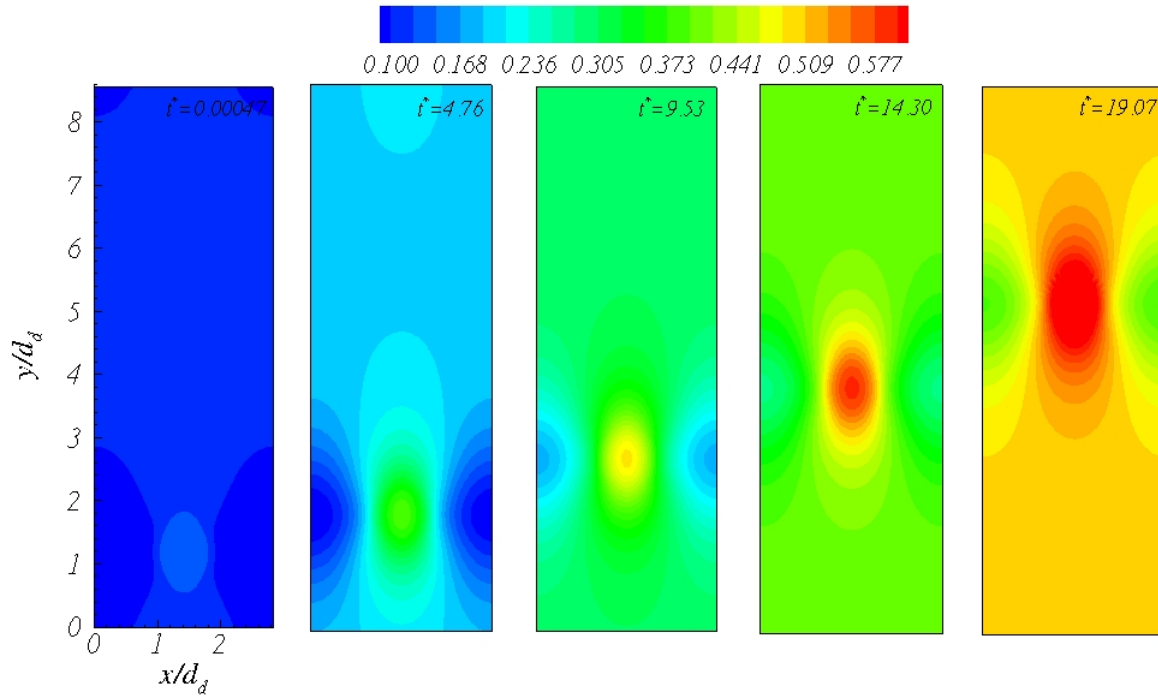


Figura 5.13: Evolução temporal do campo da componente vertical de velocidade para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

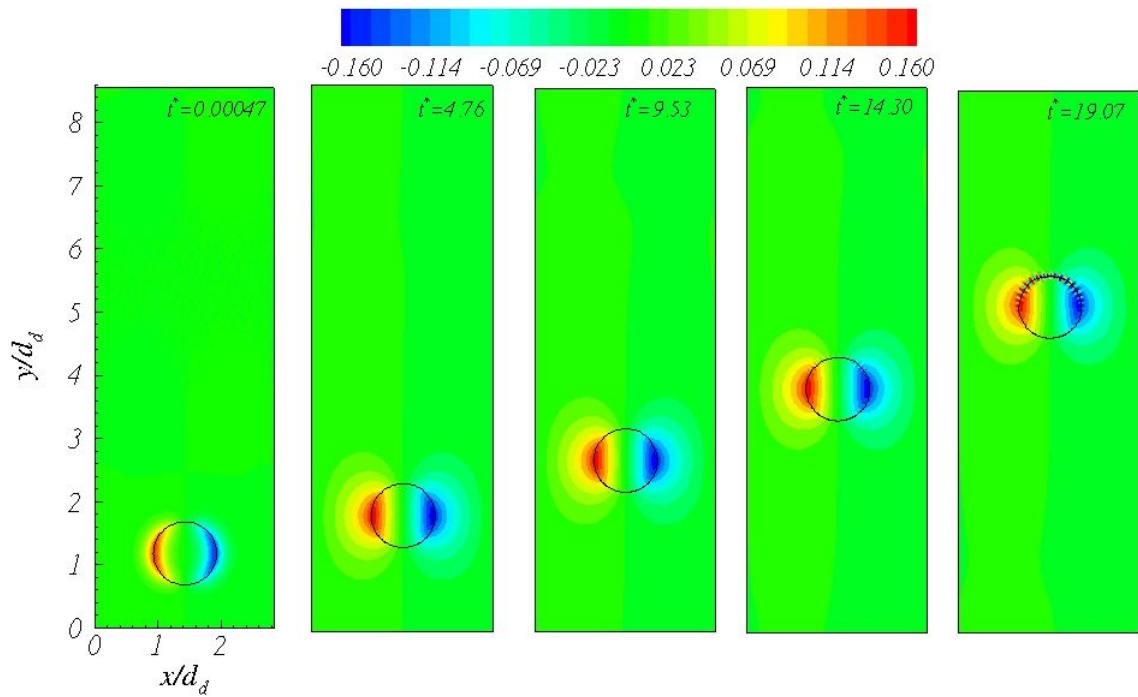


Figura 5.14: Evolução temporal do campo de vorticidade para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

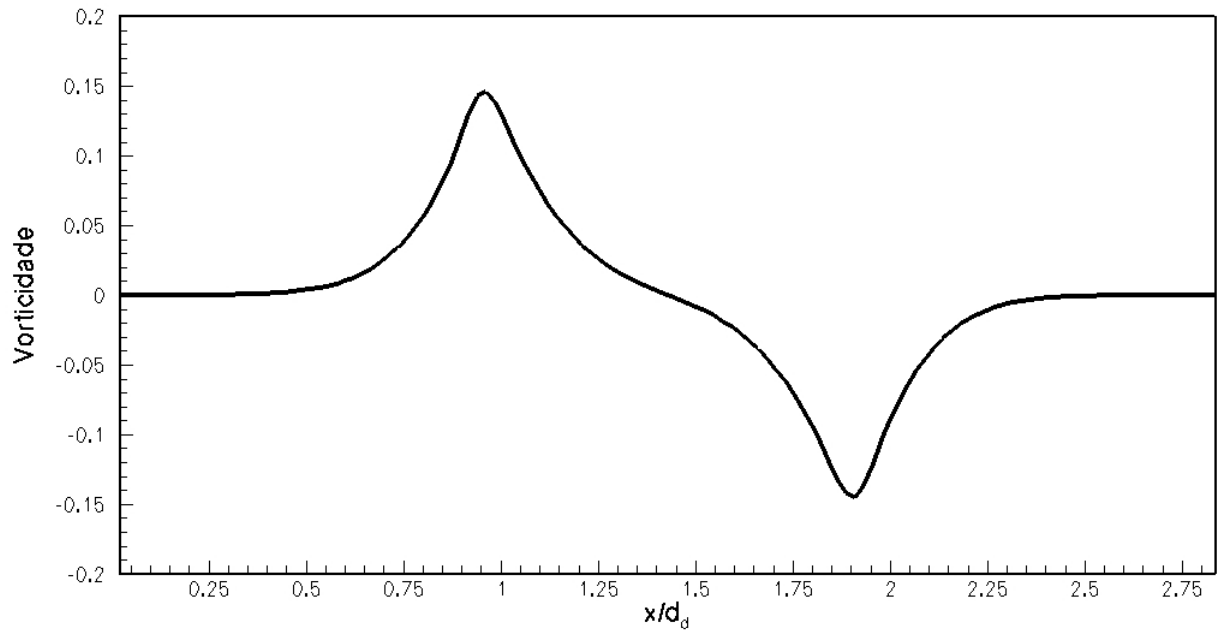


Figura 5.15: Perfil horizontal do campo de vorticidade em $t^* = 0.00067$, na altura do centro da bolha, para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

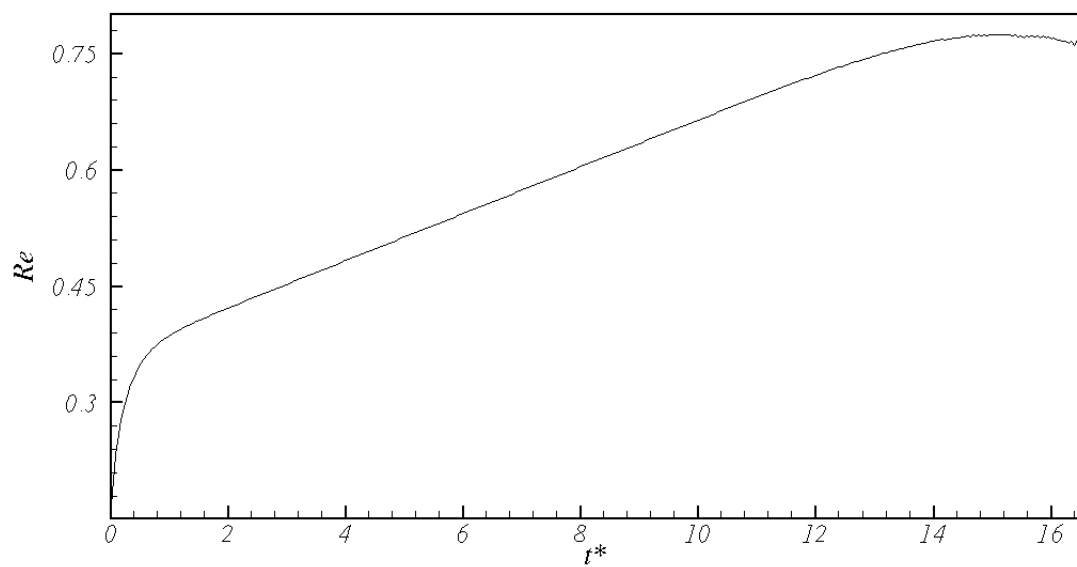


Figura 5.16: Evolução temporal do número de Reynolds para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

e no campo de vorticidade em $t^* = 19,07$ (Fig. 5.14) também se observa oscilações. Tal problema pode ser explicado devido a ausência de regularização e da remalhagem dos pontos lagrangianos.

A regularização se baseia na equidistribuição dos pontos lagrangianos. Matematicamente significa acrescentar à equação de movimento da interface uma velocidade tangencial Eq. 3.69. A remalhagem dos pontos pode ser definida como acrescentar e retirar pontos lagrangianos à medida que a interface se desloca e se deforma.

Essa técnica é necessária pois o cisalhamento do fluido com a interface lagrangiana desloca os pontos lagrangianos, de forma que se acumulem em uma região da interface. Na Fig. 5.17 observa-se que os pontos lagrangianos vão se distanciando na parte superior da interface e se acumulando na parte inferior. Nota-se que a medida que a bolha sobe esse acúmulo na parte inferior aumenta significativamente.

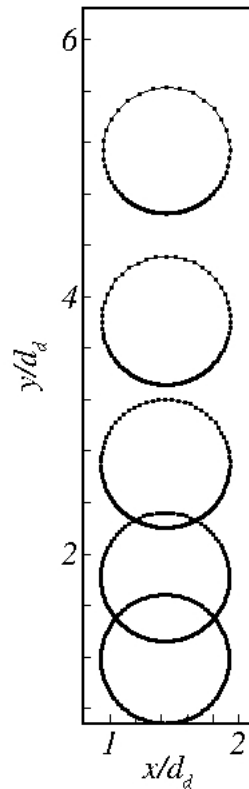


Figura 5.17: Evolução vertical do transporte da interface sem o processo de equidistribuição e remalhagem.

Para melhor visualização, ampliou-se a interface apresentada na Fig. 5.17, onde observa-se que existe malha euleriana que não possui ponto lagrangiano. Isso resulta em um déficit de força euleriana nos pontos de colocação euleriano, os quais não recebem informação dos pontos lagrangianos. Provoca-se, então, uma divergência numérica nos resultados. Na próxima seção são mostrados resultados que possui a remalhagem dos pontos lagrangianos. No presente trabalho a fase de regularização ainda não foi realizada, contendo apenas a remalhagem, a qual por sua vez sabe-se que não é suficiente para garantir uma boa regularização dos pontos lagrangianos.

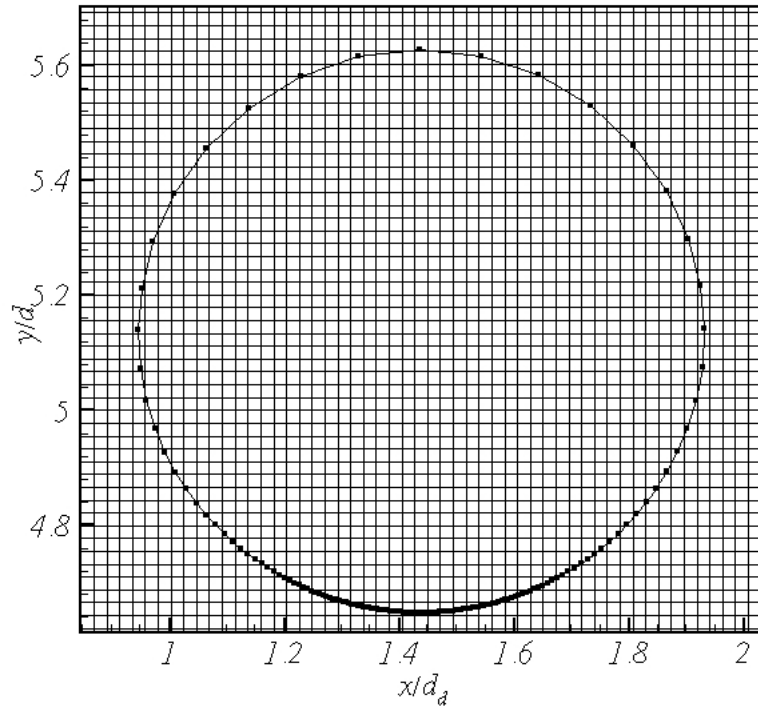


Figura 5.18: Malha euleriana sobreposta pela malha lagrangiana sem o processo de equidistribuição e remalhagem.

5.4.2 Ascensão de uma bolha cilíndrica com remalhagem dos pontos lagrangianos

Na busca de melhorar os resultados da subseção 5.4.1, foi proposta, para este caso, a remalhagem dos pontos lagrangianos. Como dito anteriormente essa remalhagem se baseia em inserir e retirar pontos à medida que a se interface deforma.

Numericamente, este procedimento consiste em estipular um ds_{max} e um ds_{min} , os

quais serviram de parâmetros, ou seja, se em alguma região da malha lagrangiana o ds_{max} for atingido, faz-se necessário inserir pontos lagrangianos. Caso o ds_{min} seja alcançado, deverá, então, retirar pontos lagrangianos. Para este teste o $ds_{max} = 1,1dx$ e $ds_{min} = 0,4dx$.

Como observado anteriormente, nas Figs. 5.14 e 5.12, nota-se oscilações nos resultados em $t^* = 19,07$, devido a ausência da remalhagem dos pontos lagrangianos. Fazendo tal procedimento de remalhagem, pode-se notar, a partir das Fig. 5.19 (a) e (b), uma melhora nos resultados, onde não se verifica mais oscilações numéricas presentes na Fig. 5.14.

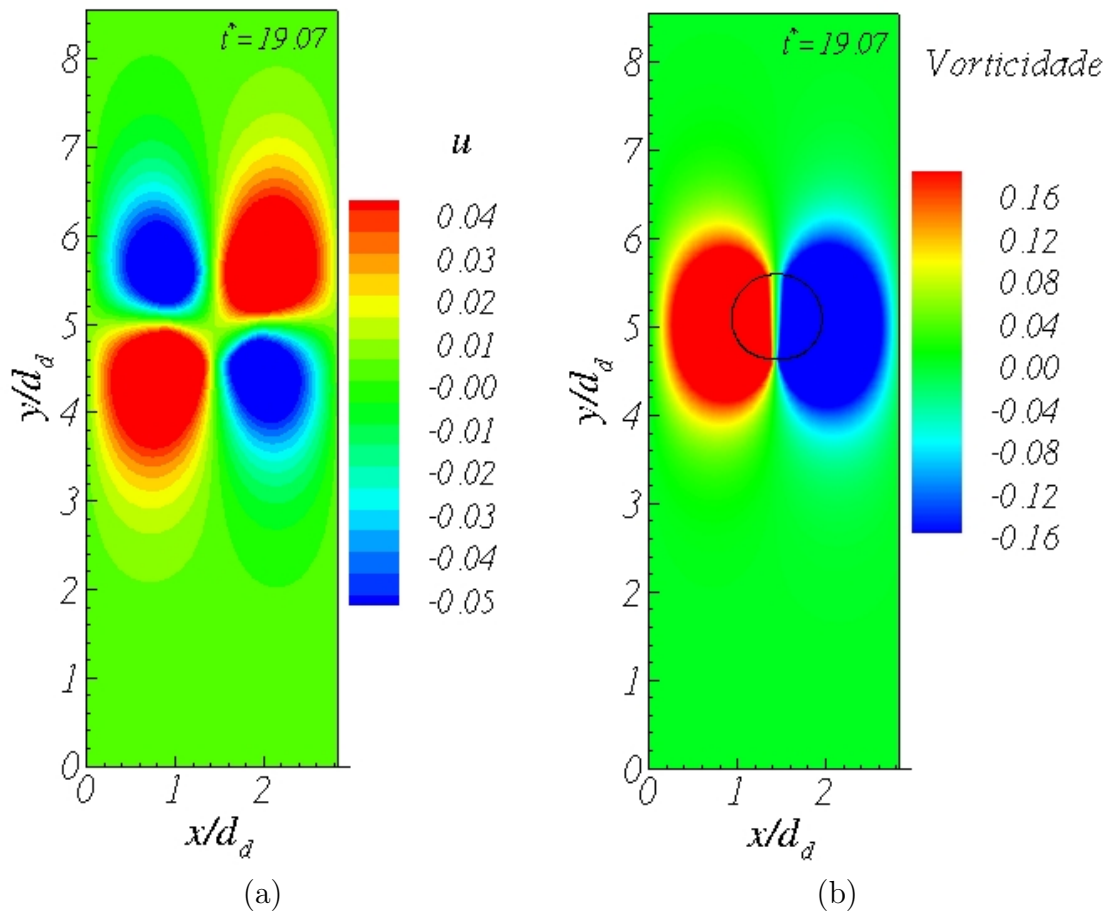


Figura 5.19: (a) Velocidade horizontal em $t^* = 19,07$ para $Eo = 1$ e $M = 0,01$ e (b) vorticidade em $t^* = 19,07$ para $Eo = 1$ e $M = 0,01$.

Na Fig. 5.20 é mostrada a ascensão de uma bolha com remalhagem da interface lagrangiana. Observa-se que não existe malha euleriana que não possua pelo menos um ponto lagrangiano, solucionando o problema de divergência numérica ocorrido na seção acima.

Porém, nota-se que mesmo com a inserção de pontos lagrangianos, estes pontos tendem se acumular na região inferior da bolha. Isso acontece, pois a remalhagem não é suficiente para obtenção de bons resultados, sendo necessário realizar a regularização dos pontos lagrangianos. A equidistribuição será incluída em tarefas futuras do presente trabalho.

Além disso, observa-se também, na Fig. 5.20, uma deformação da geometria, a qual pode ser explicada devido ao excesso de pontos lagrangianos na parte inferior da interface, acarretando em um aumento da força na fronteira, gerando a deformação da bolha. Este problema também pode ser corrigido através da equidistribuição.

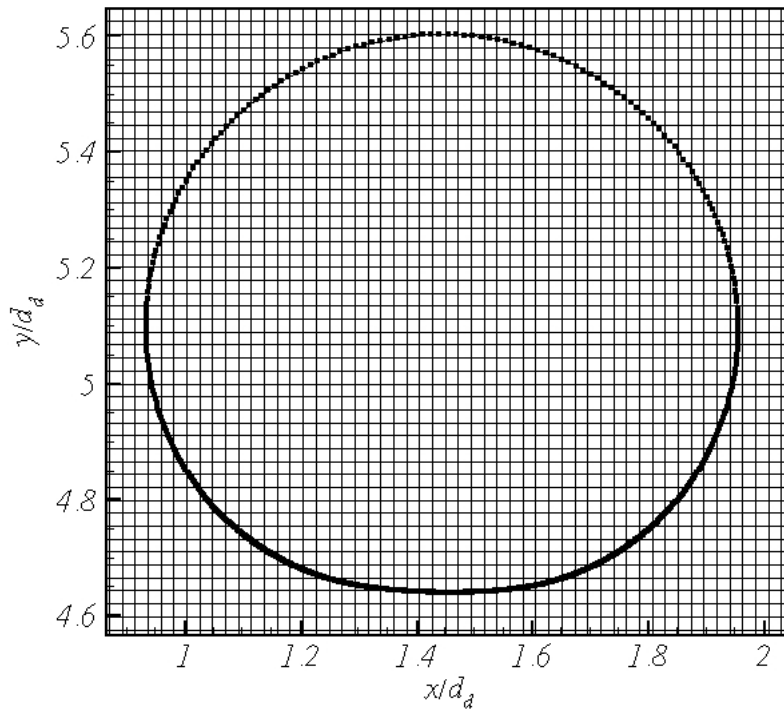


Figura 5.20: Malha euleriana sobreposta pela malha lagrangiana.

Na Fig. 5.21 tem-se uma curva tracejada, que representa a evolução temporal do número de Reynolds sem a remalhagem lagrangiana. A curva contínua é a evolução temporal de Re com a técnica de inserir e retirar pontos lagrangianos. Observa-se que mesmo com a remalhagem Re não entra em regime, e, a partir de $t^* = 15$ nota-se uma divergência numérica. Isso é explicado devido a ausência da regularização, como dito acima. Cabe ressaltar que essa correção não será realizada nesta dissertação, sendo proposto para trabalho futuro.

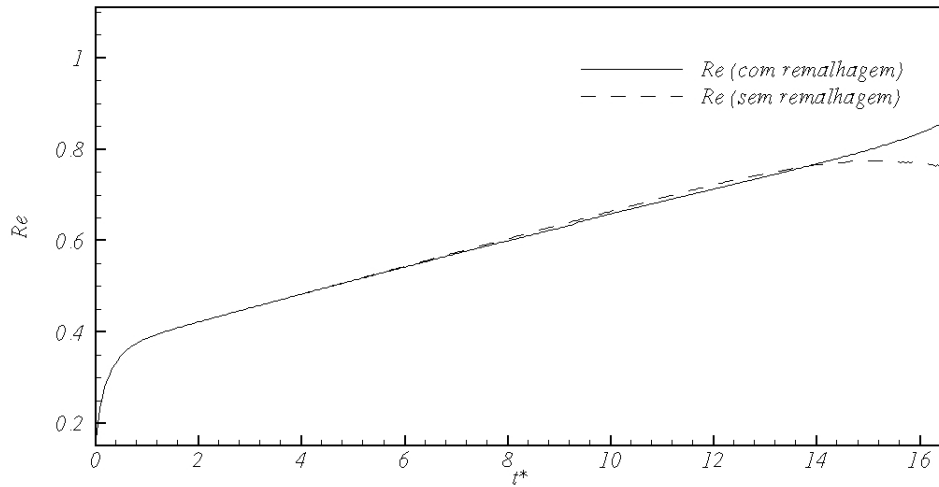


Figura 5.21: Evolução temporal do número de Reynolds.

5.4.3 Ascensão de uma bolha deformando com remalhagem dos pontos lagrangianos

Nesta subseção tem-se a ascensão de uma bolha deformando somente com a remalhagem dos pontos lagrangianos. Através do diagrama de Clift, Grace e Weber (1978), para Eötvös e Morton iguais a 100 e 10000, respectivamente, a bolha ascendente atinge a geometria de uma calota-elipsoidal e um $Re = 1$. Na Fig. 5.22 é plotado o campo de massa específica.

Na Fig. 5.23 é apresentado o campo de vorticidade. Nota-se que para $t^* = 19.07$ o início de recirculações na região de curvatura mais alta à jusante da bolha, a qual é identificada em regimes de calota-elipsoidal. Isso ocorre, pois em regiões de altas curvaturas há o aparecimento de recirculações e quanto maior a curvatura mais intensa é a vorticidade gerada.

A Fig. 5.24 mostra a evolução de Re ao longo do tempo. Nesse gráfico, nota-se que a bolha não atingiu o regime permanente devido ao tamanho do domínio e ao tempo de simulação.

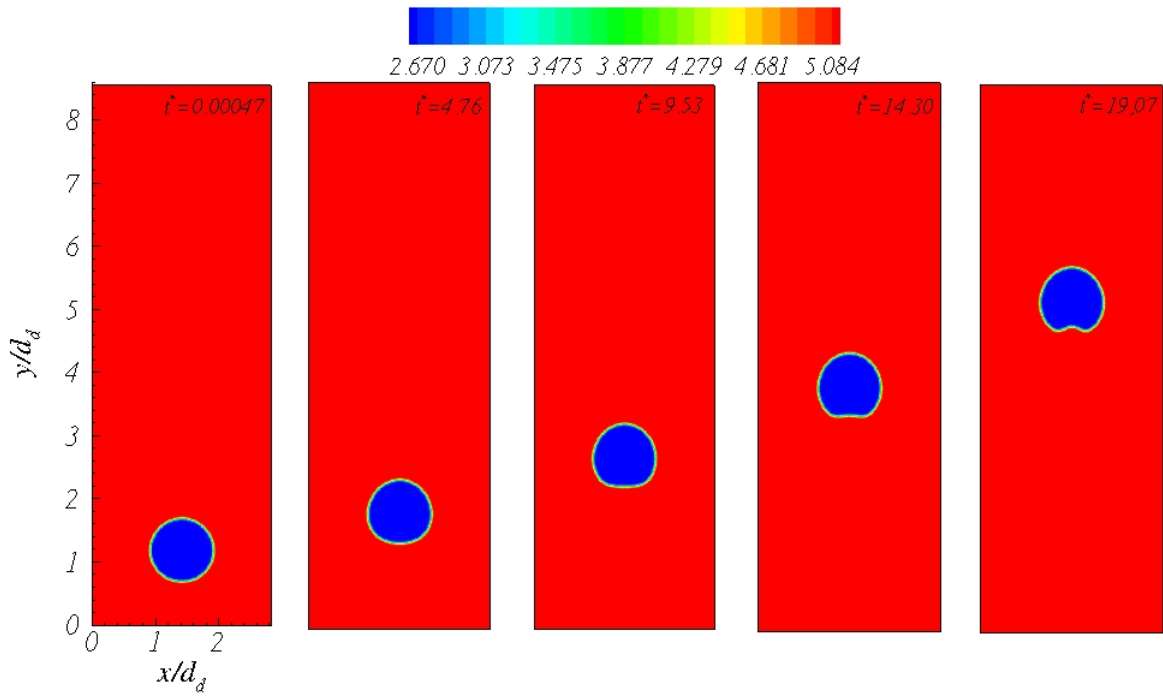


Figura 5.22: Evolução temporal do campo de massa específica para $Eo = 100$ e $M = 10.000$.

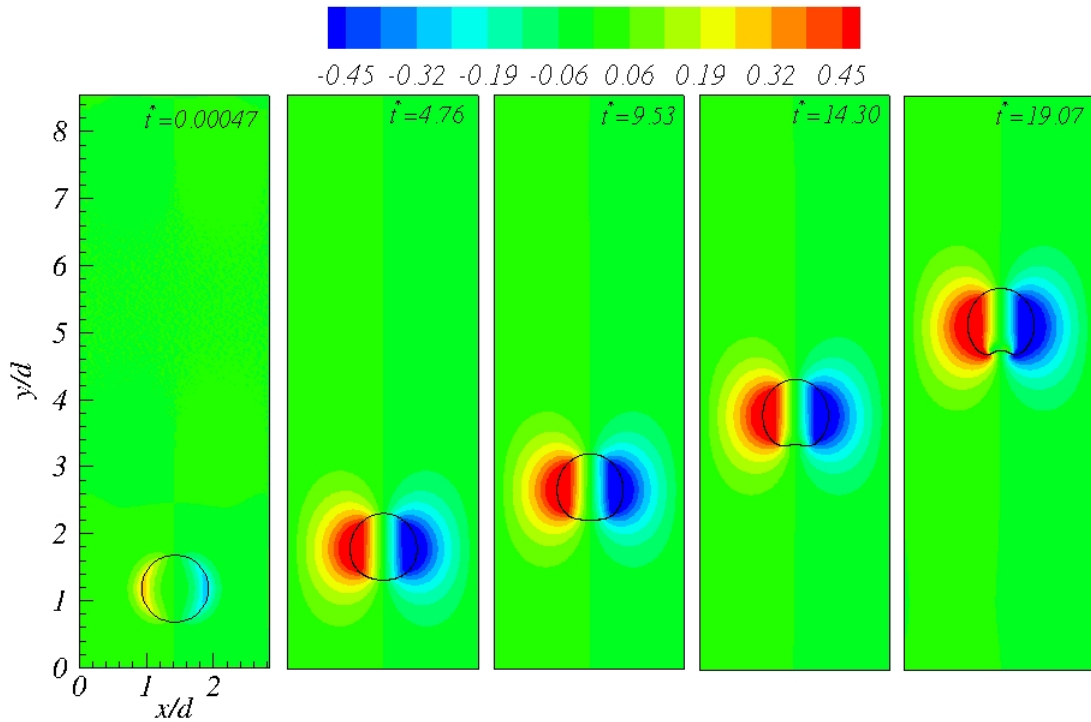


Figura 5.23: Evolução temporal do campo de vorticidade para $Eo = 100$ e $M = 10.000$.

5.4.4 Ascensão de uma bolha para altas razões de densidade com remalhagem dos pontos lagrangianos

Segundo Esmaeeli e Tryggvason (1998), as razões de massa específica e viscosidade afetam diretamente a velocidade terminal da bolha, ou seja, o fato de usar $\lambda = 0,05$ ocorre

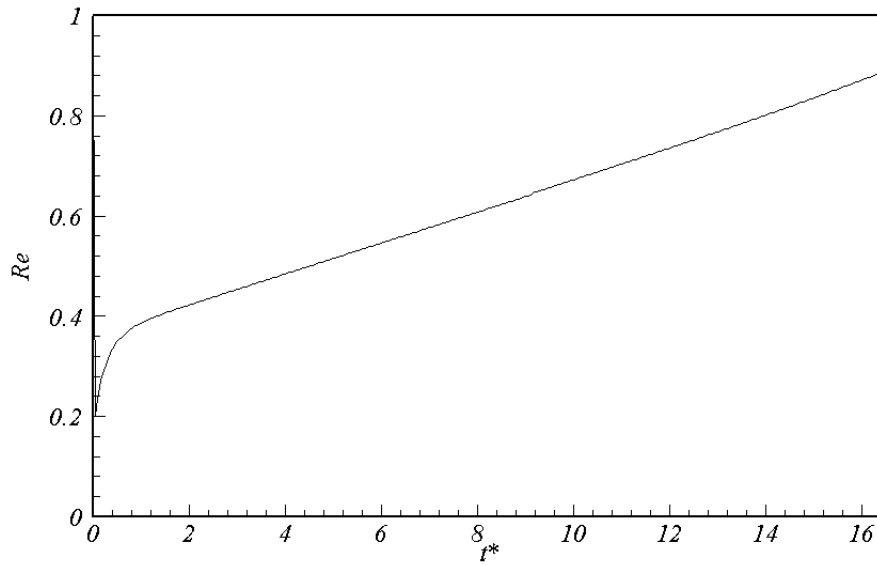


Figura 5.24: Evolução temporal do número de Reynolds.

uma redução na velocidade terminal de 2,3%. Nos resultados anteriores, apresentados no presente trabalho, utiliza-se um $\lambda = 0,5$, e assim espera-se uma redução maior na velocidade terminal, o que altera o Re quando a bolha entra em regime.

Geralmente, as variações de massa específica e viscosidade das bolhas em meios fluidos são tipicamente grandes na maioria dos escoamentos de interesse. Além disso, variações altas das propriedades físicas torna-se complexa a sua resolução quando se tem a equação de Poisson para a pressão. Portanto, é atrativo testar a metodologia do presente trabalho para altas razões de massa específica e viscosidade, uma vez que a metodologia apresentada não resolve a equação de Poisson para o desacoplamento pressão-velocidade.

Nesta seção, são feitos testes para diferentes valores de λ , $1/2$, $1/4$ e $1/100$. Na Fig. 5.25 tem-se a evolução temporal do campo de massa específica para $\lambda = 1/100$, o qual mostra a ascensão da bolha até $t^* = 1,69$. Após esse tempo, devido à alta variação de massa específica, e, conseqüentemente, uma alta tensão cisalhante, os pontos lagrangianos tendem a se acumular nas regiões de alta curvatura. Novamente, há uma divergência numérica devido a ausência de uma regularização dos pontos lagrangianos.

A partir do campo de massa específica (ρ), retira-se o perfil horizontal (Fig. 5.26) em $t^* = 1,69$ para as razões $\lambda = 1/2$, $\lambda = 1/4$ e $\lambda = 1/100$. Observa-se que quanto menor a

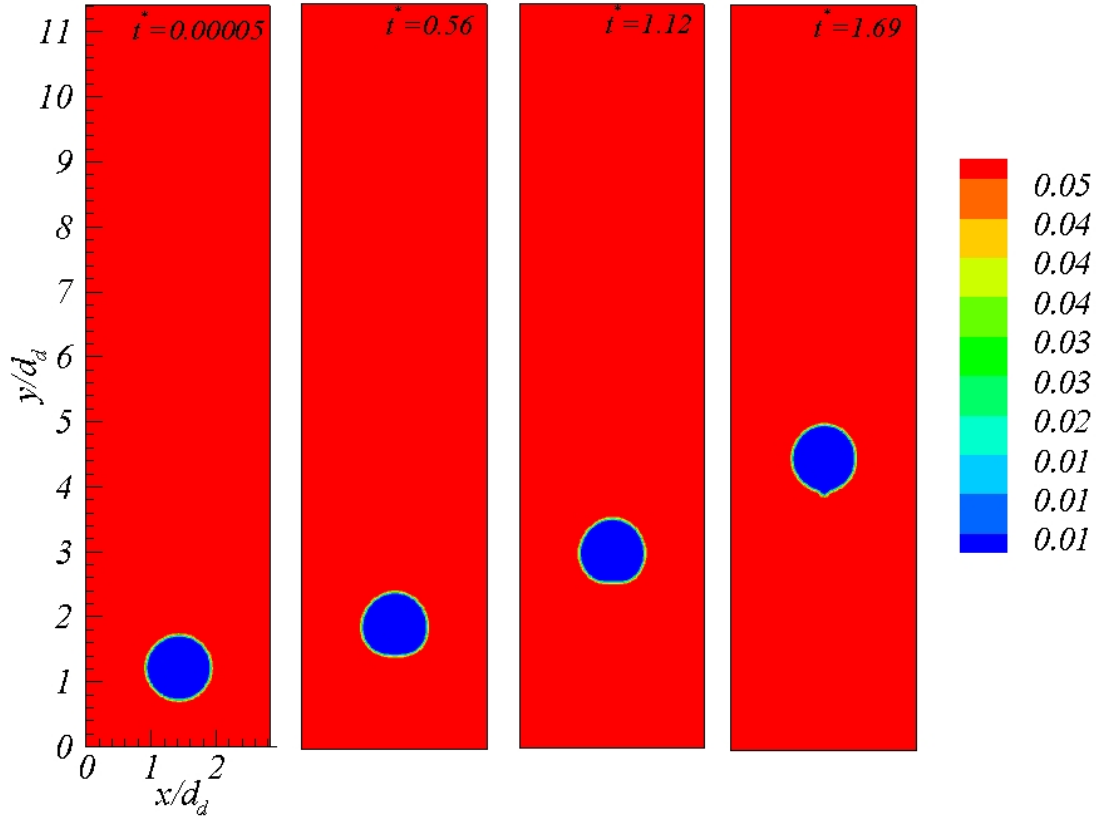


Figura 5.25: Evolução temporal do campo de massa específica para $\lambda = 1/100$.

razão (λ) maior é o salto do campo de massa específica, e, além disso é importante ressaltar que independente de λ a magnitude do fenômeno de Gibbs é a mesma. Portanto, diante de outras metodologias, o método pseudo-espectral de Fourier apresenta esta vantagem.

Na Fig. 5.27 apresenta uma comparação de diferentes λ em relação ao número de Reynolds. Comprovando o que foi dito anteriormente, o método sempre se mostra robusto para modelar e simular escoamentos bifásicos com altas razões de propriedades físicas. Nota-se nesse gráfico que a medida que diminui a razão λ há um aumento da velocidade terminal.

Na Fig. 5.28 tem-se o salto de pressão. Numericamente, este salto assume o valor de $p^*(x/d_d = 0,5) - p^*(x/d_d = 3) = 1,9823$ para a razão de massa específica de $\lambda = 1/2$. Para as razões $\lambda = 1/4$ e $\lambda = 1/100$ o salto de pressão numérico são, respectivamente, $p^*(x/d_d = 0,5) - p^*(x/d_d = 3) = 1,9573$ e $p^*(x/d_d = 0,5) - p^*(x/d_d = 3) = 1,9534$. Analiticamente, o salto $\Delta p = 1,9999$, o que implica em um erro de 0,83% para $\lambda = 1/2$, 2,08% para $\lambda = 1/4$ e 2,27% para $\lambda = 1/100$. O cálculo do erro foi feito através da expressão

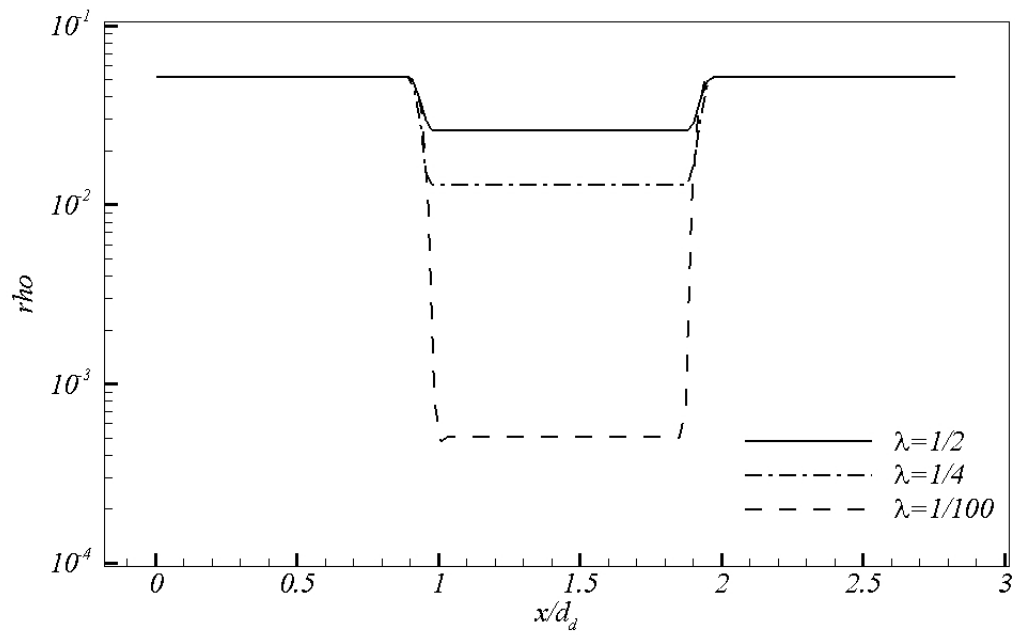


Figura 5.26: Perfil horizontal do campo de massa específica para diferentes λ .

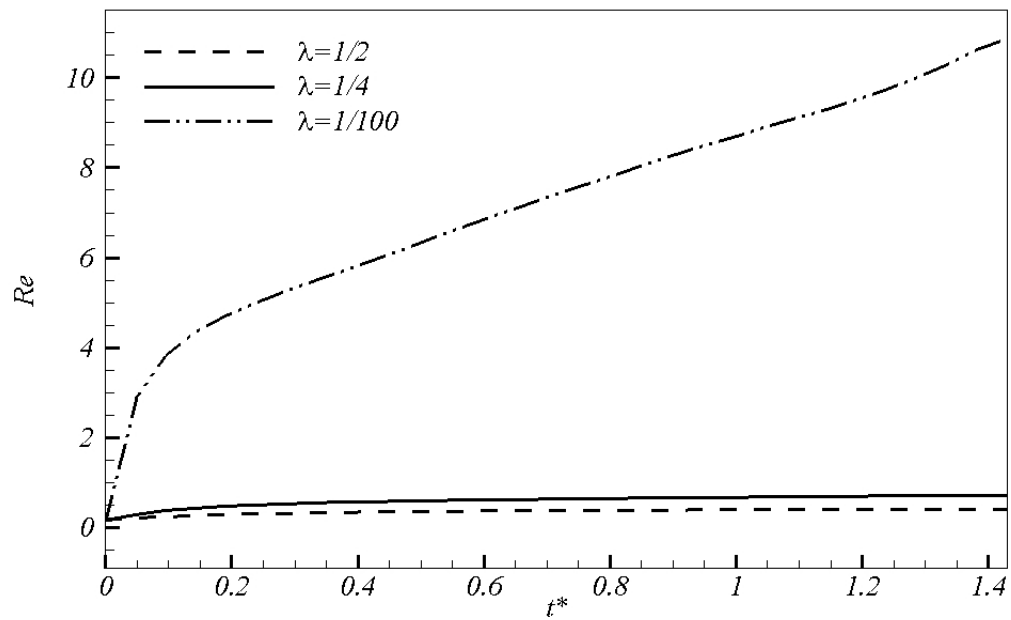


Figura 5.27: Perfil horizontal do campo de massa específica para diferentes λ em $t^* = 1,65$ na altura do centro da bolha.

dada pela Eq. 5.13.

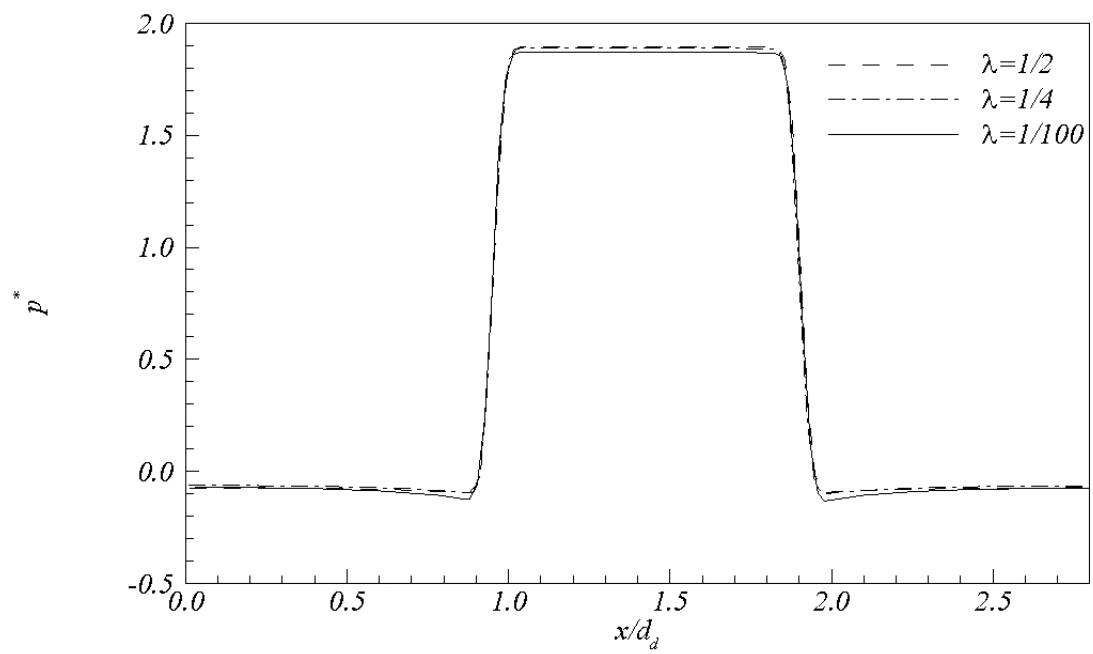


Figura 5.28: Evolução temporal do número de Reynolds terminal para diferentes razões de massa específica λ .

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

6.1 Conclusões

No presente trabalho, é apresentado a simulação numérica de escoamentos bifásicos utilizando a metodologia pseudo-espectral de Fourier acoplada com o método híbrido *Front-Tracking/ Front-Capturing*. O código numérico, tanto para propriedades físicas (ρ e μ) constantes e variáveis, é verificado através da técnica da solução manufaturada onde atinge erro de truncamento (erro de máquina). A solução manufaturada aqui utilizada foi adaptada de Nós (2007), o qual obteve erros na ordem de 10^{-2} para uma malha mais refinada. Comparando os resultados, pode-se notar a alta acurácia da metodologia proposta.

Para validação da função interpolação e função distribuição é realizado o teste das correntes espúrias. Os erros numéricos encontrados foram da ordem de erro de truncamento. Assim, pode-se concluir que tanto a função interpolação, quanto a função distribuição e o cálculo da força interfacial foram validadas.

A validação da função indicadora foi feita através de um caso teste denominado *vortex-flow*. A partir dos resultados apresentados, observa-se que a função indicadora acompanha bem a interface lagrangiana enquanto ela é estirada, o que permite validar os cálculos da função indicadora. A validação da função indicadora é de extrema importância, pois garantirá que as propriedades físicas do fluido interno e externo à bolha permanecerão constantes enquanto ocorre a ascensão e deformação da bolha. Cabe ressaltar que a função indicadora

é resolvida por meio de uma integral numérica e não por um sistema linear.

A ascensão de uma única bolha em regime cilíndrico, sem a remalhagem e regularização dos pontos lagrangianos, foi também apresentada neste trabalho. Os resultados apresentados para este caso mostram que à medida em que a bolha sobe, ela sofre um aumento da tensão de cisalhamento. Isso acarreta movimentação dos pontos lagrangianos para região inferior da bolha. Devido à ausência de remalhagem e regularização desses pontos, tem-se um déficit de força euleriana nos pontos de colocação euleriano, pois não recebem informação dos pontos lagrangianos, e assim nota-se o início da divergência numérica dos cálculos. O salto de pressão numérico, quando comparado com o analítico, apresenta um erro aceitável quando comparado com outras metodologias, concluindo que o transporte da bolha está ocorrendo como esperado.

A remalhagem dos pontos lagrangianos foi testada para a ascensão de uma bolha cilíndrica e para casos em que a bolha se deforma. Nota-se que em ambos resultados apresentados com a remalhagem dos pontos lagrangianos obteve melhores resultados, porém nota-se que mesmo com a inserção de pontos lagrangianos, estes tendem a se acumular na região inferior da bolha. Isso acontece, pois somente a remalhagem não é suficiente para a obtenção de bons resultados, sendo necessário realizar a regularização dos pontos lagrangianos.

Dado a necessidade e dificuldade de simular numericamente a ascensão de uma bolha com altas variações de massa específica e viscosidade, foram realizados testes com várias razões de propriedades físicas. É interessante ressaltar que a dificuldade em trabalhar com altas razões de propriedades físicas é devida à solução da equação de Poisson para o acoplamento pressão-velocidade. No presente trabalho, esse tipo de problema é um atrativo, devido à eliminação da pressão pelo método pseudo-espectral. A dificuldade que pode aparecer, ao utilizar a metodologia pseudo-espectral para trabalhar com baixas razões de propriedades físicas, é o surgimento do fenômeno de Gibbs nas soluções com grandes saltos.

Diante dos resultados apresentados, conclui-se que tal como a metodologia é bastante promissora e o projeto de desenvolvimento da metodologia IMERSPEC deve ser continuado. Novos desenvolvimentos devem ser iniciados tal como a implementação da regularização dos pontos lagrangianos.

6.2 Trabalhos futuros

Em um primeiro momento, deve ser implementada a regularização dos pontos lagrangianos, e, verificada sua eficácia a partir do teste de *vortex-flow*. Posteriormente, serão realizados novos testes para a análise do transporte de bolhas até que seja alcançado o regime permanente. Além disso, devem ser realizados comparação com dados experimentais e testes com múltiplas bolhas.

Os seguintes desenvolvimentos serão necessários:

- Implementação do método VOF (Volume of fluid), tendo em vista a modelagem e a simulação de processos de interação entre bolhas e gotas.
- desenvolvimento de adaptatividade dinâmica de malha para a metodologia pseudo-espectral de Fourier.

CAPÍTULO VII

REFERÊNCIAS

- ALLAMPALLI, V.; HIXON, R.; NALLASAMY, M.; SAWYER, S. High-accuracy large-step explicit runge - kutta (*hale - rk*) schemes for computational aeroacoustics. *Journal of Computational Physics*, v. 228, 2009.
- ANNALAND, M. S.; W., D.; G., D. N.; J.A.M., K. Numerical simulation of behavior of gas bubbles using a 3-d front-tracking method. *American Institute of Chemical Engineers*, v. 52, p. 99–110, 2006.
- BOTELLA, O. On the solution of the navier-stokes equations using chebyshev projection schemes with third-order accuracy in time. *Computers and Fluid*, v. 26, p. 107–116, 1997.
- BOYD, J. P. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. [S.l.]: DOVER, 2000.
- BRIGGS, W.; HENSON, V. *The DFT*. 1. ed. Philadelphia: SIAM, 1995.
- BUNNER, B.; TRYGGVASON, G. Dynamics of homogeneous bubble flows. part2. rise velocity fluctuations. *Journal of Fluids Mechanics*, v. 466, p. 53–84, 2002.
- BUSSMAN, M.; MOSTAGHIMI, J.; S., C. On a three-dimensional volume tracking model of droplet impact. *Phys Fluids*, v. 11, p. 1406–1417, 1999.
- CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG, T. A. *Spectral methods in fluid dynamics*. New York: Springer Verlag, 1987.

CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG, T. A. *Spectral methods: fundamentals in single domains*. New York: Springer Verlag, 2006.

CANUTO, C.; HUSSAINI, M. Y.; QUARTERONI, A.; ZANG, T. A. *Spectral methods: evolution to complex geometries and applications to fluid dynamics*. New York: Springer Verlag, 2007.

CENICEROS, H. D.; ROMA, A. M. Study of the long-time dynamics of a viscous cortex sheet with a fully adaptive nonstiff method. *Physics of Fluids*, v. 16, p. 12, 2004.

CHAPRA, S.; CANALE, R. *Numerical Methods for Engineers*. [S.l.]: McGraw-Hill, 1985.

CLIFT, R.; GRACE, J. R.; WEBER, M. E. *Bubbles, Drops and Particles*. London: Academic Press, 1978.

COOLEY, T. W.; TUKEY, J. W. An algorithm for the machine calculation of complex fourier series. *Mathematics Computation*, v. 19, p. 297–301, 1965.

DA-SILVA, C. F. N. B. *The role of coherent structures in the control and interscale interactions of round, plane and coaxial jets*. Tese (Doutorado) — Institute National Polytechnique de Grenoble, Grenoble, 2001.

DATTA, R.; NAPIER, D.; NEWITT, D. The properties and behavior of gas bubbles formed at a circular orifice. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, v. 28, p. 14–26, 1950.

DAVIDSON, J.; SCHULER, B. O. Bubble formation at an orifice in a viscous liquid. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, v. 38, p. 144–154, 1960.

DEVILLE, M.; MUND, E. Chebyshev pseudospectral solution of second-order elliptic equations with finite element preconditioning. *Journal of Computational Physics*, v. 60, p. 517–533, 1985.

ESMAEELI, A.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational physics*, v. 100, p. 25–37, 1992.

ESMAEELI, A.; TRYGGVASON, G. Direct numerical simulations of bubble flows part i. low reynolds number arrays. *Journal of Fluids Mechanics*, v. 377, p. 313–345, 1998.

FEDKIEW, R.; OSHER, S. Level-set methods: An overview and some recent results. *J Comput Phys*, v. 169, p. 463, 2001.

FERZIGER, J.; PERIC, M. *Computational methods for fluid dynamics*. New York: Springer, 1996.

FIGUEIREDO, G. *Análise de Fourier e Equações Diferenciais Parciais*. Rio de Janeiro: IMPA, 2007.

GOTTLIEB, D.; ORSZAG, S. Numerical analysis of spectral methods: theory and applications. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1986.

GOTTLIEB, D.; TADMOR, E. The cfl condition for spectral approximations to hyperbolic initial-boundary value problems. *Mathematics of Computation*, v. 56, p. 565–588, 1991.

HENDERSON, R. D.; KARNIADAKIS, G. E. Unstructured spectral element methods for simulation of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, v. 122, p. 191–217, 1995.

HOU, T. Y.; LOWENGRUB, J. S.; SHELLEY, M. J. Boundary integral methods for multicomponent fluids and multiphase materials. *Journal of Computational Physics*, v. 169, p. 302–362, 2001.

IDA, M. An improved unified solver for compressible and incompressible fluids involving free surfaces: Part i. convection. *Comput Phys Commun*, v. 132, p. 44–65, 2000.

KHURANA, A.; KUMAR, R. Studies in bubble formation. *Chemical Engineering Science*, v. 24, p. 1711–1723, 1969.

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

KOPRIVA, D. A spectral multidomain method for the solution of hyperbolic systems. applied numerical mathematics. *Applied Numerical Mathematics, Amsterdam*, v. 2, p. 221–241, 1986.

LAFABURIE, B.; NARDONE, C.; SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. Modeling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics*, v. 113, p. 134–147, 1994.

LIU, C.; SHEN, J. A phase field model for the mixture of two incompressible fluids and its approximation by a fourier-spectral method. *Physica D*, v. 179, p. 211–228, 2003.

MARIANO, F. P. *Simulação de escoamentos não-periódicos utilizando as metodologias pseudo-espectral de Fourier e da fronteira imersa acopladas*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2007.

MARIANO, F. P. *Modelagem matemática de escoamentos sobre geometrias complexas utilizando o método pseudo-espectral de Fourier acoplado com o método da fronteira imersa*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2009.

MARIANO, F. P.; MOREIRA, L. Q.; SILVEIRA-NETO, A. Mathematical modeling of non-periodic flows using fourier pseudo-espectral and immersed boundary methods. In: *V European Conference on Computational Fluid Dynamics - ECCOMAS CFD*. Lisboa, Portugal: [s.n.], 2010. v. 1.

MARIANO, F. P.; MOREIRA, L. Q.; SILVEIRA-NETO, A.; SILVA, C. B. da; PEREIRA, J. C. F. A new incompressible navier-stokes solver combining fourier pseudo-spectral and immersed boundary method. *Computer Modeling in Engineering Science*, v. 59, p. 181–216, 2010.

MIRANDA, F. C. *Modelagem matemática e simulação numérica computacional de escoamentos bifásicos com a presença de surfactantes insolúvel*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2010.

MORCHOISNE, Y. Inhomogeneous ow calculations by spectral methods: mono-domain and multi-domain techniques. *CTR Annual Reserch Briefs*, p. 181–208, 1984.

MOREIRA, L. *Simulação de Grandes Escalas de escoamentos cisalhantes livres em transição e turbulentos - Relatório de Qualificação*. [S.l.], Abril 2010.

- MOREIRA, L. Q. *Simulação de grandes escalas de jatos periódicos temporais utilizando a metodologia pseudo-espectral de Fourier*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2007.
- NAGARAJAN, S.; LELE, S. K.; FERZIGER, J. H. A robust high-order compact method for large eddy simulation. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, v. 191, p. 392–419, 2003. ISSN 0021-9991.
- NAVARRA, A. Reduction of the gibbs oscillation in spectral model simulation. *Journal of Climate*, v. 7, p. 1169–1183, 1994.
- NÓS, R. L. *Simulações de escoamentos tridimensionais bifásicos empregando métodos adaptativos e modelos de campo de fase*. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, São Paulo, 2007.
- ORZAG, S. Spectral methods for problems in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, v. 37, p. 70–92, 1970.
- PATERA, A. T. A spectral element method for fluid dynamics: laminar flow in a channel expansion. *Journal of Computational Physics*, v. 54, p. 468–488, 1984.
- PEEBLES, F.; GARBER, H. Studies on the motion of gas bubbles in liquid. *Chem. Eng. Prog.*, v. 49, p. 88–97, 1953.
- PESKIN, C. Numerical analysis of blood flow in the heart. *JCP*, v. 25, p. 220, 1977.
- POPE, B. S. *Turbulent Flows*. [S.l.]: Cambridge: University Press, 2000.
- RAMAKRISHNAN, S.; KUMAR, R.; KULLOOR, N. Studies in bubble formation- i bubble formation under constant flow conditions. *Chemical Engineering Science*, v. 24, p. 731–747, 1969.
- RUDMAN, M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. *International Journal for Numerical Methods in FLuids*, v. 24, p. 671–691, 1997.
- SCARDOVELLI, S.; ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu Rev Fluid Dyn*, v. 31, p. 567–603, 1999.

SILVA, A. L. Lima e. *Desenvolvimento e Implementação de uma Nova Metodologia para Modelagem de Escoamentos sobre Geometrias Complexas: Método da Fronteira Imersa como Modelo Físico Virtual*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2002.

SILVEIRA-NETO, A. *Turbulência nos fluidos aplicada*. [S.l.]: Apostila da Disciplina de Mecânica dos Fluidos do Programa de Pós-Graduação da Universidade Federal de Uberlândia, 2002.

SOUZA, A. M. *Análise numérica da transição à turbulência em escoamentos de jatos circulares livres*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2005.

SUSSMAN, M.; SMERKA, P.; OSHER, S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J Comput Phys*, v. 114, p. 146–159, 1994.

TAKAHASHI, D. A hybrid mpi/openmp implementation of a parallel 3-d fft on smp clusters. *Proc. 6th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2005), Lecture Notes in Computer Science*, v. 3911, p. 970–977, 2006.

TREFETHEN, L. *Spectral methods in matlab*. 1. ed. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.

TRYGGVASON, G.; BUNNER, B.; ESMAEELI, A.; JURIC, D.; AL-RAWAHI, N.; TAUBER, W.; HAN, J.; NAS, S.; JAN, Y. J. A front-tracking method for computations of multiphase flow. *Journal of Computational physics*, v. 169, p. 708–759, 2001.

TRYGGVASON, G.; ESMAEELI, A.; AL-RAWAHI, N. Direct numerical simulations of flows with phase change. *Computers and Structures*, v. 83, p. 445–453, 2005.

TRYGGVASON, G.; ESMAEELI, A.; LU, J.; BISWAS, S. Direct numerical simulations of gas/liquid multiphase flows. *Fluid Dynamics Research*, v. 38, p. 660–681, 2006.

UZUN, A. *3-D Large-eddy simulation for jet aeroacoustics*. Pardue: [s.n.], 2003.

VILLAR, J. *Análise numérica fina de escoamentos multifásicos bidimensionais*. [S.l.]: Universidade Federal de Uberlândia - Tese de doutorado, 2007.

VILLAR, M. *Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2007.

VILLAR, M.; CENICEROS, H.; ROMA, A.; SILVEIRA-NETO, A. 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, p. 51–94, 2010.

VILLELA, M. F. S.; MARIANO, F. P.; VILLAR, M. M.; SILVEIRA-NETO, A. Numerical simulation of two-phase using hybrid front-tracking and fourier-spectral methods. v. 29, p. 3407–3422, 2010.

WHITE, F. *Viscous fluid flow*. [S.l.]: McGraw Hill, 1991.

YEOH, G. H.; TU, J. *Computacional techniques for multi-phase flows*. [S.l.]: USA: Butterworth-Heinemann, 2010.

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