

MODELAGEM NUMÉRICA DA CURVATURA DA INTERFACE EM ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

Karime L. Z. Glitz^{1*}, António F. C. Silva^{1†}, Clovis R. Maliska^{1‡}

1-SINMEC – Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis-SC, CEP 88040-970, Brasil, email: {*karime, †afabio, ‡maliska}@sinmec.ufsc.br

Palavras chave: VOF, Modelos de curvatura, Height Functions, CSF

Resumo

Há alguns escoamentos na natureza em que os efeitos da força devido à tensão interfacial são significativos e até predominantes. O cálculo da magnitude dessa força considera o coeficiente de tensão interfacial, o vetor normal à interface e a sua curvatura. Logo, a simulação numérica desses escoamentos multifásicos será o mais fidedigna possível quanto melhor for avaliada a curvatura da interface. Neste trabalho são avaliados três modelos de curvatura: o método Height Functions (HF) [1], a Técnica da Convolução [2] e o método Height Functions com filtro por convolução (HF-fc). Este último modelo consiste na aplicação de um filtro sob a forma de uma operação de convolução ao método HF usual. Três problemas clássicos foram empregados na avaliação desses modelos, quais sejam: a gota estática, a bolha ascendente em um fluido em repouso e a onda capilar. Observou-se que a técnica da convolução apresenta erros de primeira ordem tanto para a curvatura da interface, quanto para a magnitude das correntes espúrias no primeiro teste. Além, disso essa técnica é a mais suscetível aos efeitos dessas correntes no problema da bolha ascendente. Por sua vez, o método HF apresentou uma tendência crescente nos erros da curvatura e da velocidade quando malhas mais finas do que 80x80 volumes são empregadas no caso da gota estática. Concluiu-se que essa tendência é devida à anisotropia do campo de curvaturas, a qual é corrigida pelo método HF-fc. Esses dois últimos modelos apresentam resultados satisfatórios nos dois últimos casos-testes.

1. Introdução

Há alguns escoamentos na natureza em que os efeitos da força devido à tensão interfacial são significativos e até predominantes e diversas áreas da engenharia se deparam com uma variedade de tais escoamentos. Na indústria de petróleo, por exemplo, a tensão interfacial afeta desde a recuperação do petróleo dos reservatórios até o seu processamento primário nas unidades de produção.

A força devido a essa tensão atua apenas na interface entre os fluidos, a qual possui apenas alguns angstroms de espessura. Essa característica da interface torna a simulação numérica dos efeitos da tensão interfacial uma tarefa difícil de ser desempenhada: em escoamentos bidimensionais, a consideração desses efeitos deve se ater a apenas uma linha, enquanto que em escoamentos tridimensionais, eles deverão ser considerados ao longo de uma superfície. Porém, a discretização do domínio computacional em volumes tão pequenos não é viável.

Visando à solução deste problema, Brackbill et al. [3] desenvolveram o modelo Continuum Surface Force (CSF). Neste modelo, os efeitos da tensão interfacial são inseridos nas equações de Navier-Stokes sob a forma de uma força de corpo, que atuará numa região limitada ao redor da interface.

Uma das variáveis envolvidas na estimativa desta força é a curvatura da interface. Na literatura há diversos modelos de estimativa desse parâmetro e o presente trabalho tem como objetivo avaliar alguns desses modelos.

Neste trabalho, os seguintes modelos foram implementados para avaliação: método Height Functions (HF) [1], Técnica da Convolução [2] e o método Height Functions com filtro por convolução (HF-fc). Este último modelo consiste na aplicação da operação de convolução ao campo de curvaturas obtido pelo método HF. Este método foi empregado objetivando a redução da anisotropia no campo de curvaturas, uma vez que se observou que há relação entre essa anisotropia local e as correntes espúrias geradas pelo método HF.

Com a finalidade de comparar esses três modelos, foram realizadas simulações numéricas de três casos-testes: o caso da gota estática em equilíbrio, o caso da bolha ascendente em um fluido em repouso e o caso da onda capilar. No segundo teste algumas simulações foram executadas paralelamente em um conjunto de processadores e, portanto, foi desenvolvido um algoritmo de simulação em paralelo para a solução de escoamentos multifásicos transientes utilizando o método Volume-of-fluid (VOF) [4].

Os resultados obtidos nesses testes foram comparados entre si e também a resultados publicados na literatura.

2. Modelo Numérico

Nas simulações numéricas realizadas neste trabalho considerou-se o escoamento bidimensional transiente de dois fluidos com propriedades físicas diferentes. Ambos os fluidos são considerados incompressíveis.

Nos três casos-testes simulados, a interface entre os fluidos é bem definida. Portanto, as equações de Navier-Stokes são resolvidas para cada uma das fases e as propriedades da mistura (viscosidade e massa específica) são consideradas nessas equações quando da solução do

escoamento na região da interface. Logo, as equações governantes do escoamento são expressas por

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \nabla \cdot (f_k \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

que representa a equação da continuidade aplicada a ambos os fluidos,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2)$$

que corresponde à equação da continuidade para a mistura, e

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \\ -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] \right\} + \rho \mathbf{b} + \mathbf{F}_{sv} \end{aligned} \quad (3)$$

que é a equação da conservação da quantidade de movimento linear.

Nessas equações, f_k denota a fração volumétrica do fluido k , \mathbf{u} corresponde ao vetor velocidade $\mathbf{u} = (u, v)$, t representa o tempo e p , a pressão. Os dois últimos termos do lado direito da Eq. (3) correspondem à força de corpo e à força devido à tensão interfacial, respectivamente. A massa específica e a viscosidade dinâmica da mistura são denotadas por ρ e μ , respectivamente. Essas propriedades físicas são obtidas aplicando-se uma média ponderada pela fração volumétrica às propriedades de cada fluido. Assim, para um escoamento bifásico, tem-se

$$\rho = f_1 \rho_1 + f_2 \rho_2 \quad (4)$$

$$\mu = f_1 \mu_1 + f_2 \mu_2 \quad (5)$$

onde os subíndices indicam o fluido.

O escoamento foi resolvido aplicando-se o método dos Volumes Finitos às equações governantes. O método Pressure Implicit Momentum Explicit (PRIME) foi utilizado para tratar o problema do acoplamento pressão-velocidade [5].

2.1. Rastreamento da Interface

Uma vez que o principal objetivo deste trabalho é avaliar diferentes modelos de curvatura, a interface deve ser bem definida e sua posição deve ser determinada com precisão. Portanto, o método *Volume-of-fluid* (VOF) é empregado nas simulações [4]. Neste método, a Eq. (1) é resolvida para determinação do campo de frações volumétricas. Como essa etapa da simulação envolve a determinação dos fluxos advectivos de f através das fronteiras do volume de controle, a técnica Piecewise-Linear Interface Calculation (PLIC), que aproxima a interface por segmentos orientados de reta, é empregada [6;7]. A associação entre o método VOF e esta técnica de reconstrução fornece uma interface bem definida.

2.2. Efeitos da Tensão Interfacial

Quando o método VOF é empregado para rastrear a posição da interface, o tratamento dos efeitos da tensão interfacial se torna uma tarefa complexa, tendo em vista

que os mesmos só podem ser considerados numa região muito estreita, que corresponde à interface.

Para tratar este problema, Brackbill e colaboradores [3] desenvolveram o modelo Continuum Surface Force (CSF). Conforme mencionado anteriormente, neste modelo, a força devido à tensão interfacial é inserida nas equações de Navier-Stokes sob a forma de uma força de corpo (\mathbf{F}_{sv}), que atua numa região limitada em torno da interface. Esta força é o produto entre o coeficiente de tensão interfacial (σ), a curvatura da interface (κ), o vetor unitário normal à interface ($\hat{\mathbf{n}}$) e a função Delta de Dirac e é dada por

$$\mathbf{F}_{sv} = \sigma \kappa \hat{\mathbf{n}} \delta \quad (6)$$

Uma vez que o vetor normal à interface é definido como o gradiente da fração volumétrica, ele é determinado empregando-se uma aproximação por diferenças finitas em um estêncil com 3×3 volumes. Já a função Delta de Dirac é aproximada por $|\nabla f_i|$, restringindo os efeitos desta força aos volumes da interface.

2.3. Modelos de Curvatura

A curvatura da interface é definida por

$$\kappa = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (7)$$

Na literatura há uma variedade de trabalhos sobre a estimativa desta variável, sendo diversos modelos propostos. Três desses modelos são empregados neste trabalho e seus resultados são comparados entre si e àqueles publicados na literatura. Esses modelos são: método Height Functions (HF), Técnica da Convolução e o método Height Functions com filtro por convolução (HF-fc).

2.3.1. Método *Height Functions*

No método HF, a interface é descrita por uma função altura [1; 8] somente para propósitos de determinação da curvatura. Uma vez que a curvatura é definida pela Eq. (7), ela pode ser expressa por

$$\kappa_{i,j} = -\frac{H_{xx}}{(1+H_x^2)^{3/2}} \quad (8)$$

onde H é a função altura discreta avaliada no volume (i,j) e os subíndices indicam diferenciação.

Os valores de H são determinados tomando-se um estêncil de acordo com a direção de maior variação da fração volumétrica (direção dominante de f): se a direção dominante for a direção x , então um estêncil com 7×3 volumes deve ser tomado, caso contrário toma-se um estêncil com 3×7 volumes. A diferenciação na Eq. (8) depende desta direção dominante: se esta direção for a direção x , as derivadas em relação a y devem ser calculadas e vice-versa. A Fig. 1 mostra um exemplo de tal estêncil aplicado na estimativa da curvatura da interface no volume central.

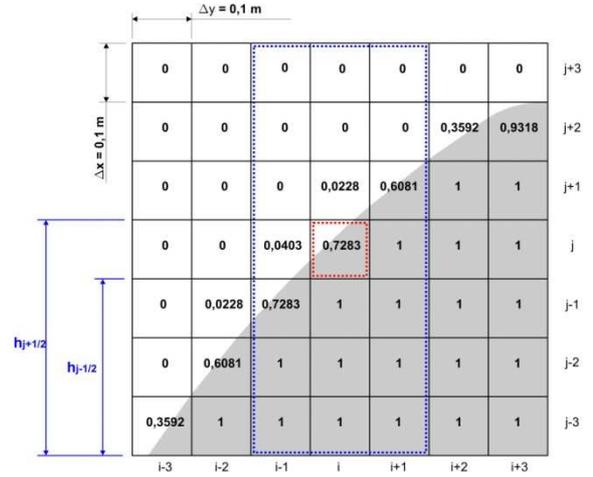


Figura 1: Exemplo de um campo de frações volumétricas (cinza = fluido 1 e branco = fluido 2).

Como no exemplo ilustrado nesta figura o gradiente da fração volumétrica é maior na direção y , foi selecionado um estêncil com 3×7 volumes e a função altura pode ser calculada por

$$H_i = \sum_{k=j-3}^{j+3} f_{i,k} \cdot \Delta y_{i,k} \quad (9)$$

onde Δy denota o incremento no espaço na direção y .

As derivadas da Eq. (8) são determinadas empregando-se uma aproximação por diferenças finitas. Logo, para o campo de frações volumétricas mostrado na Fig. 1, a curvatura da interface no volume (i,j) obtida numericamente é igual a $0,5004 \text{ m}^{-1}$, enquanto que seu valor exato é $0,5 \text{ m}^{-1}$.

Um detalhe importante acerca deste método é que H_i deve satisfazer ao seguinte critério:

$$h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2} \quad (10)$$

onde os limites $h_{j-1/2}$ e $h_{j+1/2}$ são mostrados na Fig. 1.

Se este critério não for satisfeito, $\kappa_{i,j}$ deve assumir o mesmo valor da curvatura do volume vizinho mais próximo e no qual a condição (10) é satisfeita.

Como será mostrado na seção 3, essa restrição implica uma anisotropia local no campo de curvaturas. Uma forma apropriada de tratamento desta anisotropia conduziu ao emprego do método HF-fc, como será discutido adiante.

2.3.2. Técnica da Convolução

O principal objetivo desta técnica é suavizar o campo de frações volumétricas numa região envolvendo a interface. Esse procedimento dará origem a um campo suavizado de frações volumétricas (\tilde{f}) e, portanto, numa interface difusa apenas para propósitos de cálculo da curvatura [9;10].

Neste modelo, é realizada uma operação de convolução entre o campo de frações volumétricas e um núcleo $\mathbf{K}(\mathbf{x})$, resultando no campo \tilde{f} . Como as derivadas do campo difuso de frações volumétricas podem ser determinadas aplicando-se uma convolução entre o campo de frações original e as derivadas do núcleo, o vetor unitário normal à interface pode ser determinado.

Nos dois primeiros testes realizados neste trabalho foi empregado um núcleo de sexta ordem (**K6**) como o utilizado por Francois et al. [2].

2.3.3. Método *Height Functions* com filtro por convolução (HF-fc)

Este modelo foi apresentado por Francois et al. [2] como um esquema de interpolação para a estimativa da curvatura nas faces do volume de controle a partir de seu valor no centro do volume. No presente trabalho, este modelo foi empregado visando ao tratamento da anisotropia do campo de curvaturas, a qual resulta da aplicação do método HF. Foi observado que as correntes espúrias geradas por aquele método estavam associadas a essa anisotropia local. E os efeitos dessas correntes são mais pronunciados quando malhas finas são utilizadas.

Por outro lado, como mencionado anteriormente, a anisotropia da curvatura é gerada pelo esquema empregado na determinação de κ quando a restrição imposta pela Eq. (10) não é satisfeita.

O método HF-fc consiste na aplicação de uma operação de convolução ao campo de curvaturas obtido pelo método HF e, portanto, atua como um filtro ao considerar os valores da curvatura nos volumes vizinhos no cálculo da curvatura de cada volume:

$$\kappa_{i,j} = \frac{\sum_k \mathbf{K}(\mathbf{x}'_k - \mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}'_k) \Delta \mathbf{x}'_k}{\sum_k \mathbf{K}(\mathbf{x}'_k - \mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}'_k} \quad (11)$$

para todo \mathbf{x}'_k no espaço onde o núcleo \mathbf{K} é diferente de zero.

2.4. Paralelização

Neste trabalho, a paralelização das simulações é realizada aplicando-se o método Multiblock. Segundo este método, o domínio computacional é dividido em subdomínios (denominados partições) e, a cada uma dessas partições, é associado um processador diferente. A solução do escoamento é então obtida simultaneamente em cada partição e, uma vez que o escoamento em um subdomínio depende do escoamento nos demais, há uma comunicação dos valores das variáveis u , v e p entre as partições. E esses valores atuarão como condições de contorno da partição vizinha.

Portanto, para um domínio dividido em duas partições, como mostrado na Fig. 2, os valores de u_w , v_w e p_w calculados na partição 1 são informados à partição 2 e atuam como condição de contorno de Dirichlet neste subdomínio. Por outro lado, os valores de u_e , v_e e p_e estimados pela partição 2 são comunicados à partição 1, atuando como condições de contorno neste subdomínio.

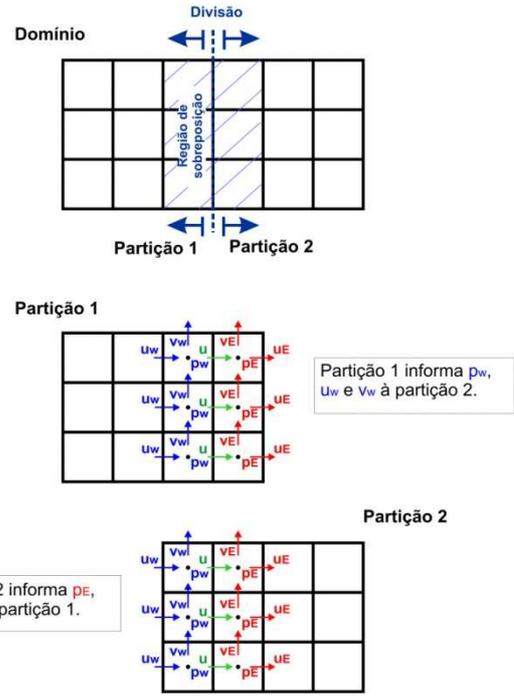


Figura 2: Exemplo de particionamento de um domínio.

Como pode ser observado nesta figura, a uma área hachurada denominada *Região de Sobreposição*, onde as condições de contorno de ambas as partições estão situadas. O tamanho desta área determina a quantidade de informação que deve ser trocada entre os subdomínios. Neste trabalho, foi empregado o menor tamanho possível para esta área, ou seja, duas linhas/colunas.

O processo de paralelização é aplicado apenas à solução dos campos de velocidades e pressões. Como não há uma redução substancial do custo computacional quando a solução do campo de frações volumétricas é paralelizada, esta etapa da simulação será realizada unicamente pelo processador mestre.

O algoritmo da solução paralelizada do escoamento bifásico empregando-se o método PRIME é ilustrado na Fig. 3 [11].

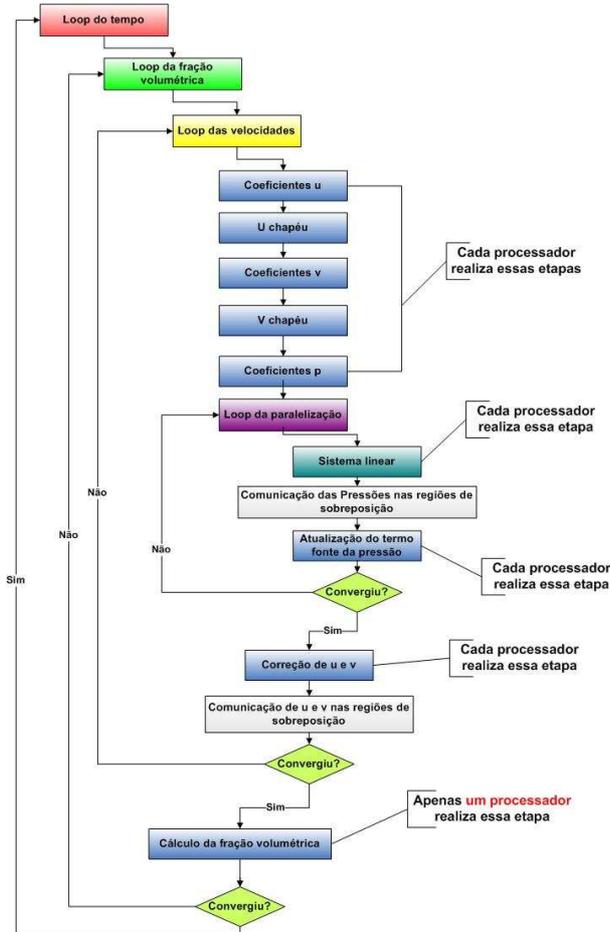


Figura 3: Algoritmo de paralelização da solução de escoamentos utilizando o método PRIME.

Todas as simulações em paralelo foram realizadas pelo supercomputador SGI Altix ICE 8200 do Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor (SINMEC) da Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC). Também empregou-se nessas simulações a biblioteca MPI [12; 13].

3. Gota Estática em Equilíbrio

Visando à avaliação dos diferentes modelos de curvatura, o caso clássico da gota estática foi simulado. Neste teste, uma gota bidimensional repousa em equilíbrio no centro de um domínio quadrado, imersa em outro fluido, como ilustrado na Fig. 4.

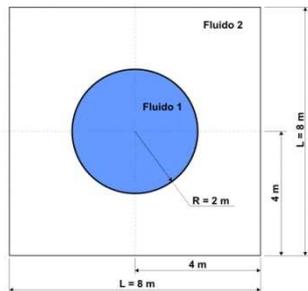


Figura 4: Gota estática em equilíbrio.

Como a aceleração da gravidade é desprezada, os efeitos da tensão interfacial são balanceados pelo gradiente de pressão. Logo, o campo de velocidades é nulo.

Malhas cartesianas uniformes, assim como um arranjo desconcentrado das variáveis, são empregados em todas as simulações.

Este teste é dividido em quatro casos. Os valores das propriedades físicas de ambos os fluidos e os parâmetros das simulações de todos estes casos são mostrados na Tabela 1.

Tabela 1: Valores dos parâmetros (gota estática)

Caso	ρ_2 (kg/m ³)	μ_1 (Pa s)	μ_2 (Pa s)
Inviscido 1	0,001	-	-
Viscoso 1	0,001	0,01	0,001
Inviscido 2	0,1	-	-
Viscoso 2	0,1	0,01	0,001

Os seguintes parâmetros são iguais em todas as simulações: $\rho_1 = 1$ kg/m³, $\sigma = 73$ N/m (resultando em um salto de pressão exato igual a 36,5 Pa), $\Delta t = 10^{-6}$ s, critério de convergência para as velocidades de 10^{-14} m/s, critério de convergência para a pressão de 10^{-12} Pa e critério de convergência para a fração volumétrica de 10^{-12} . Considerou-se condição de não-deslizamento e impermeabilidade em todas as fronteiras do domínio e um campo inicial de \mathbf{F}_{sv} . A pressão, assim como as componentes da velocidade, é nula no instante inicial. Com o objetivo de estimar a ordem dos erros das principais variáveis do escoamento, cinco diferentes tamanhos de malha foram empregados: 20x20, 40x40, 80x80, 160x160 e 320x320 volumes.

3.1. Erros

Como mencionado anteriormente, neste teste o campo de velocidades deve ser nulo. Entretanto, erros na estimativa da curvatura da interface resultam na geração de correntes espúrias. Em seu trabalho, Francois e colaboradores [2] mostram que a geração de tais correntes não é limitada ao modelo CSF e concluem que a ordem de magnitude dessas correntes depende do modelo de curvatura utilizado.

Portanto, a precisão do modelo de curvatura pode ser medida em termos da norma dos erros do campo de velocidades: quanto menor este erro, mais precisa é a avaliação da curvatura pelo modelo. Para esse propósito, serão utilizadas as normas L_2 e L_∞ , as quais, para o módulo da velocidade, são expressas por

$$L_2(\|\mathbf{u}\|) = \sqrt{\sum_{n=1}^N \|\mathbf{u}\|^2} / N \quad (12)$$

$$L_\infty(\|\mathbf{u}\|) = \max(\|\mathbf{u}\|) \quad (13)$$

onde N é o número total de volumes.

Já os valores do salto de pressão são comparados de duas formas [2]:

$$\Delta P_{total} = P_{in}^t - P_{out}^t \quad (14)$$

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

$$\Delta P_{parcial} = P_{in}^p - P_{out}^p \quad (15)$$

onde o subscripto in denota dentro da gota (tomando-se a média dos volumes com $r \leq R/2$) e out indica fora da gota

(tomando-se a média dos volumes com $r \geq 3R/2$), de forma a evitar a região de transição da fração volumétrica.

3.2. Resultados

Francois e colaboradores [2] apresentaram em seu trabalho as curvas da norma dos erros da velocidade e do salto de pressão apenas para o primeiro caso (Inviscido 1). Esses resultados são comparados àqueles obtidos neste trabalho na Fig. 5.

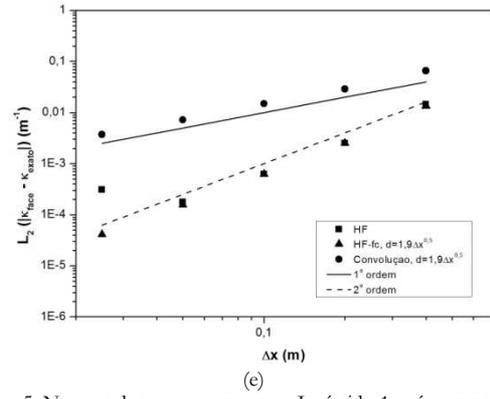
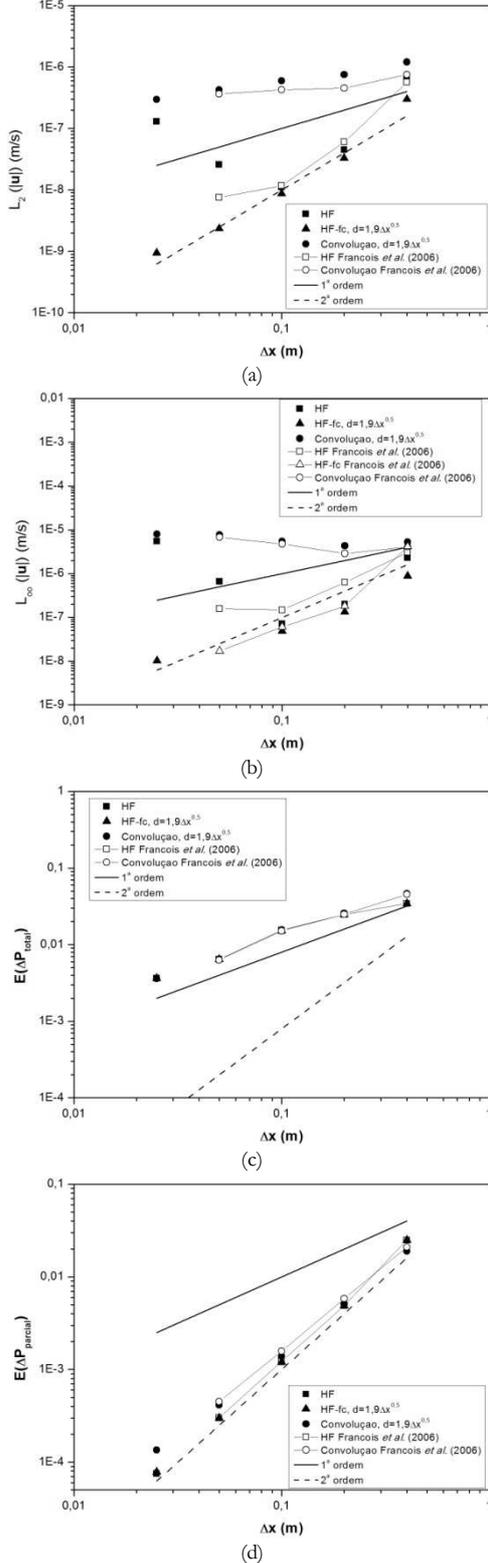


Figura 5: Normas dos erros para o caso Inviscido 1 após um passo de tempo: (a) norma L_2 e (b) norma L_∞ da velocidade, (c) Erro ΔP_{total} , (d) erro $\Delta P_{parcial}$ e (e) norma L_2 da curvatura avaliada nas faces do volume.

Nessa figura, as linhas de 1^a e de 2^a ordem são linhas de tendência dos erros.

Os valores do comprimento do núcleo e do raio do filtro empregados nas simulações são mostrados nas legendas da Fig. 5. Francoiois et al. [2] também utilizaram um comprimento de núcleo igual a $1,9(\Delta x)^{0,5}$ nas simulações empregando a técnica da convolução, onde Δx corresponde à resolução da malha. Porém, não há informações acerca do valor deste parâmetro utilizado pelo modelo HF-fc.

Como pode ser observado na Fig. 5, apesar de haver grande concordância entre os resultados obtidos neste trabalho e aqueles obtidos por Francoiois e colaboradores para ambas as formas de cálculo do salto de pressão, há diferenças significativas entre os resultados para as normas dos erros da velocidade. Essa diferença é mais expressiva quando são comparados os erros obtidos com o método HF para a malha de 160×160 volumes ($\Delta x = 0,05$ m, Fig. 5a): enquanto que os erros para esse método obtidos neste trabalho crescem quando são empregadas malhas mais finas do que 80×80 volumes, no artigo de Francoiois o erro obtido para a malha de 160×160 volumes mantém sua tendência decrescente, porém, a uma taxa menor do que as demais malhas.

Essa tendência crescente do erro do método HF para malhas finas também é observada na Fig. 5b tanto nos resultados obtidos neste trabalho, quanto naqueles obtidos por Francoiois e colaboradores. Quando uma malha de 320×320 volumes é empregada, também é verificado um crescimento da norma L_2 dos erros da curvatura, sugerindo que há alguma relação entre o erro na avaliação da curvatura da interface e a geração de correntes espúrias. A existência de tal relação é corroborada pela análise dos campos da norma da velocidade e dos erros da curvatura. Esses campos são mostrados na Fig. 6. Além disso, uma anisotropia local pode ser verificada no campo de erros da curvatura, a qual é devido à estratégia adotada quando a condição dada pela Eq. (10) não é satisfeita.

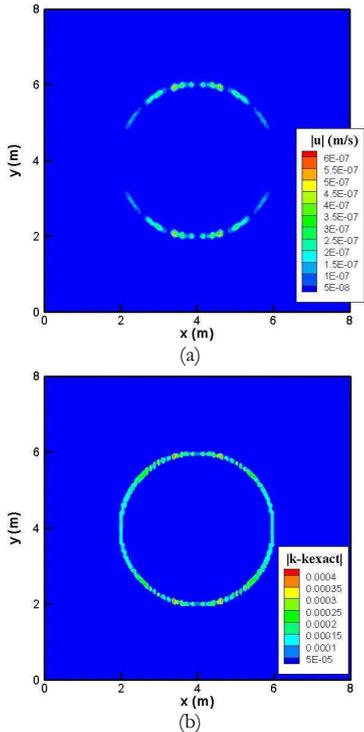


Figura 6: Campos (a) da norma da velocidade e (b) dos erros da curvatura para uma malha com 160×160 volumes após um passo de tempo empregando o método HF (caso Inviscido 1).

Os efeitos da anisotropia local na curvatura são significativamente reduzidos quando algum tipo de média – como a empregada no método HF-fc – é aplicada ao campo de curvatura, como pode ser concluído dos resultados mostrados nas Fig. 5 (a) e (b). Essa conclusão também pode ser extraída dos resultados obtidos por Francois (Fig. 5b).

Apesar de o método HF ser significativamente afetado pelas correntes espúrias, este modelo e o modelo HF-fc representam as melhores alternativas para a determinação da curvatura da interface do que a técnica da convolução, a qual resulta em erros de primeira ordem para três das quatro variáveis consideradas. Essas conclusões também podem ser extraídas dos resultados para os outros três casos listados na Tabela 1, como mostrado na Fig. 7.

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

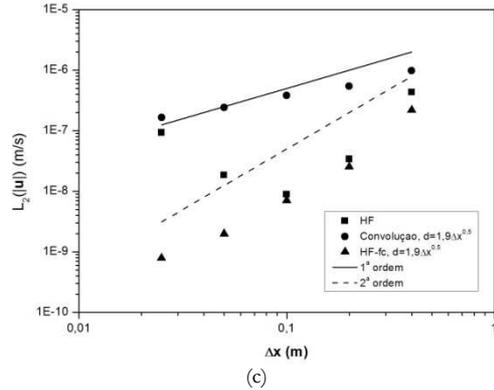
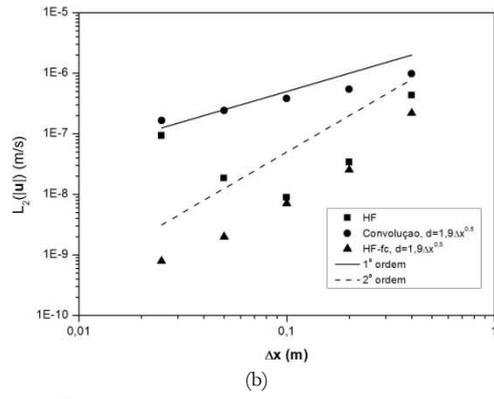
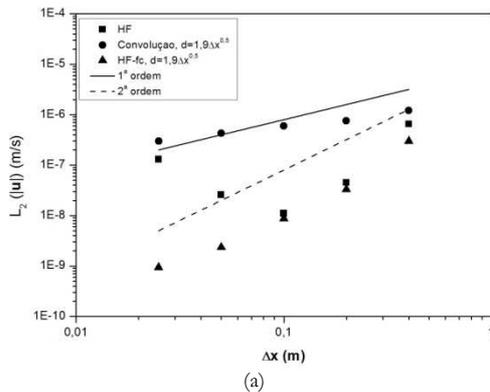


Figura 7: Norma L_2 dos erros da velocidade: Casos (a) Viscoso 1, (b) Inviscido 2 e (c) Viscoso 2.

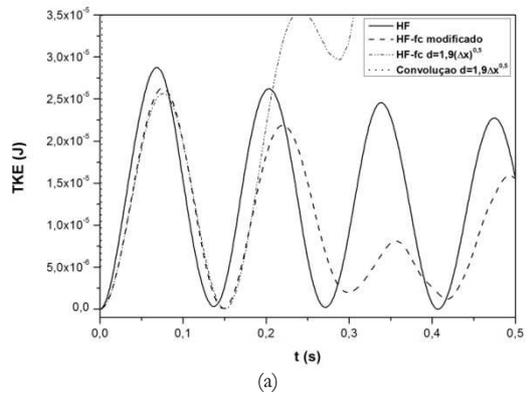
As correntes espúrias podem também ser medidas pela Energia Cinética Total (TKE) do escoamento, como mostrado por Francois et al. [2]:

$$TKE = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \rho_i V_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i \quad (16)$$

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

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

Após 500 passos de tempo, como ilustrado para os casos Inviscido 1 e Viscoso 1 na Fig. 8, as correntes espúrias são amortecidas apenas quando o método HF é empregado. Esses resultados foram obtidos utilizando-se uma malha de 40×40 volumes e Δt igual a 0,001 s.



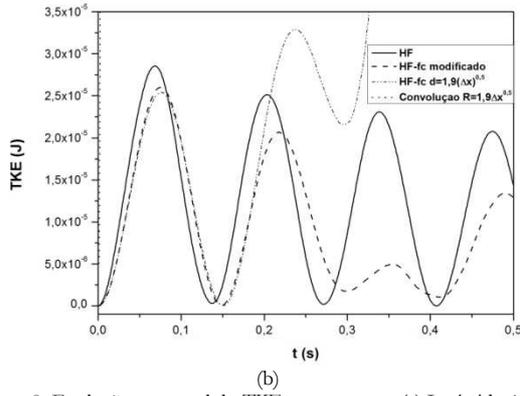


Figura 8: Evolução temporal de TKE para os casos (a) Inviscido 1 e (b) Viscoso 1 após 500 passos de tempo.

Com o decorrer do tempo, as correntes espúrias são amplificadas quando a técnica da convolução (a linha pontilhada aproximadamente vertical, próxima à origem de ambos os gráficos) e o método HF-fc são empregados. Na Fig. 8 também são mostrados os resultados obtidos com o modelo HF-fc modificado (linha tracejada), que é o método HF-fc com um núcleo cujo comprimento diminui ao longo do tempo da seguinte forma:

$$d = 1,9\sqrt{\Delta x} \exp(-2t) \quad (17)$$

Ao limitar a ação do filtro ao longo do tempo, as correntes espúrias são amortecidas e, portanto, a energia cinética total decai a uma taxa menor do que aquela obtida com o método HF. Por outro lado, o emprego de filtros temporários não foi capaz de produzir o mesmo efeito nos resultados obtidos com a técnica da Convolução.

A amplificação das correntes espúrias pela técnica da convolução tem um drástico efeito na interface da gota deformando-a significativamente, enquanto que a interface obtida utilizando-se o método HF preserva a forma original da gota [14].

Considerando todos os resultados apresentados nesta seção, conclui-se que os métodos HF e HF-fc modificado são menos suscetíveis aos efeitos nocivos das correntes espúrias que os demais modelos aqui avaliados.

4. Bolha Ascendente em um Fluido em Repouso

Este teste consiste na simulação do escoamento de uma bolha imersa em um fluido mais denso (Fig. 9). Enquanto a bolha ascende até o topo do domínio, ela se deforma. A taxa com a qual essa deformação ocorre depende da magnitude do coeficiente de tensão interfacial: quanto maior for esse parâmetro, menor será a deformação da bolha.

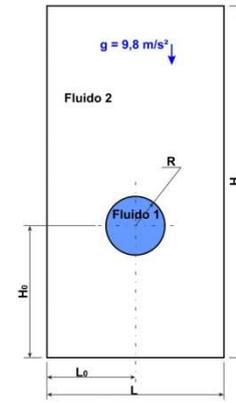


Figura 9: Bolha ascendente.

Dois casos foram simulados nesta etapa, conforme os publicados por Francois et al. [2], Ginzburg e Wittum [15] e Unverdi e Tryggvason [16], e os valores dos parâmetros empregados nas simulações são listados nas Tabela 2 e Tabela 3.

Tabela 2: Valores dos parâmetros do caso Francois.

Parâmetro	Valor
Massa específica do fluido 1 (kg/m^3)	1,226
Massa específica do fluido 2 (kg/m^3)	1000
Viscosidade do fluido 1 (Pa s)	1,137
Viscosidade do fluido 2 (Pa s)	$1,78 \times 10^{-5}$
Tensão interfacial (N/m)	728
Passo de tempo (s)	10^{-5}
Crítérios de convergência u e v (m/s)	10^{-4}
Crítério de convergência p (Pa)	1
Crítério de convergência f	10^{-5}
Malha	80x120 volumes

Dois números adimensionais envolvem todos os parâmetros que regem este escoamento: os números de Eötvös (Eo) e de Morton (M). Eles são expressos por

$$Eo = \frac{\rho_L g d^2}{\sigma} \quad (18)$$

onde d é o diâmetro da bolha, g é a aceleração da gravidade, o subscrito L indica o fluido no qual a bolha está imersa, e

$$M = \frac{g \mu_L^4}{\rho_L \sigma^3} \quad (19)$$

No caso Francois, os seguintes valores das dimensões indicadas na Fig. 9 foram utilizados: $R=1/3$ m, $L=2$ m, $L_0=1$ m, $H=3$ m e $H_0=1$ m. Logo, o número de Eötvös (Eo) do escoamento é igual a 5,98.

Já no caso Ginzburg/Unverdi, utilizaram-se os seguintes valores para esses parâmetros: $R=1,67 \times 10^{-3}$ m, $L=0,01$ m, $L_0=0,005$ m, $H=0,02$ m e $H_0=0,75 \times 10^{-2}$ m. Em ambos os casos, foi atribuída a condição de não-deslizamento e impermeabilidade a todas as fronteiras do domínio e em todas as simulações empregaram-se malhas cartesianas uniformes e arranjo desencontrado de variáveis.

Tabela 3: Valores dos parâmetros do caso Ginzburg/Unverdi.

Caso	E_0	M	μ_2/μ_1	σ (N/m)	Crit. Conv. u e v (m/s)	Malha
A	1	10^{-4}	493	0,109	10^{-6}	32×64
B	10	10^{-4}	88	0,0109	10^{-5}	64×128
C	104	0,1	85	0,00105	10^{-5}	256×512
D	104	100	479	0,00105	10^{-6}	32×64

No caso Ginzburg/Unverdi, os valores das densidades dos fluidos 1 e 2 são iguais a 25 kg/m^3 e 1000 kg/m^3 , respectivamente, enquanto que a viscosidade dinâmica do fluido 1 é igual a $1,22 \times 10^{-4} \text{ Pa s}$. Utilizou-se um passo de tempo de $5 \times 10^{-5} \text{ s}$ em todos os casos, com exceção do caso A, para o qual o passo de tempo foi de 10^{-4} s . O critério de convergência para a pressão é igual a $0,001 \text{ Pa}$, enquanto que o critério para a fração volumétrica é de 10^{-5} .

O caso C foi simulado paralelamente empregando-se oito partições, tendo cada subdomínio um tamanho de $5 \times 5 \text{ mm}$, conforme ilustrado na Fig. 10.

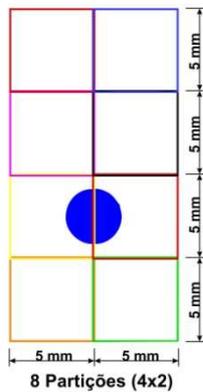


Figura 10: Particionamento do domínio para o caso C.

4.1. Caso Francois

As simulações numéricas deste caso foram realizadas até um tempo de $0,5 \text{ s}$. E, uma vez que o número de Eötvös para este caso é igual a $5,98$, os efeitos da tensão interfacial são relevantes.

A Fig. 11 ilustra a interface da bolha ao final das simulações obtida por cada um dos modelos de curvatura. A linha que define a interface nesta figura foi construída pela técnica PLIC.

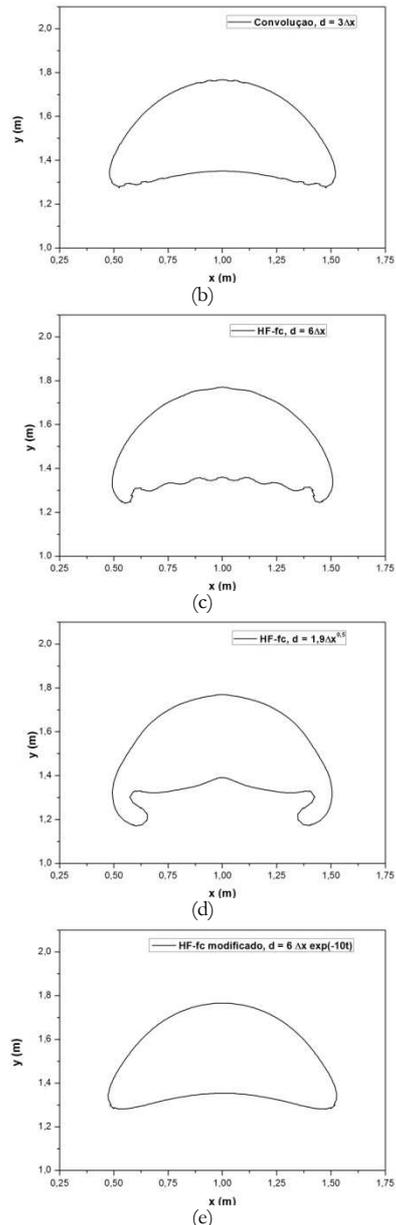
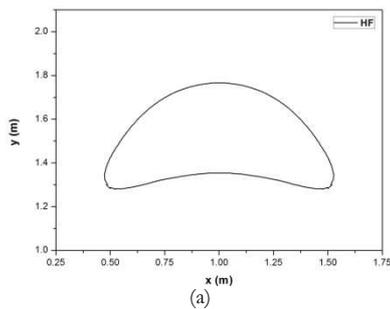


Figura 11: Interface da bolha obtida por: (a) método HF, (b) técnica da convolução ($d=3\Delta x$), (c) HF-fc ($d=6\Delta x$), (d) HF-fc ($d=1,9\Delta x^{0,5}$) e (e) HF-fc modificado ($d=6\Delta x \exp[-10t]$).

Enquanto que as interfaces obtidas pelos modelos HF e HF-fc modificado não apresentam diferenças significativas entre si e também quando comparadas aos resultados obtidos por Francois e colaboradores, os outros dois modelos exibem expressivas diferenças na forma da interface.

As ondulações mostradas nas Fig. 11 (b) e (c) parecem ser originadas pelas correntes espúrias geradas quando a técnica da convolução e o método HF-fc são empregados. Esta conclusão é corroborada pelo resultado obtido pelo modelo HF-fc modificado, o qual não apresenta ondulações na interface uma vez que o filtro atua até $0,18 \text{ s}$ da simulação.

Por outro lado, o resultado produzido pelo modelo HF-fc na Fig. 11(d) sugere que o comprimento do núcleo foi superdimensionado e, conseqüentemente, volumes que estão muito afastados daquele em que é avaliada a curvatura são considerados em seu cálculo.

4.2. Caso Ginzburg/Unverdi

Enquanto que no caso anterior o número de Eötvös era mantido constante, neste caso ele varia entre 1 e 104. A importância dos efeitos da tensão interfacial decresce com o aumento de Eo . O valor do número de Morton também foi variado nos testes realizados nesta seção. Este parâmetro é proporcional à viscosidade do fluido no qual a bolha está imersa. Seu valor variou de 10^{-4} a 100.

Juntos, esses dois números adimensionais definem o regime de escoamento da bolha: no caso A, a bolha mantém sua forma esférica após 600 passos de tempo; no caso B, ela atinge o regime elipsoidal, enquanto que nos casos C e D, a bolha adquire a forma de uma calota esférica. Nos três últimos casos, as simulações executadas por 1800 passos de tempo.

A Fig. 12 mostra a forma final da bolha obtida no presente trabalho empregando-se o método HF para cada um dos casos listados na Tabela 3. Para os casos A, B e D, também é ilustrada a interface obtida por Ginzburg e Wittum (linha vermelha tracejada). Como pode ser observado, há excelente concordância entre os resultados.

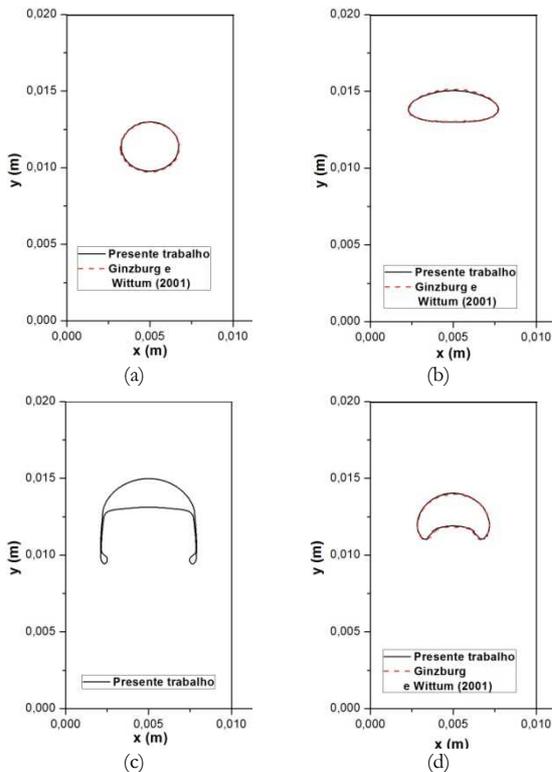


Figura 12: Interface da bolha ascendente obtida neste trabalho (linha contínua) e por Ginzburg e Wittum (linha vermelha tracejada).

A bolha do caso C desenvolve uma “saia” após alguns passos de tempo. Esta característica também pode ser observada nos resultados obtidos por Ginzburg e Wittum [15]. Infelizmente esses resultados não puderam ser reproduzidos nesta figura. Estes resultados também concordam qualitativamente com aqueles obtidos por Unverdi e Tryggvason [16].

Como pode ser observado ao se comparar as Fig. 12(c) e (d), a posição final da bolha é quase a mesma quando o número de Morton varia de 0,1 a 100, mantendo-se o valor de Eo alto e constante. Para um alto valor de Eo , o arrasto de forma é mais significativo do que o arrasto

viscoso e, portanto, o escoamento não depende mais do valor do número de Morton.

Como na comparação anterior, as linhas de corrente obtidas neste trabalho concordam com aquelas obtidas por Ginzburg e Wittum [15] e Unverdi e Tryggvason [16], sugerindo que o método HF avalia satisfatoriamente a curvatura da interface no problema da bolha ascendente, independentemente do regime de escoamento [14].

Este problema também foi simulado empregando-se os demais modelos de curvatura apresentados neste trabalho. Os resultados para os dois primeiros casos da Tabela 3 não apresentaram diferenças significativas. Entretanto, quando o caso C é simulado empregando-se a técnica da convolução, a bolha passa a exibir uma seqüência de pequenas bolhas no lugar da saia, enquanto que os resultados obtidos pelos outros modelos apresentam boa concordância com aqueles obtidos pelo método HF.

5. Onda Capilar

Nesta seção será avaliado apenas o desempenho dos modelos HF e HF-fc modificado, uma vez que nos testes anteriores a técnica da convolução obteve desempenho insatisfatório.

Este teste é constituído de um domínio quadrado ocupado por dois fluidos com propriedades físicas iguais, divididos por uma interface. Uma perturbação é então aplicada à interface. A Fig. 13 ilustra a configuração inicial deste problema para a perturbação inicial expressa por

$$y = A_0 \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \quad (20)$$

onde A_0 é a amplitude inicial da perturbação.

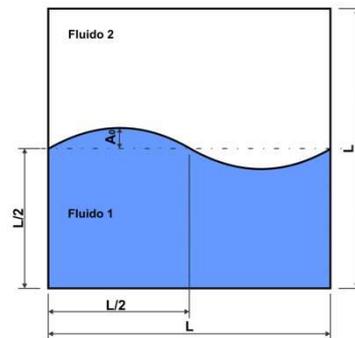


Figura 13: Configuração inicial do teste.

Esta perturbação, na ausência da aceleração da gravidade, será amortecida pelos efeitos da viscosidade e da tensão interfacial.

Em seu trabalho, Prosperetti [17] deduziu uma solução analítica para a amplitude da perturbação em função do tempo considerando as equações de Navier-Stokes linearizadas e os resultados obtidos neste trabalho serão comparados a essa solução.

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

Tabela 4: Valores dos parâmetros do problema da onda capilar.

Parâmetro	Valor
Massa específica dos fluidos (kg/m^3)	1
Viscosidade dos fluidos (Pa s)	0,011
Tensão interfacial (N/m)	0,3704

Comprimento do domínio (m)	1
Comprimento de onda da perturbação (m)	1
Amplitude inicial (m)	0,01
Frequência natural (Hz)	6,778
Número de Ohnesorge	$1/(3000)^{0,5}$
Passo de tempo (s)	10^{-5}
Crítérios de convergência u e v (m/s)	10^{-7}
Crítério de convergência p (Pa)	10^{-7}
Crítério de convergência f	10^{-7}
Tamanhos de malha	8x8, 16x16, 32x32 e 64x64 volumes.

Em todas as simulações foram utilizadas condições de contorno periódica nas fronteiras leste e oeste e condição de deslizamento e impermeabilidade nas fronteiras norte e sul. As malhas empregadas são cartesianas e uniformes, com arranjo desencontrado das variáveis.

O número de Ohnesorge presente na Tabela 4 é definido como

$$Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho\sigma L}} \quad (21)$$

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

$$E(A) = \frac{1}{A_0} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (A_{numérico} - A_{analítico})^2}{N}} \quad (22)$$

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

5.1. Resultados

A Tabela 5 mostra os valores dos erros obtidos numericamente, empregando-se os métodos HF e HF-fc modificado. Para este modelo, foi utilizado um núcleo com comprimento igual a $d=3\Delta x \exp(-10t)$. Ou seja, o efeito do filtro cessa após aproximadamente 0,11 s (2200 passos de tempo).

Tabela 5: Erro relativo da amplitude da perturbação na onda capilar para diferentes tamanhos de malha.

Malha	Modelo HF	Modelo HF-fc modificado
8x8	0,0478	0,0559
16x16	0,0214	0,0187
32x32	0,0049	0,0055
64x64	0,0046	0,0049

Como pode ser observado nesta tabela, quanto mais fina a malha, menor o erro. Porém, a taxa com que esse erro diminui também decresce com o refino da malha. Verifica-se que os dois modelos apresentam erros de mesma ordem, com o método HF apresentando erros levemente menores do que o modelo HF-fc modificado. A Fig. 14 mostra a evolução temporal do módulo da amplitude da perturbação em x igual a 0,25 m.

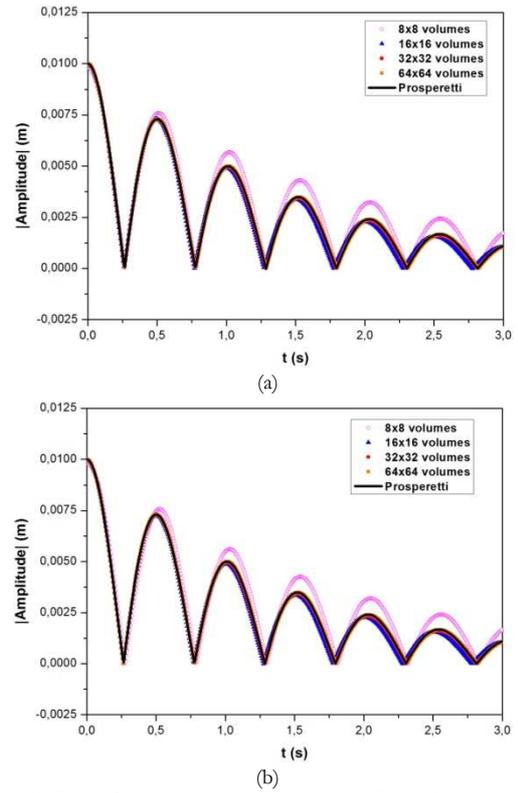


Figura 14: Evolução temporal do módulo da amplitude: (a) modelo HF e (b) modelo HF-fc modificado.

Para malhas com 8x8 volumes, os resultados com o modelo HF-fc modificado apresentaram uma maior defasagem em relação à solução analítica do que os obtidos com o método HF. Essa defasagem, em ambos os modelos, é atenuada com o refino da malha. Porém, a partir da malha com 64x64 volumes, ela volta a aumentar.

6. Conclusões

A performance de três modelos de curvatura foi avaliada neste trabalho a partir da simulação de três casos-testes: o caso da gota estática em equilíbrio, da bolha ascendente e da onda capilar.

No primeiro teste, quando a norma L_2 do erro da velocidade foi analisada, os erros obtidos pela técnica da convolução exibiram convergência de primeira ordem, enquanto que foi verificada convergência de segunda ordem para os demais modelos. Entretanto, há uma tendência crescente deste erro com o aumento da resolução da malha para os resultados do método HF. Esse foi também o comportamento apresentado pela norma L_2 da curvatura, sugerindo que os erros na estimativa da curvatura afetam diretamente a geração de correntes espúrias.

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

Essa conclusão pode ser extraída dos resultados do teste da bolha ascendente, os quais exibiram excelente concordância com aqueles publicados na literatura quando os modelos HF e HF-fc modificado foram utilizados,

enquanto que os efeitos das correntes espúrias foram mais pronunciados nos resultados obtidos pelos outros modelos (HF-fc e técnica da convolução). Também concluiu-se que os resultados dos modelos que envolvem a operação de convolução dependem fortemente do tamanho do núcleo de convolução empregado.

Já os resultados obtidos na simulação da onda capilar ratificam que os modelos HF e HF-fc modificado são capazes de estimar satisfatoriamente a curvatura da interface.

Referências

- [1] M. Malik, E. Fan, M. Bussmann, "Adaptive VOF with curvature-based refinement", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **55**:693-712, 2007.
- [2] M. Francois, S. Cummins, E. Dendy, D. Kothe, J. Sicilian, M. Williams, "A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework", *Journal of Computational Physics*, **213**:141-173, 2006.
- [3] J. Brackbill, D. Kothe, C. Zemach, "A continuum method for modeling surface tension", *Journal of Computational Physics*, **100**: 335-354, 1992.
- [4] C. W. Hirt, D. B. Nichols, "Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries", *Journal of Computational Physics*, **39**: 201-225, 1981.
- [5] C. R. Maliska, *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*, 2ª Edição. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2004.
- [6] M. Malik, M. Bussmann, "Volume Tracking on Adaptively Refined Grids with Curvature Based Refinement", *Proceedings of CSME Forum*, Londres, Grã-Bretanha, pp. 1-10, 2004.
- [7] D. B. Kothe, W. J. Rider, S. J. Mosso, J. S. Brock, J. I. Hochstein, "Volume Tracking of Interfaces Having Surface Tension in Two and Three Dimensions", *Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 34th*, Reno, 1996, AIAA 96-0859, 1996.
- [8] M. Sussman, M. Ohta, "High-order techniques for calculating surface tension forces", In: *International Series of Numerical Mathematics*, Basel, Switzerland, Vol. 154, pp. 425-434, 2006.
- [9] M. Williams, D. Kothe, E. Puckett, "Accuracy and convergence of kernel-based continuum surface tension models", Technical Report LA-UR-98-2268, Los Alamos National Laboratory, USA, 1998.
- [10] S. Cummins, M. Francois, D. Kothe, "Estimating curvature from volume fractions", *Computers and Structures*, **83**: 425-434, 2005.
- [11] K. L. Z. Glitz, A. F. C. Silva, C. N. Donatti, C. R. Maliska, "Parallel computing simulation of multiphase flows employing the VOF method", *ENCIT 2010 - 13th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, Uberlândia, Brasil, ENC10-0276, 5-10 Dezembro 2010.
- [12] ANL – Argonne National Laboratory, MPICH2. April, 3rd 2011, <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpich2>
- [13] B. Barney, "Message Passing Interface (MPI)", April, 3rd 2011, <http://computing.llnl.gov/tutorials/mpi>
- [14] K. L. Z. Glitz, A. F. C. Silva, C. R. Maliska, "Avaliação de Modelos de Estimativa da Curvatura em Simulações Numéricas de Escoamentos Multifásicos", *XXXI Iberian-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering – CILAMCE*, Buenos Aires, Argentina, 15-18 Novembro 2010.
- [15] I. Ginzburg, G. Wittum, "Two-phase flows on interface refined grids modeled with VOF, staggered finite volumes, and spline interpolants", *Journal of Computational Physics*, **166**: 302-335, 2001.
- [16] S. Unverdi, G. Tryggvason, "A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows", *Journal of Computational Physics*, **100**: 25-37, 1992.
- [17] A. Prosperetti, "Motion of two superposed viscous fluids", *Physics of Fluids*, **24**: 1217-1223, 1981.