

## AVALIAÇÃO DE MODELOS DE ESTIMATIVA DA CURVATURA EM SIMULAÇÕES NUMÉRICAS DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

**Karime L. Z. Glitz, António F. C. Silva e Clovis R. Maliska**

*Laboratório de Simulação Numérica em Mecânica dos Fluidos e Transferência de Calor - SINMEC, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC, CEP: 88040-900, Florianópolis-SC, Brasil, karime@sinmec.ufsc.br, <http://www.sinmec.ufsc.br>*

**Palavras-chave:** Tensão interfacial, Modelos de curvatura, Volume-of-fluid (VOF), Continuum Surface Force (CSF), Height Function, Técnica da Convolução.

**Resumo.** A modelagem numérica da tensão interfacial é uma tarefa bastante complexa, tendo em vista que seus efeitos deveriam ser considerados apenas em uma região de poucos angstroms de espessura (interface). A discretização numérica de um domínio em volumes finitos e a solução de um escoamento bidimensional multifásico utilizando uma técnica volumétrica de rastreamento da interface como o método *Volume of Fluid* (VOF), por exemplo, impossibilita que os efeitos dessa propriedade sejam considerados em apenas uma linha. Visando à inserção de tais efeitos nas equações de conservação da quantidade de movimento, o método *Continuum Surface Force* (CSF) foi desenvolvido. Neste método a força devido à tensão interfacial é incluída nas equações de Navier-Stokes sob a forma de uma força de corpo, que atua em uma região ao redor da interface. Um dos parâmetros envolvidos na estimativa dessa força é a curvatura da interface. O principal objetivo do presente trabalho é apresentar alguns modelos de estimativa dessa variável e avaliar os resultados obtidos por eles. Neste trabalho os seguintes modelos foram implementados: método *Height Function* (HF), técnica da Convolução, método HF com filtro por convolução (HF-fc) e método HF2, sendo este último modelo proposto pelos autores para tratar efeitos indesejáveis produzidos pelo método HF. Dois casos-testes clássicos foram utilizados na avaliação desses modelos: o caso da gota estática em equilíbrio e o caso da bolha ascendente. Os resultados obtidos nesse trabalho foram comparados a resultados da literatura. Observou-se que os erros da velocidade e da curvatura obtidos com o método HF crescem quando malhas mais finas do que 80 x 80 volumes são empregadas. Essa tendência crescente do erro é corrigida pelos métodos HF2 e HF-fc, resultando em erros de segunda ordem. Por sua vez, a técnica da convolução apresenta erros de primeira ordem para quase todas as variáveis analisadas. Para o caso da bolha ascendente, os métodos HF e HF2 reproduzem os resultados da literatura, enquanto que os demais modelos são mais suscetíveis aos efeitos das correntes espúrias.

## 1 INTRODUÇÃO

A tensão interfacial desempenha papel fundamental em várias aplicações de engenharia como, por exemplo, na ruptura de jatos e na emulsificação.

Essa propriedade dos fluidos representa a interação molecular na interface entre eles: enquanto que as moléculas no interior de um líquido estão sujeitas a forças atrativas de mesma intensidade, aquelas moléculas próximas à interface, por sua vez, experimentam uma menor força de atração das moléculas do fluido vizinho. Assim, a força resultante tende a “puxar” as moléculas da interface, reduzindo sua área superficial.

A força gerada pela tensão interfacial atua apenas na interface, que corresponde a uma região de poucos angstroms de espessura. Essa característica da interface torna complexa a modelagem dos efeitos da tensão interfacial em simulações numéricas. Isso porque a força devido a essa propriedade deve ser considerada apenas nessa linha tênue que consiste a interface. Porém, a discretização do domínio computacional em volumes de controle de tal tamanho não é viável.

Visando à solução desse problema, [Brackbill et al. \(1992\)](#) desenvolveram um modelo denominado *Continuum Surface Force* (CSF). Segundo esse modelo, os efeitos da tensão interfacial são inseridos nas equações de Navier-Stokes sob a forma de uma força de corpo, que atua numa região limitada ao redor da interface.

Uma das variáveis envolvidas no cálculo das componentes dessa 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 Function* (HF) ([Malik et al., 2007](#)), Técnica da Convolução ([Cummins et al., 2005](#)), método *Height Function* com filtro por convolução (HF-fc) e o método *Height Function* modificado (HF2). Este último método é proposto pelos autores, uma vez que foi observado que a geração de correntes espúrias pelo modelo HF está associada à anisotropia local no campo de curvaturas e a erros em sua estimativa.

Com a finalidade de comparar esses quatro modelos, foram realizadas simulações numéricas de dois casos-testes: o caso da gota estática em equilíbrio e o caso da bolha ascendente em um fluido em repouso. Os resultados obtidos nesses testes foram comparados entre si e também a resultados publicados na literatura.

## 2 MODELO NUMÉRICO

As simulações numéricas realizadas neste trabalho consideraram escoamento bifásico, bidimensional e transiente. Ambos os fluidos foram considerados incompressíveis.

Nos dois casos-testes, a interface entre os fluidos é bem definida. Portanto, as equações de Navier-Stokes (NS) são resolvidas numericamente para cada fase e as propriedades físicas da mistura (densidade e viscosidade) são consideradas quando da solução do escoamento na região da interface. Assim, as equações governantes do escoamento são expressas por

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

que corresponde à equação da continuidade aplicada a ambos os fluidos,

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

que é a equação da continuidade para a mistura e

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

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

Nessas equações  $f_k$  corresponde à fração volumétrica do fluido  $k$ , a variável  $\mathbf{u}$  indica o vetor velocidade  $\mathbf{u} = (u, v)$ ,  $t$  representa o tempo,  $p$  denota a pressão e  $\rho$  e  $\mu$  correspondem à massa específica e à viscosidade dinâmica do fluido respectivamente. Os dois últimos termos do lado direito da Eq. (3) representam as forças de corpo e à força devido à tensão interfacial, respectivamente. Já as propriedades físicas da mistura 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.

A solução numérica do escoamento é obtida empregando-se o método dos Volumes Finitos e o método PRIME (*P*ressure *I*mplicit *M*omentum *E*xplicit), que visa ao tratamento do problema do acoplamento pressão-velocidade (Maliska, 2004).

## 2.1 Rastreamento da interface

O rastreamento da interface é realizado mediante a solução da Eq. (1) para um dos fluidos. Como pode ser observado, a solução desta equação depende do emprego de algum modelo para determinar os fluxos advectivos de fração volumétrica através das fronteiras do volume de controle. Dentre os diversos modelos existentes que se propõem a estimar esses fluxos, pode-se citar os esquemas de interpolação e as técnicas de rastreamento – como o método *Volume-of-fluid* (VOF), por exemplo (Hirt e Nichols, 1981).

A principal desvantagem dos esquemas de interpolação é que o seu emprego resulta em uma interface difusa, cuja posição exata é desconhecida.

Por sua vez, o método VOF é composto de duas etapas: reconstrução e advecção da interface. E, uma vez que um esquema geométrico é empregado na etapa de reconstrução, tem-se que a interface obtida por esse método é bem-definida.

Como um dos aspectos mais desejáveis dos problemas abordados neste trabalho é

uma boa resolução da interface, ou seja, a determinação mais precisa possível de suas forma e posição, optou-se pelo emprego do método VOF associado à técnica PLIC (*Piecewise-Linear Interface Calculation*) para a reconstrução da interface (Kothe et al., 1996; Malik e Bussmann, 2004).

## 2.2 Tensão interfacial

Quando métodos volumétricos – tais como o método VOF – são empregados no rastreamento da interface, a inserção 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.

Conforme mencionado anteriormente, visando à superação desse problema, Brackbill e colaboradores desenvolveram o método CSF. Neste método, os efeitos da tensão interfacial são inseridos nas equações de Navier-Stokes sob a forma de uma força de corpo. Essa força de corpo atua apenas numa região limitada ao redor da interface, e é expressa por

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

Nesta equação,  $\sigma$  corresponde ao coeficiente de tensão interfacial,  $\kappa$  indica a curvatura da interface,  $\hat{\mathbf{n}}$  é o vetor unitário normal à interface e  $\delta$  é a função Delta de Dirac. Esses dois últimos termos são calculados a partir do campo de frações volumétricas da seguinte forma:

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\nabla f_1}{|\nabla f_1|}, \quad (7) \delta = |\nabla f_1|,$$

sendo que  $\delta$  tem como função restringir a atuação dessa força aos volumes da região da interface.

## 2.3 Modelos de curvatura

A curvatura da interface é definida como

$$\kappa = -\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (9)$$

Na literatura há diversos modelos propostos que objetivam a estimativa dessa variável. Conforme mencionado anteriormente, este trabalho avaliará quatro desses modelos, comparando os resultados obtidos com aqueles publicados na literatura. Os modelos avaliados neste trabalho são: o método *Height Function* (HF), a Técnica da Convolução, o método *Height Function* com filtro por convolução (HF-fc) e o método *Height Function* modificado (HF2).

### 2.3.1 Método HF

No método HF, a interface é aproximada por uma função altura (*Height Function*) (Malik et al., 2007; López et al., 2009). E, uma vez que a curvatura da interface é definida pela Eq. (9), tem-se que

$$\kappa_{i,j} = -\frac{H_{xx}}{(1+H_x^2)^{3/2}}, \tag{10}$$

onde  $H$  é a função altura discreta do volume  $(i,j)$  e os subíndices indicam diferenciação.

Por sua vez, a função altura é calculada a partir de um estêncil de 7x3 ou 3x7 volumes, dependendo da direção de maior variação da fração volumétrica (direção dominante): caso a direção dominante seja a direção  $x$ , então seleciona-se um estêncil de 7x3 volumes ao redor do volume  $(i,j)$ ; caso contrário, utiliza-se um estêncil de 3x7 volumes. A diferenciação da Eq. (10) também depende dessa direção dominante: se essa direção for a direção  $x$ , então tomam-se derivadas em relação a  $y$  e vice-versa.

A Figura 1 ilustra um exemplo da aplicação desse estêncil para o cálculo da curvatura da interface do volume central. Nessa figura, a direção  $y$  é a dominante e, portanto, foi tomado um estêncil de 3x7 volumes.

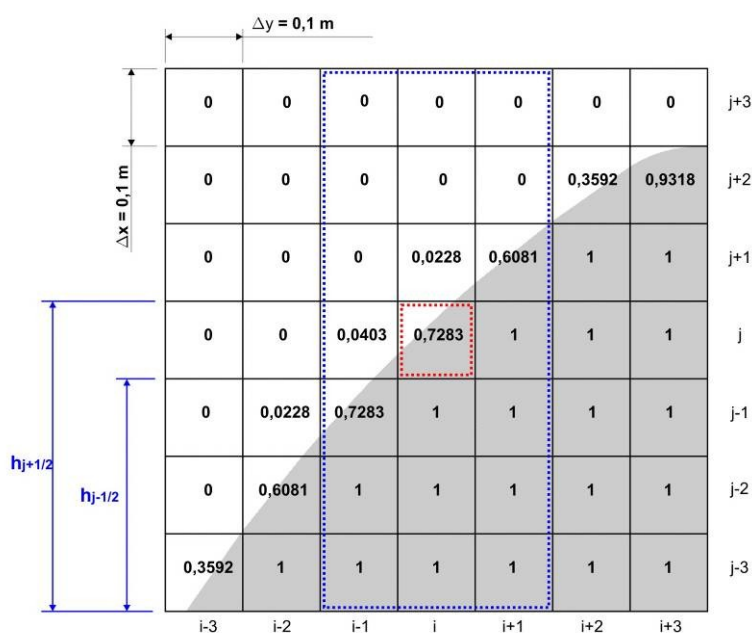


Figura 1: Exemplo de um campo de frações volumétricas (cinza = fluido 1, branco= fluido 2)

A função altura avaliada no volume  $(i,j)$ , para o caso ilustrado nessa figura, é expressa por

$$H_i = \sum_{k=j-3}^{j+3} f_{i,k} \cdot \Delta y_{i,k}, \tag{11}$$

onde  $\Delta y$  denota o incremento na direção  $y$ .

As derivadas da Eq. (10) são aproximadas por diferenças finitas.

Portanto, para a situação ilustrada na Figura 1, tem-se que a curvatura da interface no volume  $(i,j)$  obtida pelo método HF é igual a  $0,5004 \text{ m}^{-1}$ , enquanto que seu valor

exato é igual a  $0,5 \text{ m}^{-1}$ .

Uma observação importante a respeito deste método é que  $H$  deve respeitar a seguinte condição para que a curvatura seja dada pela Eq. (10):

$$h_{j-1/2} < H_i < h_{j+1/2}, \quad (12)$$

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

Se esta condição não for satisfeita,  $\kappa_{ij}$  deve assumir o mesmo valor da curvatura do volume mais próximo para o qual este critério é satisfeito.

Como será exposto adiante, a condição expressa por (12) implica um campo de curvaturas anisotrópico localmente, que está associado à geração de correntes espúrias pelo método HF. A redução dessa anisotropia conduziu ao desenvolvimento do método HF2, que será apresentado adiante.

### 2.3.2 Técnica da Convolução

O principal objetivo desta técnica é suavizar o campo de frações volumétricas na região da interface. Ela consiste em aplicar uma operação de convolução entre o campo de frações volumétricas original e um núcleo suave (*kernel*), resultando num campo suavizado de frações volumétricas ( $\tilde{f}$ ), apenas para o propósito de cálculo da curvatura da interface (Williams et al., 1998; Cummins et al., 2005). Essa operação é dada por

$$\tilde{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{K} * f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_k} f(\mathbf{x}') \mathbf{K}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}', \quad (13)$$

onde o símbolo  $*$  representa o operador convolução,  $\mathbf{K}$  é o núcleo e  $\Omega_k$  indica o espaço onde  $\mathbf{K}(\mathbf{x})$  é diferente de zero. O símbolo  $\mathbf{x}$  representa o ponto onde a curvatura está sendo avaliada e  $\mathbf{x}'$  corresponde ao ponto vizinho a  $\mathbf{x}$ .

As propriedades que esse núcleo deve possuir são listadas por Williams et al. (1998).

Uma propriedade importante da convolução é que a derivada do campo de  $\tilde{f}$  pode ser determinada aplicando-se uma convolução entre o campo de frações volumétricas original e as derivadas do núcleo. Ou seja, para a derivada em relação a  $x$  tem-se que

$$\frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{x})}{\partial x} = \frac{\partial (\mathbf{K} * f)}{\partial x}(\mathbf{x}) = \left( \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial x} * f \right)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega_k} f(\mathbf{x}') \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial x}(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) d\mathbf{x}'. \quad (14)$$

Essa propriedade possibilita a determinação do vetor normal à interface a partir do campo de  $f$ . Depois de estimar as componentes deste parâmetro, o divergente de  $\hat{\mathbf{n}}$  é aproximado por diferenças finitas.

Em ambos os testes realizados neste trabalho, foi empregado um núcleo de sexta ordem ( $\mathbf{K}_6$ ) como o utilizado por Francois et al. (2006):

$$K_6(r, d) = \begin{cases} A \left[ 1 - \left( \frac{r}{d} \right)^2 \right]^3, & \text{se } r < d \\ 0, & \text{se } r \geq d \end{cases}, \quad (15)$$

onde  $r^2 = x^2 + y^2$  e  $d$  é o comprimento do núcleo. A constante  $A$  é tomada de forma a normalizar o núcleo.

Alguns autores alertam sobre o uso indiscriminado da técnica da convolução: uma suavização exagerada de  $f$  pode resultar em uma região mais ampla do que a real, onde os efeitos da tensão interfacial serão considerados; enquanto que pouca suavização resulta em um campo de curvaturas propenso a ruídos (Kothe et al., 1996).

### 2.3.3 Método HF com filtro por convolução (HF-fc)

Este método é apresentado por Francois et al. (2006) como um esquema de interpolação para estimar a curvatura nas faces de um volume a partir de seu valor no centro. Neste trabalho, este modelo é empregado para tratar a anisotropia no campo de curvaturas obtido pelo método HF.

Este modelo 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:

$$\kappa_{i,j} = \frac{\sum_k \mathbf{K}(\mathbf{x}'_k - \mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}'_k) \Delta \mathbf{x}'_k}{\sum_k \mathbf{K}(\mathbf{x}'_k - \mathbf{x}) \Delta \mathbf{x}'_k}, \text{ para todo } \mathbf{x}'_k \in \Omega_k. \quad (16)$$

### 2.3.4 Método HF modificado (HF2)

Este último modelo é proposto pelos autores, ao se verificar que as correntes espúrias geradas pelo método HF estavam associadas à anisotropia local do campo de curvaturas e a erros na estimativa desse campo, quando malhas com alta resolução são empregadas.

Como mencionado na seção 2.3.1, a anisotropia no campo de curvaturas e os erros na sua estimativa são gerados pelo emprego do esquema de determinação de  $\kappa$  quando a condição expressa pela Eq. (12) não é satisfeita.

No método HF2, uma aproximação similar a utilizada por Ferdowsi e Bussmann (2008) é utilizada no lugar do esquema adotado no método HF. Assim, enquanto que naquele trabalho os autores aplicaram a aproximação proposta para determinar as componentes do vetor normal à interface, neste trabalho tal aproximação é empregada no cálculo da curvatura.

De acordo com essa aproximação, a curvatura nos volumes em que a Eq. (12) não é obedecida e onde  $0 < f_{ij} < 1$  é determinada a partir de uma expansão em série de Taylor em torno do centro do volume mais próximo, no qual a Eq. (12) é satisfeita.

Esse é o caso ilustrado pelo volume  $(i,j+1)$  na [Figura 1](#): nesse volume  $H_i < h_{j-1/2}$ .

Logo, neste novo método, a curvatura nesse volume pode ser aproximada por

$$\kappa_{i,j+1} = \kappa_{i,j} + \left. \frac{d\kappa}{dx} \right|_{i,j} \Delta x_t, \quad (17)$$

onde a derivada é obtida da diferenciação da Eq. (10) e do emprego de um estêncil de  $5 \times 7$  volumes para aproximar a derivada terceira de  $H$  por diferenças finitas.

O termo  $\Delta x_t$  na Eq. (17) corresponde à distância entre o centro do volume  $(i,j)$  e o ponto médio da interface no volume  $(i,j+1)$ , quando ela é aproximada por uma reta ([Figura 2](#)).

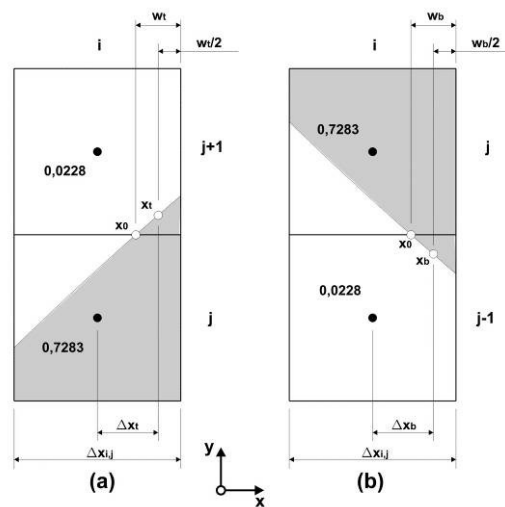


Figura 2: Exemplos de volumes em que o método HF2 pode ser aplicado.

As distâncias  $\Delta x_t$  e  $\Delta x_b$  mostradas na [Figura 2](#) são obtidas considerando-se semelhança de triângulos e são dadas por

$$\Delta x_t = \frac{1}{2(\beta+1)} \Delta x_{i,j} \quad (18)$$

$$\Delta x_b = \frac{\beta}{2(\beta+1)} \Delta x_{i,j}$$

onde, para os casos ilustrados na [Figura 2](#),

$$\beta = \begin{cases} \sqrt{\frac{0,5[1 - \text{sign}(n_y)] - f_{i,j+1}}{0,5[1 + \text{sign}(n_y)] - f_{i,j}} \frac{\Delta x_{i,j+1} \Delta y_{i,j+1}}{\Delta x_{i,j} \Delta y_{i,j}}}, & \text{se } 0 < f_{i,j+1}, f_{i,j} < 1 \\ \sqrt{\frac{0,5[1 - \text{sign}(n_y)] - f_{i,j}}{0,5[1 + \text{sign}(n_y)] - f_{i,j-1}} \frac{\Delta x_{i,j} \Delta y_{i,j}}{\Delta x_{i,j-1} \Delta y_{i,j-1}}}, & \text{se } 0 < f_{i,j-1}, f_{i,j} < 1 \end{cases}, \quad (19)$$

onde  $n_y$  é a componente vertical do vetor normal à interface avaliada no centro do



volume em que a curvatura esta sendo estimada.

Todas as equações apresentadas nesta seção correspondem ao caso em que a direção  $y$  é a direção dominante. Para o caso de  $x$  ser a direção dominante, as equações são análogas.

Após a obtenção do campo de curvaturas com a aproximação apresentada, é ainda aplicada uma média aritmética a esse campo. Nessa média, são considerados todos os volumes vizinhos que pertencem a um círculo de raio  $R_{filtro}$  centrado no volume em que se deseja obter o valor da curvatura.

### 3 GOTA ESTÁTICA EM EQUILÍBRIO

Visando à avaliação dos diferentes modelos de curvatura, simulou-se o clássico problema da gota estática em equilíbrio. Neste caso-teste uma gota bidimensional repousa no centro de um domínio quadrado, imersa em outro fluido, conforme mostrado na [Figura 3](#).

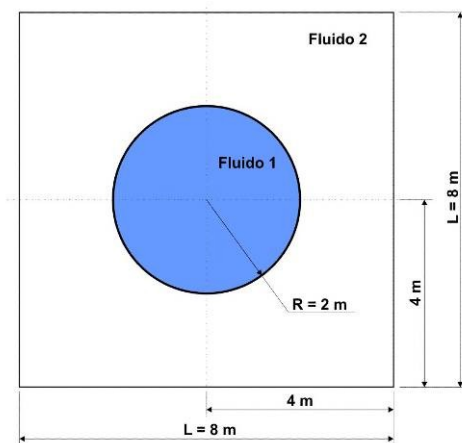


Figura 3: Gota estática em equilíbrio.

Uma vez que a aceleração da gravidade é desprezada, os efeitos da tensão interfacial são balanceados pelo gradiente de pressão, resultando na equação de Laplace:

$$\Delta p = \sigma/R, \quad (20)$$

onde  $R$  é o raio da gota. Portanto, o campo de velocidades no domínio deve ser nulo.

As simulações numéricas desse problema foram realizadas empregando-se malhas cartesianas uniformes, bem como um arranjo desencontrado de variáveis.

Esse teste foi dividido em quatro casos que diferem entre si pelos valores utilizados para as propriedades físicas dos fluidos, conforme listados na [Tabela 1](#).

Caso	Densidade do fluido 2 ( $\text{kg/m}^3$ )	Viscosidade do fluido 1 (Pa s)	Viscosidade do fluido 2 (Pa s)
------	---	--------------------------------	--------------------------------

Invíscido 1	0,001	-	-
Viscoso 1	0,001	0,01	0,001
Invíscido 2	0,1	-	-
Viscoso 2	0,1	0,01	0,001

Tabela 1: Valores das propriedades físicas para o caso da gota estática.

Os seguintes parâmetros são iguais em todas as simulações:  $\rho_1 = 1 \text{ kg/m}^3$ ,  $\sigma = 73 \text{ N/m}$  (resultando num salto de pressão exato igual a 36,5 Pa),  $\Delta t = 10^{-6} \text{ s}$ , critério de convergência para as componentes da velocidade igual a  $10^{-14} \text{ m/s}$ , critério de convergência da pressão igual a  $10^{-12} \text{ Pa}$  e critério de convergência para a fração volumétrica igual a  $10^{-12}$ .

Considerou-se condição de não-deslizamento e impermeabilidade em todas as fronteiras do domínio. No instante inicial, foram atribuídos um campo inicial diferente de zero para  $\mathbf{F}_{sv}$  e campos nulos para a pressão e para as componentes da velocidade.

Com o objetivo de se obter 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

Conforme mencionado previamente, neste teste o campo de velocidades obtido nas simulações deve ser nulo. Porém, erros na estimativa da curvatura da interface resultam em correntes espúrias. Em seu trabalho, [Francois et al. \(2006\)](#) mostram que tais correntes não são geradas apenas quando do emprego do modelo CSF e concluíram que a ordem de magnitude dessas correntes depende no modelo de curvatura utilizado.

Portanto, a precisão dos modelos de curvatura pode ser medida em termos da norma dos erros do campo de velocidades: quanto menor o erro, mais precisa é a estimativa da curvatura pelo modelo. Para esse propósito, serão utilizadas as normas  $L_2$  e  $L_\infty$  as quais, para o módulo do vetor velocidade, são definidas como

$$L_2(\|\mathbf{u}\|) = \frac{\sqrt{\sum_{n=1}^N \|\mathbf{u}\|^2}}{\sqrt{N}}, \quad (21)$$

$$L_\infty(\|\mathbf{u}\|) = \max(\|\mathbf{u}\|), \quad (22)$$

onde  $N$  é o número total de volumes.

Já para o campo de pressões são comparados os valores do salto de pressão de duas formas ([Francois et al., 2006](#)):

$$\Delta P_{total} = P_{in}^t - P_{out}^t, \quad (23)$$

onde o subscrito "in" indica dentro da gota (tomando-se a média dos volumes com  $r$

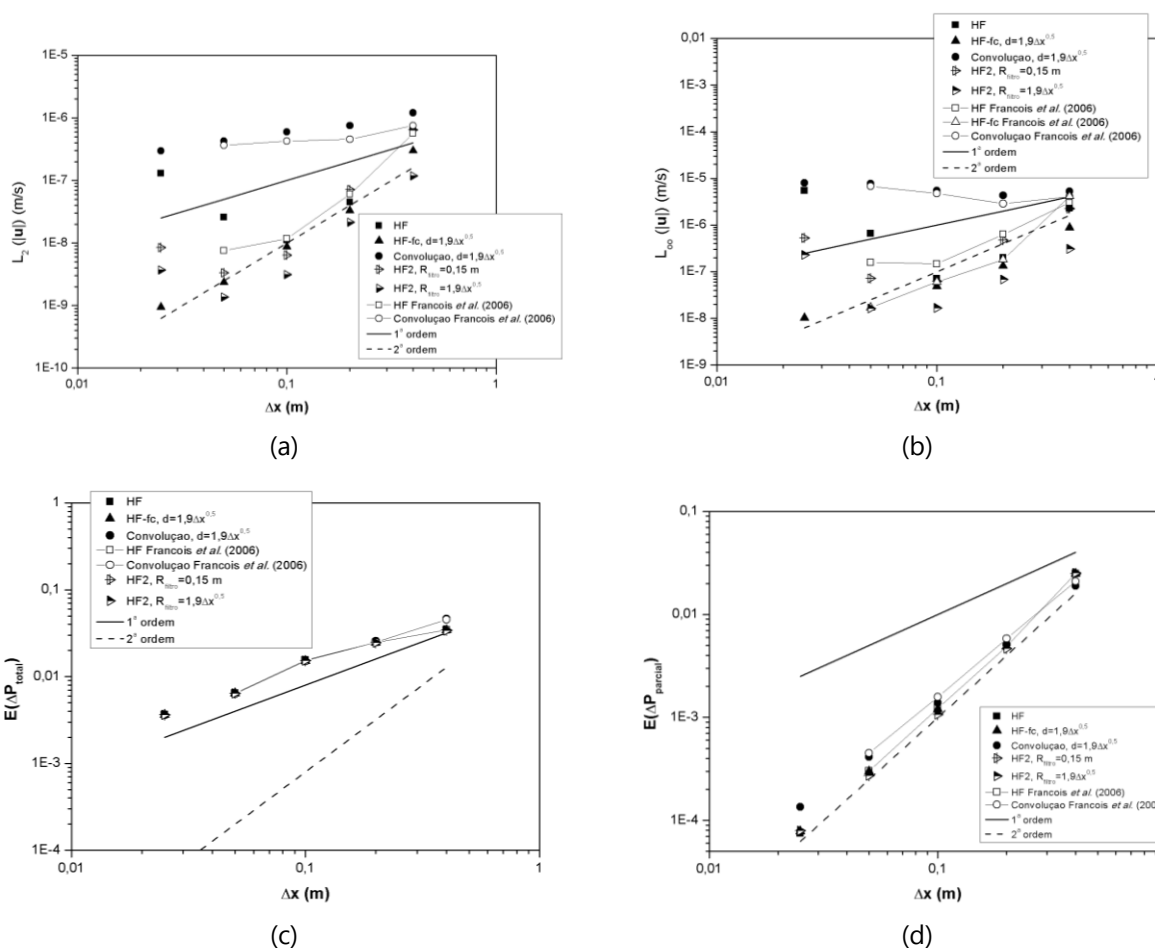
$\leq R$ ) e "out" indica fora da gota (tomando-se a média para os volumes com  $r > R$ ); e

$$\Delta P_{parcial} = P_{in}^p - P_{out}^p \quad (24)$$

onde o subscrito "in" indica dentro da gota (tomando-se a média dos volumes com  $r \leq R/2$ ) e "out" indica fora da gota (tomando-se a média para os volumes com  $r \geq 3R/2$ ) de forma a evitar a região de transição da fração volumétrica.

### 3.2 Resultados

Francois e colaboradores apresentaram em seu artigo as curvas das normas dos erros para a velocidade e para o salto na pressão apenas para o primeiro caso da Tabela 1 (Invíscido 1). Esses resultados são comparados àqueles obtidos neste trabalho na Figura 4.



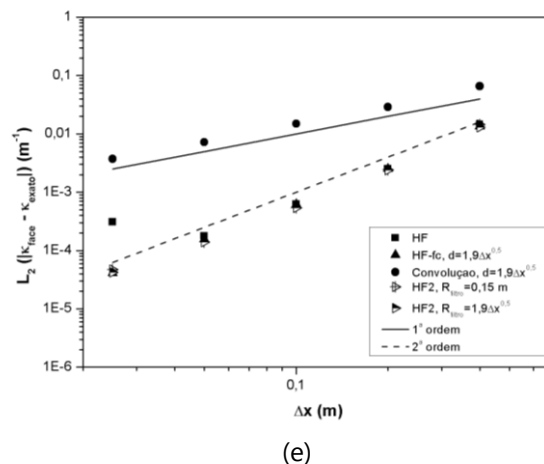


Figura 4: Normas dos erros para o caso Inviscido 1: (a) norma  $L_2$  e (b) norma  $L_\infty$  da velocidade, (c) erro  $\Delta P_{total}$ , (d) erro  $\Delta P_{parcial}$  e (e) norma  $L_2$  da curvatura avaliada nas faces dos volumes.

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

Os valores do comprimento do núcleo e de  $R_{filtro}$  empregados nas simulações são mostrados nas legendas da Figura 4. Francois et al. (2006) também utilizaram um comprimento de núcleo igual a  $1,9(\Delta x)^{0,5}$  – onde  $\Delta x$  corresponde à resolução da malha – nas simulações empregando a técnica da convolução. Porém, não há informações acerca do valor deste parâmetro utilizado pelo modelo HF-fc.

Como pode ser observado na Figura 4, apesar de haver grande concordância entre os resultados obtidos neste trabalho e aqueles obtidos por Francois 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  $160 \times 160$  volumes ( $\Delta x = 0,05$  m, Figura 4a): enquanto que os erros para esse método obtidos neste trabalho crescem quando são empregadas malhas mais finas do que  $80 \times 80$  volumes, no artigo de Francois o erro obtido para a malha de  $160 \times 160$  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 Figura 4b tanto nos resultados obtidos neste trabalho, bem como para aqueles obtidos por Francois e colaboradores. Quando uma malha de  $320 \times 320$  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 Figura 5.

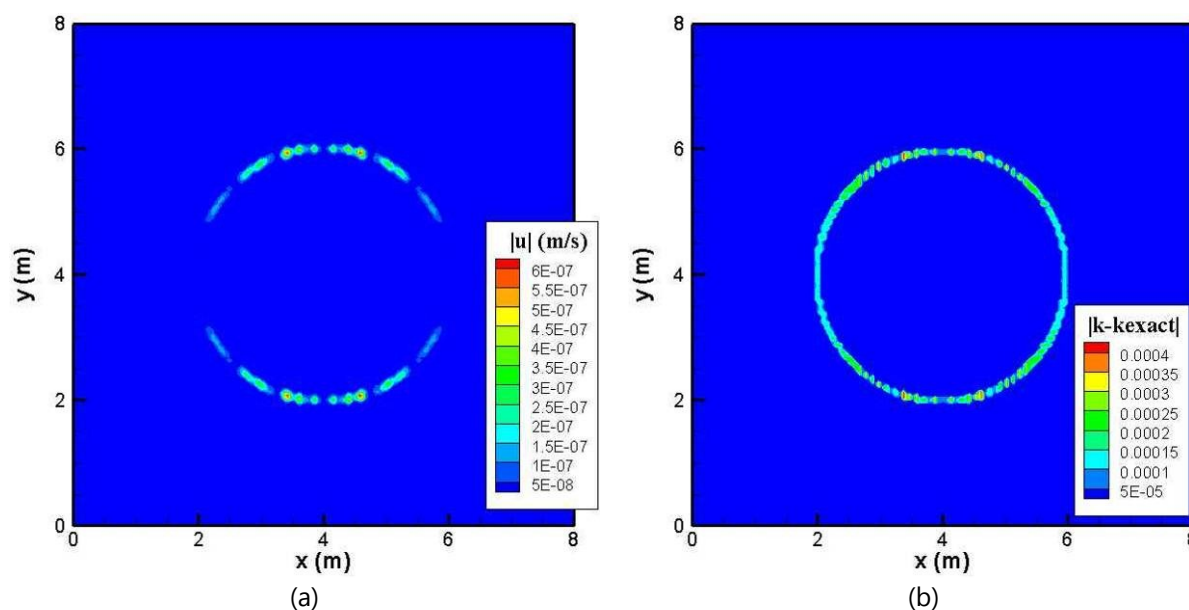


Figura 5: Campos (a) da norma da velocidade e (b) dos erros da curvatura para uma malha de 160x160 volumes empregando o método HF após um passo de tempo (caso Invíscido 1).

Como pode ser verificado nesta figura, as regiões com maiores magnitudes da velocidade correspondem àquelas onde o erro da curvatura também é maior. Além disso, pode-se observar na [Figura 5b](#) uma anisotropia local no campo dos erros da curvatura, a qual é devida à estratégia adotada quando a condição expressa pela Eq. (12) não é satisfeita.

O impacto dos erros na avaliação da curvatura é amenizado quando a aproximação implementada no método HF2 é utilizada, enquanto que os efeitos da anisotropia local na curvatura são significativamente reduzidos quando algum tipo de média – como as empregadas nos métodos HF2 e HF-fc – é aplicada ao campo de curvatura, como pode ser concluído dos resultados mostrados nas [Figura 4 \(a\) e \(b\)](#). Essa conclusão também pode ser extraída dos resultados obtidos por Francois ([Figura 4b](#)).

Outra importante conclusão a respeito do método HF2 é que, com o aumento do tamanho de  $R_{filtro}$ , as correntes espúrias diminuem. Porém, este modelo aparenta ser menos eficiente que o método HF-fc. No entanto, esses dois modelos juntamente com o método HF exibiram melhor comportamento na avaliação da curvatura do que a técnica da convolução, cujos erros de três das quatro variáveis analisadas são de primeira ordem.

Essas conclusões também podem ser extraídas dos resultados para os outros três casos da [Tabela 1 \(Figura 6\)](#).

Comparando-se os erros obtidos em cada um dos modelos para os quatro casos simulados, conclui-se que: a razão entre as viscosidades dos 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.

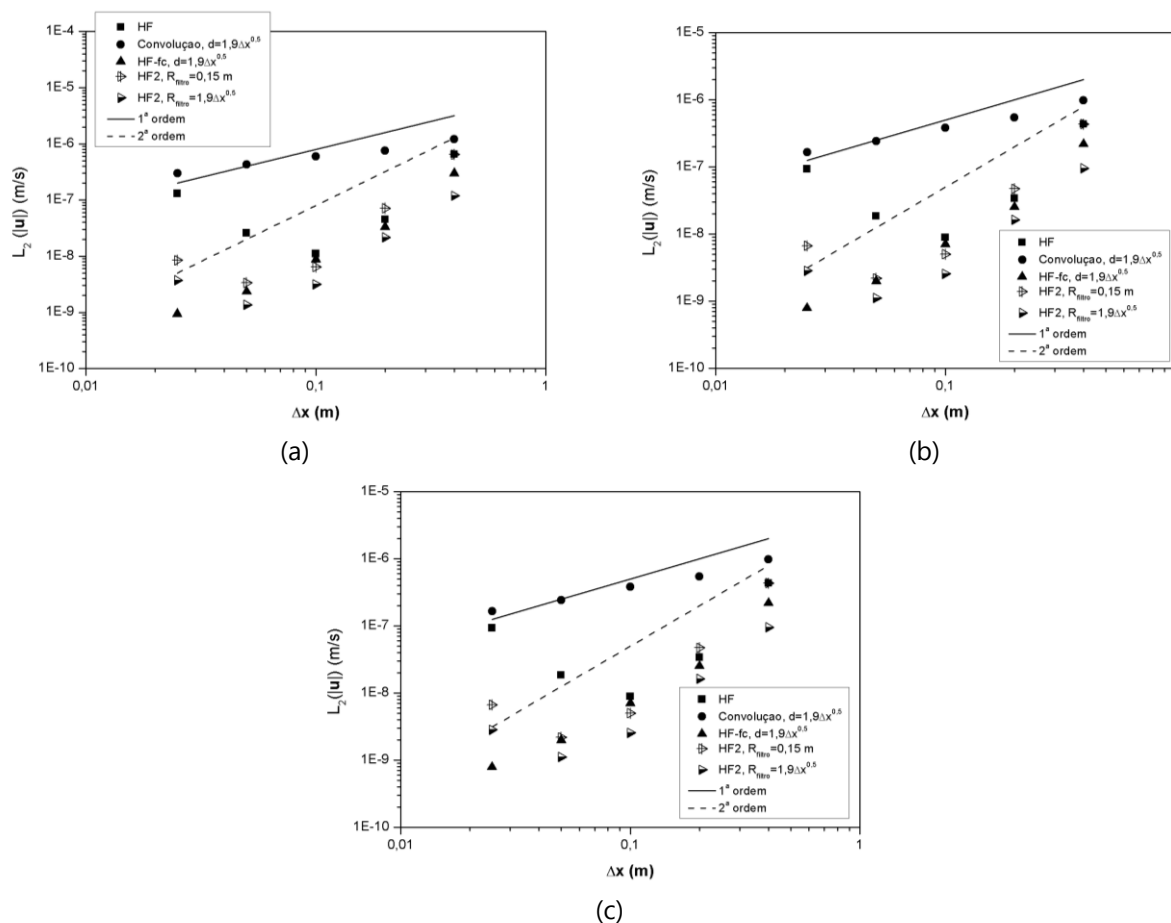


Figura 6: Norma  $L_2$  dos erros da velocidade: (a) caso Viscoso 1, (b) caso Invíscido 2 e (c) caso Viscoso 2.

As correntes espúrias também podem ser medidas em termos da energia cinética total ( $TKE$ ) do escoamento, como mostrado por [Francois et al. \(2006\)](#):

$$TKE = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \rho_i V_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i, \quad (25)$$

onde o subíndice  $i$  denota o volume em que 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 Invíscido 1 e Viscoso 1 na [Figura 7](#), as correntes espúrias são amortecidas apenas quando o método HF é empregado. Esses resultados foram obtidos utilizando-se uma malha de  $40 \times 40$  volumes e  $\Delta t$  igual a 0,001 s.

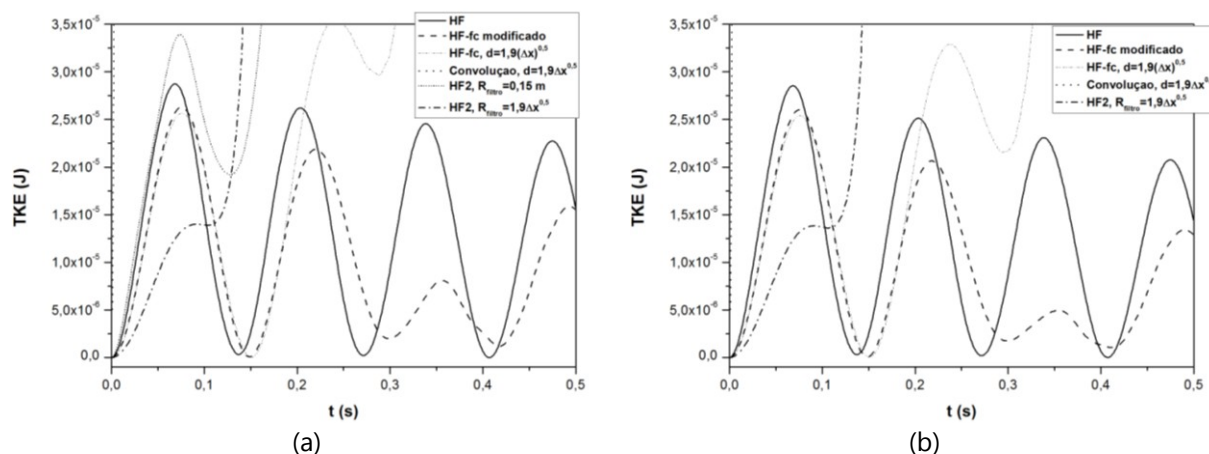


Figura 7: Evolução temporal de  $TKE$  para os casos (a) Inviscido 1 e (b) Viscoso 1 após 500 passos de tempo.

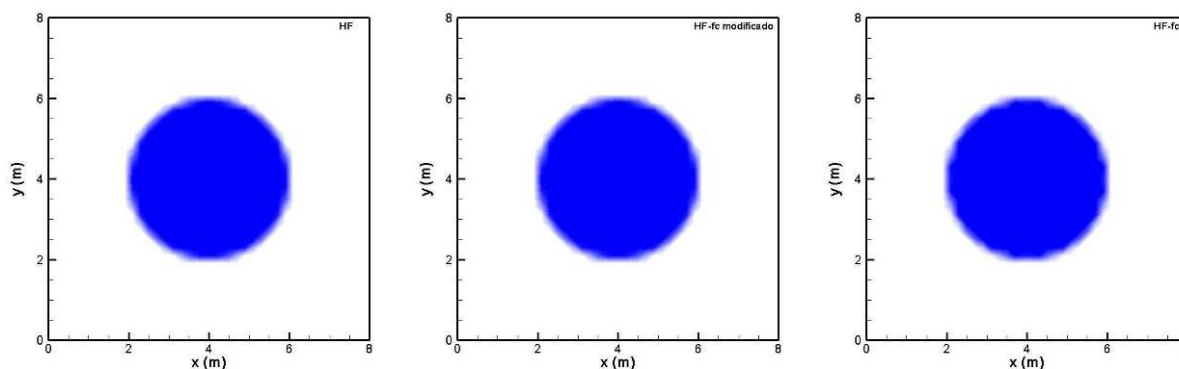
Com o decorrer do tempo, as correntes espúrias são amplificadas quando a técnica da Convolução (a linha pontilhada aproximadamente vertical, próxima à origem de ambos os gráficos) e os métodos HF-fc e HF2 são empregados. Enquanto que a energia cinética total obtida pelos dois primeiros modelos cresce indefinidamente, a energia obtida com o método HF2 cresce a uma taxa menor até se estabilizar em valores de  $TKE$  da ordem de  $10^{-2}$  J.

Na Figura 7 também é mostrado o resultado obtido 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:

$$d = (1,9\sqrt{\Delta x}) \exp(-2t). \quad (26)$$

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 e com o método HF2.

Na Figura 8 são ilustrados os campos de frações volumétricas da gota do caso Inviscido 1 após 500 passos de tempo para os mesmos modelos de curvatura da Figura 7a.



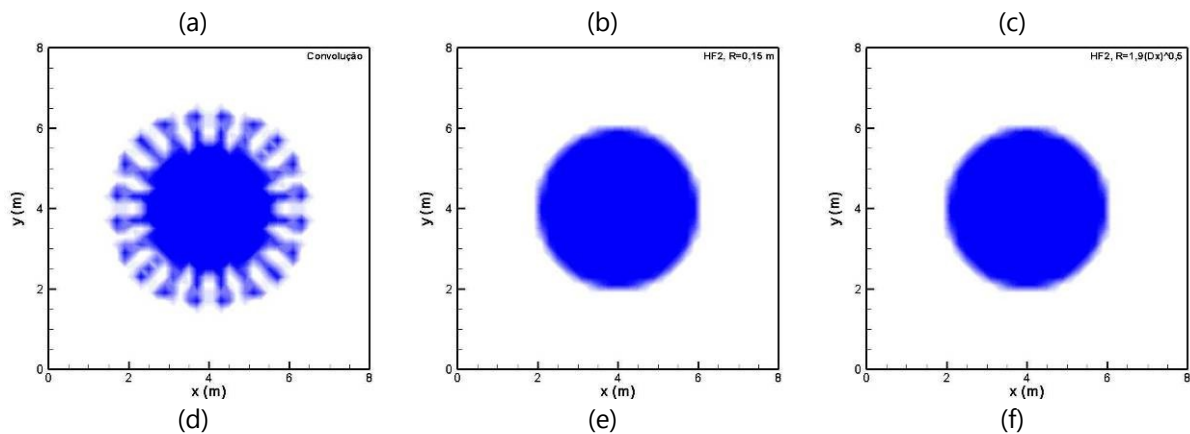


Figura 8: Campo de  $f$  após 500 passos de tempo para o caso Invíscido 1: (a) método HF, (b) HF-fc modificado, (c) HF-fc, (d) técnica da Convolução, (e) HF2 com  $R_{filtro}=0,15$  m, (f) HF2 com  $R_{filtro}=1,9\Delta x^{0,5}$ .

Como pode ser verificado nessa figura, a amplificação das correntes espúrias pela técnica da convolução tem um drástico efeito sobre a interface da gota ao longo do tempo, enquanto que nos demais modelos tais efeitos não são tão expressivos.

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.

#### 4 BOLHA ASCENDENTE

Neste teste é simulado o escoamento bidimensional de uma bolha de um fluido 1 que está imersa em um fluido 2 em repouso (Figura 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.

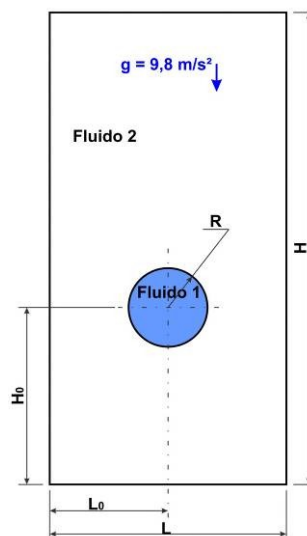


Figura 9: Bolha ascendente em um fluido em repouso.



Dois casos foram simulados nesta etapa, conforme os publicados por [Francois et al. \(2006\)](#), [Ginzburg e Wittum \(2001\)](#) e [Unverdi e Tryggvason \(1992\)](#), e os valores dos parâmetros empregados nas simulações são listados nas [Tabela 2](#) e [Tabela 3](#).

Parâmetro	Valor
Densidade do fluido 1 (kg/m <sup>3</sup> )	1,226
Densidade do fluido 2 (kg/m <sup>3</sup> )	1000
Viscosidade do fluido 1 (Pa s)	1,137
Viscosidade do fluido 2 (Pa s)	1,78E-5
Coefficiente de tensão interfacial (N/m)	728
Passo no tempo (s)	1E-5
Critério de convergência para $u$ e $v$ (m/s)	1E-4
Critério de convergência para $p$ (Pa)	1
Critério de convergência para $f$	1E-5
Tamanho da malha	80x120 volumes

Tabela 2: Valores dos parâmetros do caso Francois (bolha ascendente).

A escala de importância dos parâmetros envolvidos no escoamento de uma bolha ascendente pode ser indicada por dois números adimensionais: o número de Eötvös ( $Eo$ ) e o número de Morton ( $M$ ). Esses parâmetros adimensionais são expressos por

$$Eo = \frac{\rho_L g d^2}{\sigma}, \quad (27)$$

onde  $d$  é o diâmetro da bolha,  $g$  é a aceleração da gravidade, o subíndice  $L$  indica o fluido externo à bolha, e

$$M = \frac{g \mu_L^4}{\rho_L \sigma^3}. \quad (28)$$

No caso Francois, os seguintes valores das dimensões indicadas na [Figura 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:  $R=1,67E-3$  m,  $L=0,01$  m,  $L_0=0,005$  m,  $H=0,02$  m e  $H_0=0,75E-2$  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.

Caso	Número de Eötvös	Número de Morton	$\mu_2/\mu_1$	$\sigma$ (N/m)	$\Delta t$ (s)	Critério $u$ e $v$ (m/s)	Malha
A	1	1E-4	493	0,109	1E-4	1E-6	32x64
B	10	1E-4	88	0,0109	5E-5	1E-5	64x128

C	104	1E-1	85	0,00105	5E-5	1E-5	256x512
D	104	100	479	0,00105	5E-5	1E-6	32x64

Tabela 3: Valores dos parâmetros do caso Ginzburg/Unverdi (bolha ascendente).

No caso Ginzburg/Unverdi, os valores das densidades dos fluidos 1 e 2 são iguais a  $25 \text{ kg/m}^3$  e  $1000 \text{ kg/m}^3$ , respectivamente, enquanto que a viscosidade dinâmica do fluido 1 é igual a  $1,22\text{E-}4 \text{ Pa s}$ . Em todas as simulações foram utilizados critérios de convergência para a pressão de  $10^{-3} \text{ Pa}$  e para a fração volumétrica de  $10^{-5}$ .

#### 4.1 Caso Francois

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

A Figura 10 ilustra a interface da bolha obtida por cada modelo de curvatura no final das simulações. A linha que define a interface nesta figura foi construída pela técnica PLIC.

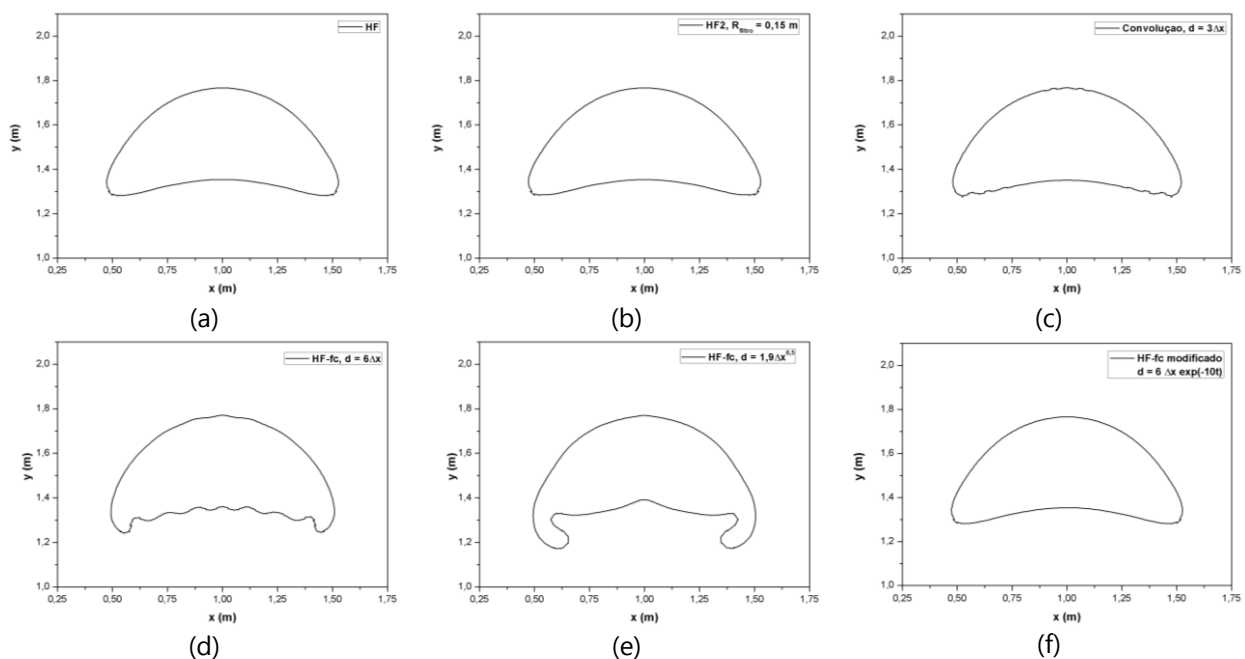


Figura 10: Interface da bolha obtida com (a) método HF, (b) HF2 ( $R_{\text{filtro}}=0,15 \text{ m}$ ), (c) técnica da Convolução ( $d=3\Delta x$ ), (d) HF-fc ( $d=6\Delta x$ ), (e) HF-fc ( $d=1,9\Delta x^{0,5}$ ) e (f) HF-fc modificado ( $d=6\Delta x \exp[-10t]$ ).

Enquanto que as interfaces obtidas pelos métodos HF, HF2 e HF-fc modificado apresentam resultados concordantes entre si e com aqueles obtidos por Francois e colaboradores, os outros dois modelos – técnica da convolução e o método HF-fc – exibem expressivas diferenças na forma da interface.

As ondulações da interface presentes nas Figura 10 (c) e (d) parecem resultar da presença de correntes espúrias. Essa conclusão é ratificada pelos resultados obtidos com o método HF-fc modificado. Neste modelo, não há a formação de ondulações

devido à restrição do tempo de atuação do filtro, que está limitada a 0,18 s iniciais da simulação, pois foi utilizado um comprimento de núcleo da forma da equação (26).

Por outro lado, a interface final obtida com o modelo HF-fc ([Figura 10e](#)) 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 valor do número de Eötvös era constante e igual a 5,98, no caso Ginzburg/Unverdi seu valor variou de 1 a 104. Quanto menor o valor deste parâmetro adimensional, maiores são os efeitos da tensão interfacial.

Outro parâmetro adimensional cujo valor foi variado nos casos simulados foi o número de Morton ( $M$ ), que é diretamente proporcional à viscosidade do fluido onde a bolha se encontra imersa. Seu valor variou de  $10^{-4}$  a 100.

Esses dois números adimensionais em conjunto 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. Nesses últimos três casos, simulou-se o problema por 1800 passos de tempo.

A [Figura 11](#) mostra a forma final da bolha obtida neste trabalho empregando-se o método HF para os quatro casos listados na [Tabela 3](#). Tanto para os casos A e B, quanto para o caso D, também é ilustrada a interface obtida por Ginzburg e Wittum (linha tracejada vermelha). Como pode ser observado, há excelente concordância entre esses resultados.

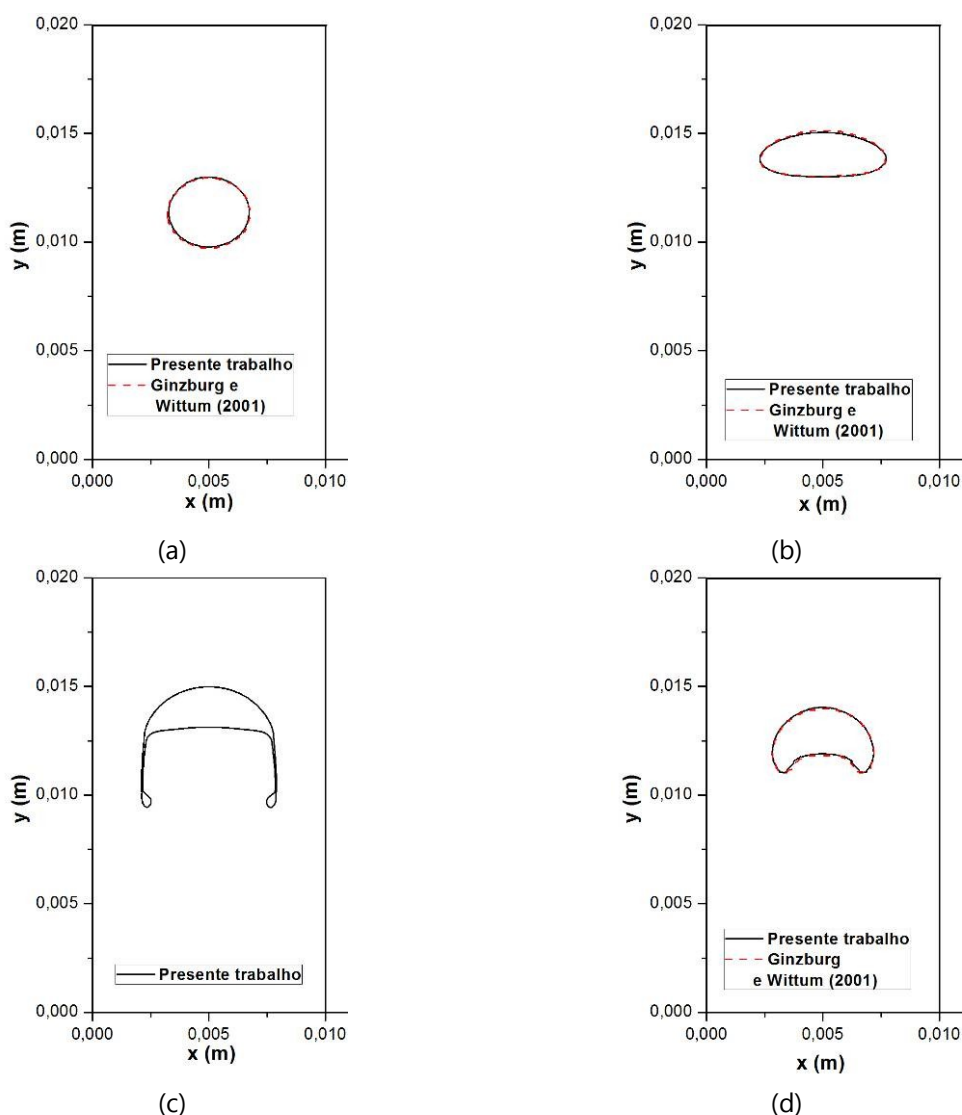


Figura 11: Interface da bolha obtida neste trabalho (linha contínua) e por Ginzburg e Wittum (linha tracejada vermelha): (a) caso A, (b) caso B, (c) caso C e (d) Caso D.

A bolha do caso C desenvolve uma "saia" após alguns passos de tempo. Essa característica pode ser observada também nos resultados obtidos por [Ginzburg e Wittum \(2001\)](#). Infelizmente, não foi possível a reprodução de tais resultados nesta figura.

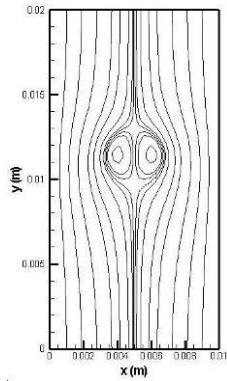
Pode-se verificar que há concordância qualitativa entre as formas das bolhas aqui apresentadas e as obtidas por [Unverdi e Tryggvason \(1992\)](#).

Como pode ser constatado ao comparar-se as [Figura 11c](#) e [Figura 11d](#), há pouca diferença entre a posição final da bolha quando o número de Morton é variado de 0,1 a 100 mantendo-se o número de Eötvös constante e com um valor alto. Isso ocorre porque, para  $Eo$  grande, o arrasto de forma é mais significativo do que o arrasto viscoso, tornando o escoamento independente do número de Morton.

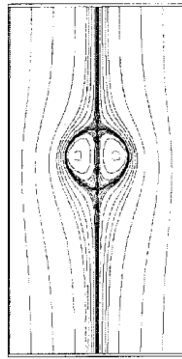
Por outro lado, para um valor constante de  $M$  e valores pequenos – porém diferentes – de  $Eo$ , espera-se que a bolha cujo escoamento possui um  $Eo$  maior

ascenda a uma altura maior (Unverdi e Tryggvason, 1992).

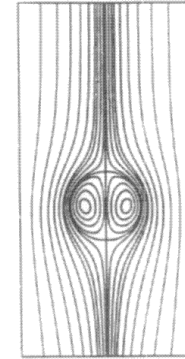
Os resultados aqui apresentados também foram validados ao comparar-se as linhas de corrente obtidas ao final da simulação àquelas publicadas na literatura, conforme ilustrado na Figura 12. Salienta-se que, para uma melhor visualização, foram excluídas algumas linhas de corrente dos resultados obtidos neste trabalho.



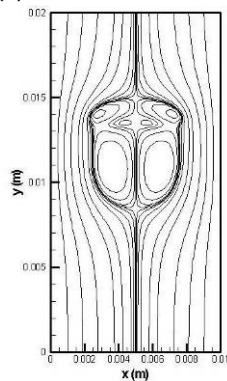
(a) Presente trabalho.



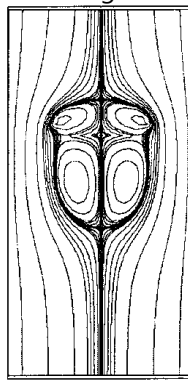
(b) Ginzburg e Wittum.



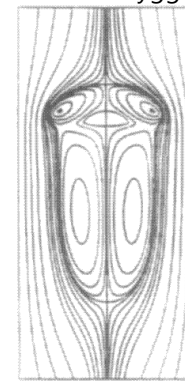
(c) Unverdi e Tryggvason.



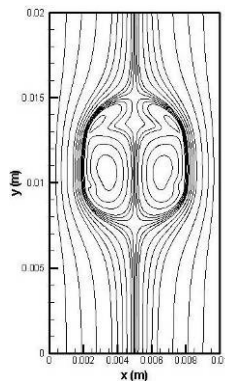
(d) Presente trabalho.



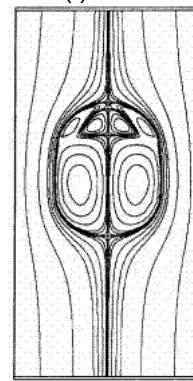
(e) Ginzburg e Wittum.



(f) Unverdi e Tryggvason.



(g) Presente trabalho.



(h) Ginzburg e Wittum.

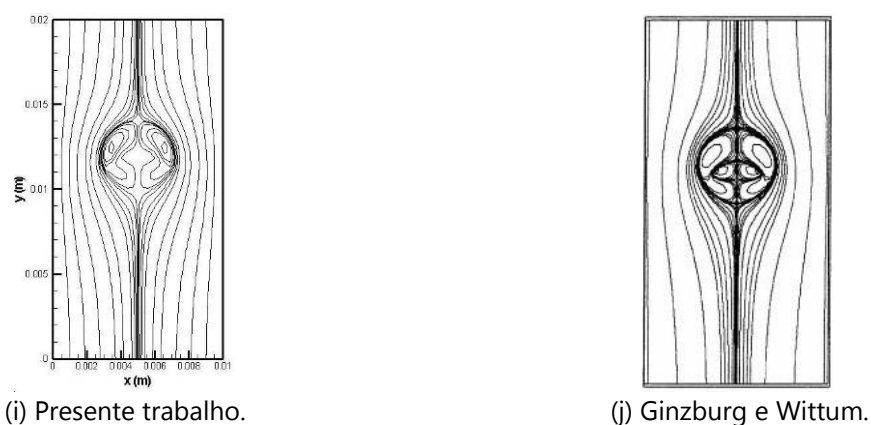


Figura 12: Linhas de corrente do caso Ginzburg/Unverdi: (a), (b) e (c) referem-se ao caso A; (d), (e) e (f) referem-se ao caso B; (g) e (h) referem-se ao caso C e (i) e (j) referem-se ao caso D.

Os resultados de Unverdi e Tryggvason ilustrados na [Figura 12](#) foram extraídos do artigo daqueles autores. Em seu artigo, Unverdi e Tryggvason não indicam as escalas nos resultados e, portanto, a comparação dos resultados obtidos neste trabalho com o deles só deve ser feita qualitativamente.

Como na comparação anterior, as linhas de corrente obtidas neste trabalho concordam com aquelas obtidas por [Ginzburg e Wittum \(2001\)](#) e [Unverdi e Tryggvason \(1992\)](#), sugerindo que o método HF avalia satisfatoriamente a curvatura da interface no problema da bolha ascendente, independentemente do regime de escoamento.

Este caso também foi simulado empregando-se os demais modelos de curvatura apresentados neste artigo, de forma a avaliar seu desempenho. Os resultados para os casos A, B e D não mostraram diferenças expressivas. Porém, para o caso C, a bolha obtida com a técnica da convolução exibiu uma seqüência de pequenas bolhas no lugar da saída, enquanto que os resultados obtidos com os outros modelos mostraram boa concordância com o método HF.

## 5 CONCLUSÕES

O desempenho de quatro modelos de curvatura, incluindo um modelo proposto pelos autores (o método HF2), foi avaliado neste trabalho ao simular dois casos-testes clássicos: o caso da gota estática em equilíbrio e o caso da bolha ascendente imersa em um fluido em repouso. O método HF2, proposto neste trabalho, difere do método HF usual por empregar uma aproximação de ordem mais alta na avaliação da curvatura da interface nos volumes que não obedecem à condição expressa por (12). Além disso, é aplicado um filtro ao campo de curvaturas, de forma a reduzir os efeitos da anisotropia local neste campo.

No teste da gota estática, as normas dos erros de três das quatro variáveis analisadas – velocidade, curvatura e  $\Delta P_{total}$  – exibiram uma tendência de primeira ordem de redução do erro com o aumento da resolução da malha quando a técnica da convolução foi empregada, enquanto que foi observada uma tendência de segunda ordem para os demais modelos. Porém, tanto a norma  $L_2$  quanto a norma  $L_\infty$

dos erros da velocidade para o método HF aumentaram quando malhas mais finas do que 80x80 volumes foram utilizadas. Esse também foi o comportamento apresentado pela norma  $L_2$  da curvatura para malhas com 320x320 volumes, sugerindo que há uma relação entre os erros na avaliação da curvatura da interface e a geração de correntes espúrias.

Essa tendência crescente do erro dessas duas variáveis é reduzida quando a curvatura dos volumes vizinhos é considerada no cálculo da curvatura do volume de interesse, ou seja, quando algum tipo de filtro é aplicado ao método HF. Essa é exatamente a ideia por trás dos métodos HF2 e HF-fc. Entretanto, foi provado que a atuação de tal filtro deve ser limitada no tempo, caso contrário as correntes espúrias serão amplificadas.

Essas conclusões também podem ser extraídas dos resultados do teste da bolha ascendente. Neste teste, uma boa concordância com os resultados publicados na literatura é atingida pelos modelos HF, HF2 e HF-fc modificado, enquanto que os efeitos das correntes espúrias são mais pronunciados nos resultados obtidos pelos outros dois modelos, resultando em ondulações na interface da bolha. Também concluiu-se que os resultados dos modelos que envolvem a operação de convolução dependem fortemente do tamanho do núcleo de convolução empregado.

## 6 AGRADECIMENTOS

A primeira autora gostaria de agradecer ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

## REFERÊNCIAS

- Brackbill, J., Kothe, D., e Zemach, C., A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100:335-354, 1992.
- Cummins, S., Francois, M., e Kothe, D., Estimating curvature from volume fractions. *Computers and Structures*, 83: 425-434, 2005.
- Ferdowsi, P., e Bussmann, M., Second-order accurate normals from height functions. *Journal of Computational Physics*, 227: 9293-9302, 2008.
- Francois, M., Cummins, S., Dendy, E., Kothe, D., Sicilian, J., e Williams, M., 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.
- Ginzburg, I., e Wittum, G., Two-phase flows on interface refined grids modeled with VOF, staggered finite volumes, and spline interpolants. *Journal of Computational Physics*, 166: 302-335, 2001.
- Hirt, C. W., e Nichols, B. D., Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39: 201-225, 1981.
- Kothe, D. B., Rider, W. J., Mosso, S. J., Brock, J. S., e Hochstein, J. I., Volume Tracking of Interfaces having Surface Tension in Two and Three Dimensions. *Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 34<sup>th</sup>, Reno: AIAA 96-0859, 1996.

- López, J., Zanzi, C., Gómez, P., Zamora, R., Faura, F., e Hernández, J., An improved height function technique for computing interface curvature from volume fractions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198: 2555-2564, 2009.
- Malik, M., e Bussmann, M., Volume Tracking on Adaptively Refined Grids with Curvature Based Refinement. *Proceedings of CSME Forum*, Londres, 1-10, 2004.
- Malik, M., Fan, E., e Bussmann, M., Adaptive VOF with curvature-based refinement. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 55: 693-712, 2007.
- Maliska, C. R., *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*, 2ª Edição. LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 2004.
- Unverdi, S., e Tryggvason, G., A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100: 25-37, 1992.
- Williams, M., Kothe, D., e Puckett, E., Accuracy and convergence of kernel-based continuum surface tension models. *Technical Report LA-UR-98-2268*, Los Alamos National Laboratory, USA, 1998.