

# SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE, DEFORMAÇÃO E CAPTURA DE INTERFACES TRIDIMENSIONAIS

**Aristeu da Silveira Neto**

**Juliano Marcelo de Arruda**

Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Engenharia Mecânica, Campus Santa Mônica, 38400-902, Uberlândia, MG, Brasil. E-mail: [jmarruda@mecanica.ufu.br](mailto:jmarruda@mecanica.ufu.br)

## Resumo

Apresenta-se parte de um projeto no qual visa-se o estudo e o desenvolvimento de uma metodologia alternativa para estudos na área de dinâmica dos fluidos, envolvendo escoamentos bifásicos e interações fluido-estrutura. Esta metodologia, denominada Método de Captura de Interface, consiste em considerar que um corpo submerso faz parte integrante de um escoamento, sendo visto pela solução das equações de conservação como uma mancha de fluido com propriedades físicas diferentes daquelas do escoamento. Neste trabalho mostra-se o desenvolvimento de um código computacional que simula o transporte de uma interface tridimensional em relação ao escoamento, via campos de velocidades artificiais impostos. Apresenta-se também o cálculo da Função Indicadora, a qual permite obter a posição da interface ao longo do tempo, e a caracterização geométrica da interface (cálculo da normal e elementos de área). Resultados do transporte de esferas com deformações para diferentes campos de velocidades artificiais impostos são apresentados.

**Palavras-chave:** Função Indicadora, Captura de Interface, Parâmetros Geométricos, Transporte de Interface.

## 1. INTRODUÇÃO

Problemas com fronteiras móveis, caracterizados pela presença de interfaces que interagem com o escoamento e demarcam regiões com propriedades físico-química diferentes, aparecem numa grande variedade de aplicações em engenharia, tais como processamento de materiais, interações fluido-estrutura e escoamentos bifásicos. Sob certas condições, influenciadas pelos parâmetros de controle, estas interfaces podem sofrer instabilidades.

A predição da dinâmica destes problemas torna-se importante, pois escoamentos sobre estruturas não rígidas, onde as instabilidades dinâmicas dos escoamentos e as deformações/oscilações das estruturas interagem, implicam em sistemas dinâmicos altamente não lineares. Já a formação de células gasosas e o crescimento de dendritas no processo de solidificação, influem na qualidade final do material processado. Os escoamentos bifásicos e multifásicos compõem um grupo muito importante de aplicações. A interação das múltiplas interfaces entre si e com o escoamento, dão origem a complexos fenômenos do tipo coalescência e fragmentação de interfaces.

A metodologia aqui apresentada permite simular numericamente o transporte de interfaces tridimensionais, realizado através da discretização do escoamento com uma malha euleriana, e da discretização da interface com uma malha lagrangeana, a qual se move por uma malha euleriana.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Diversos estudos têm sido realizados com o intuito de simular o transporte e a captura de interfaces e as conseqüências resultantes de suas presenças sobre o escoamento transportante.

Os estudos de transporte de interfaces e as conseqüências resultantes sobre o escoamento também tem sido explorados. Loewenberg & Hinch (1996) realizaram a simulação numérica de uma emulsão concentrada submetida em um fluxo cisalhante; Zinchenko *et al.* (1997) apresentaram um algoritmo do método da integral de contorno para uma interação viscosa de partículas deformáveis; Cristini *et al.* (1998), simularam a deformação e a fragmentação de partículas em escoamentos viscosos;. Almeida (1998) também simulou a deformação de partículas em emulsões diluídas

Os métodos de captura podem ser divididos em captura de volume e captura de interface ou superfície.

Os métodos de captura de volume sobrepõe problemas de topologia, dividindo o domínio em regiões de solução separadas. Estas regiões são identificadas por marcadores, usados para reconstruir a interface, e que são advectados com o escoamento. Nesta linha tem-se o método “Marker-and-Cell” (MAC) proposto por Harlow & Welch (1965) para um fluido e derivações deste como o de Daly (1969) para dois fluidos. Tem-se também o Método de Volume de Fluido (VOF), apresentado por Hirt & Nichols (1981), no qual uma função marcadora é advectada ao fluido. Ainda na linha de captura de volume tem-se o método proposto por Lee & Tzong (1991), denominado de Formulação de Entalpia, o qual é utilizado muito em problemas de mudança de fase, uma vez que nestes casos o salto de difusividade térmica existente na interface não pode ser desprezada.

A captura de interface é mais precisa porém tem um custo de maior complexidade, pois a mesma é descrita por elementos computacionais adicionais. Inicialmente discutida por Richtmyer & Morton (1967) este método teve sua primeira implementação através do trabalho de Glimm *et al.* (1988), onde uma fronteira móvel foi representada por um conjunto de pontos convectados, os quais formam um contorno interno móvel. Outras técnicas baseadas na mesma idéia foram desenvolvidas, como os trabalhos de Peskin (1977), Fauci & Peskin (1988) e Fogelson e Peskin (1988).

Peskin (1977) realizou análise numérica do escoamento de sangue no interior do coração. Por esta mesma formulação, Silveira-Neto (1997) simulou numericamente escoamentos bifásicos laminares e em transição que transportam bolhas no interior de um canal fechado, utilizando a técnica de captura de interfaces. Esta técnica foi apresentada por Unverdi e Tryggvason (1992), trabalho no qual simulam-se escoamentos multifásicos não estacionários, onde uma interface separa fluidos incompressíveis de diferentes densidades e viscosidades.

Utilizando esta mesma técnica Juric e Tryggvason (1996) simularam numericamente solidificações dendríticas bidimensionais de substâncias puras, e Yu *et al.* (1995) simularam numericamente o transporte de bolhas de cavitação em escoamentos cisalhantes. Recentemente esta técnica também foi utilizada por Mendes (1999) para a simulação numérica fina do processo de transporte de interfaces bidimensionais.

## 3. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

Os problemas de interação fluido-estrutura, escoamentos bifásicos e transporte de particulados podem ser tratados de formas semelhantes, através da consideração de uma fase contínua para o escoamento, e de uma fase dispersa, a qual é transportada pela fase contínua. A fase dispersa pode ser uma bolha (escoamento bifásico), uma partícula (transporte de particulado) ou um corpo sólido (interação fluido-estrutura). As fases contínua e dispersa são

tratadas por meio de uma formulação euleriana enquanto a interface entre elas é tratada de forma lagrangeana.

### 3.1 Formulação Matemática do Transporte das Fases Contínua e Dispersa

O transporte das fases contínua e dispersa é modelado através das equações de conservação da massa (equação 1) e da conservação da quantidade de movimento (equação 2). Considera-se escoamento incompressível, mas com densidade e viscosidade variáveis. Considera-se ainda escoamento isotérmico de um fluido newtoniano. Assim as equações são dadas por:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \left[ \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \vec{\nabla}) \vec{V} \right] = -\vec{\nabla} p + \rho \vec{g} + \vec{\nabla} \cdot \left\{ \mu (\vec{\nabla} \vec{V} + \vec{\nabla}^T \vec{V}) \right\} + \vec{F}. \quad (2)$$

### 3.2 Formulação Matemática do Transporte da Interface

A fase dispersa é aquela que é transportada pela fase contínua, e a interface a região entre as duas fases. De um ponto de vista discreto, pode-se considerar a interface que separa estas fases como um conjunto de pontos  $\vec{x}_k = x_k \vec{i} + y_k \vec{j} + z_k \vec{k}$ . As coordenadas  $(x_k, y_k, z_k)$  são definidas inicialmente. O transporte da interface é modelado de acordo com a seguinte equação lagrangeana:

$$\frac{d\vec{x}_k}{dt} = \vec{V}_k. \quad (3)$$

Esta equação é resolvida explicitamente, interpolando o campo de velocidade euleriano relativo ao tempo anterior, para a determinação da nova posição da interface no tempo atual. O campo de velocidades euleriano é determinado pela solução das equações (1) e (2). As velocidades de transporte lagrangeanas podem ser definidas com uma função delta, como segue:

$$\vec{V}_k(\vec{x}_k, t) = \int_V \vec{V}(\vec{x}, t) \delta(\vec{x} - \vec{x}_k) d\vec{x}. \quad (4)$$

Com esta definição obtém-se um campo de velocidade diferente de zero sobre a interface, em função do campo de velocidades euleriano na sua vizinhança.

### 3.3 Formulação Matemática do Cálculo dos Parâmetros Geométricos

O cálculo dos parâmetros geométricos, ou seja, a normal, a curvatura e a área do elemento cujo centróide é um dos nós discretizados da interface, torna-se necessário para o cálculo da função indicadora.

O método utilizado para a caracterização geométrica da interface foi proposto por Almeida (1998), o qual é uma variação do método desenvolvido por Zinchenko *et al.* (1997).

Neste método o vetor normal de cada nó é calculado pela somatória dos vetores normais aos elementos triangulares formados pelo nó  $i$ , ponderada pelo inverso das áreas destes elementos, como mostra a equação (5):

$$\mathbf{n}_i = \sum_{el} A_{el}^{-1} \mathbf{n}_{el} / \left| \sum_{el} A_{el}^{-1} \mathbf{n}_{el} \right|, \quad (5)$$

onde  $\mathbf{n}_i$  é o vetor normal ao nó  $i$ ,  $A_{el}$  é a área do elemento  $el$  e  $\mathbf{n}_{el}$  é vetor normal ao elemento  $el$ , sendo o somatório efetuado em todos os elementos nos quais o nó  $i$  está contido. A área do elemento  $el$  é a área formada pelo nó  $i$  e por dois de seus nós adjacentes. Uma vez que cada nó tem um certa quantidade de nós adjacentes, tem-se então a mesma quantidade de elementos de área triangulares. É importante lembrar que estas áreas calculadas aqui são somente para o cálculo do vetor normal, dado pela equação (5), não devendo confundi-la com o elemento de área que entrará no cálculo da função indicadora, como será visto no próximo item. Faz-se pois necessário calcular a área do elemento cujo centróide é o nó em questão. A curvatura pode ser obtida através do ajuste do parabolóide pelo método dos mínimos quadrados. O cálculo da curvatura torna-se necessário na avaliação da força interfacial, uma vez que ela é um dos parâmetros deste cálculo.

### 3.4 Formulação Matemática do Transporte da Função Indicadora

A função indicadora é utilizada com duas finalidades básicas: acompanhar o movimento e a geometria da interface ao longo do tempo. Esta função assume valores entre zero e um, sendo zero fora da interface e um dentro da mesma. O uso da mesma é feito para interpolar as propriedades físicas como a densidade e a viscosidade. De forma intuitiva deve-se buscar o cálculo desta função de forma que o resultado dependa diretamente de um parâmetro geométrico ligado à interface, por exemplo, a normal. Assim, define-se o gradiente da função indicadora como sendo

$$\vec{\nabla} I = \vec{G} = \sum_k D_{ijl} (\bar{x} - \bar{x}_k) \vec{n}(\bar{x}_k) \Delta S(\bar{x}_k). \quad (6)$$

Tem-se, na equação vetorial acima, três componentes, o que dificulta a solução e determinação de  $I(\bar{x}, t)$ . Aplicando-se o operador divergente em ambos os lados desta equação, tem-se:

$$\nabla^2 I(\bar{x}, t) = \vec{\nabla} \cdot \vec{G}(\bar{x}, t). \quad (7)$$

A solução desta equação tem duas vantagens: trata-se de uma equação escalar e o operador de Laplace conduz a uma solução bem comportada, mesmo que o termo fonte seja instável.

## 4. RESULTADOS

Neste item são apresentados os resultados obtidos com a metodologia de transporte de interfaces, representadas por uma malha lagrangeana. O transporte foi realizado com a interpolação das velocidades dos pontos eulerianos para os pontos lagrangeanos através da função distribuição. Foram utilizados diferentes campos de velocidades. Observa-se ainda que não foi objetivo deste trabalho o transporte das interfaces com campos de velocidades fornecidos pela solução das equações de Navier-Stokes. Os campos aqui utilizados foram gerados e impostos de forma ad-hoc, com os quais transportam-se as interfaces. Dois campos diferentes foram utilizados com o objetivo de testar as subrotinas de geração de malha, interpolação de velocidades, transporte da interface e cálculo da função indicadora. Não foi objetivo neste trabalho a remalhagem da interface, embora para os casos em que a mesma tem

uma intensa deformação, como nos escoamentos bifasicos, este processo se torne necessário (como pode ser visualizado na figura 5).

#### 4.1. Transporte da fase Dispersa

##### 4.1.1 – Campo de Velocidade Parabólico

Aqui a componente horizontal de velocidade é função de duas ordenadas,  $y$  e  $z$ . O transporte da interface por este campo de velocidades pode ser observado na figura 1, sendo a sua equação governante dada pela equação 8:

$$u(y, z) = -(100,0/3,0) \times (y^2 + z^2) + 20,0(y + z) \quad (8)$$

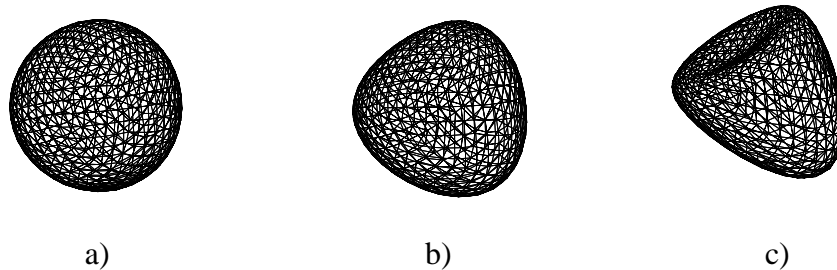


Figura 1 – Transporte de uma interface esférica por um campo de velocidades parabólico nos tempos: a) 0.0seg, b) 0.71 seg e c) 1.51 seg.

##### 4.1.2 – Campo de Velocidade Cisalhante

Novamente aqui, o campo de velocidades foi gerado na malha euleriana, tendo sido interpolado para os pontos lagrangeanos. Neste caso a componente horizontal da velocidade é função somente da direção  $z$ .

O transporte da interface através do campo de velocidades utilizado neste caso pode ser visto a seguir na figura 2. Ele obedece à seguinte condição:

$$u(z) = +1,0 \quad \text{se} \quad z < z_c \quad \text{ou}$$

$$u(z) = -1,0 \quad \text{se} \quad z \geq z_c,$$

onde  $z_c$  é ordenada em  $z$  do centro da esfera representada pela malha lagrangeana.

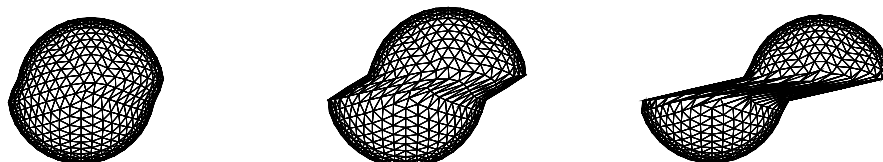


Figura 2 – Transporte de uma interface esférica por um campo de velocidades cisalhantes com um choque de velocidades:  $u_s = 1,0$  m/s e  $u_f = -1,0$  m/s.

## 4.2. Função Indicadora

A seguir apresenta-se a captura de uma interface tridimensional, com o seu transporte e deformação, via função indicadora.

### 4.2.1. Visualização da Função Indicadora

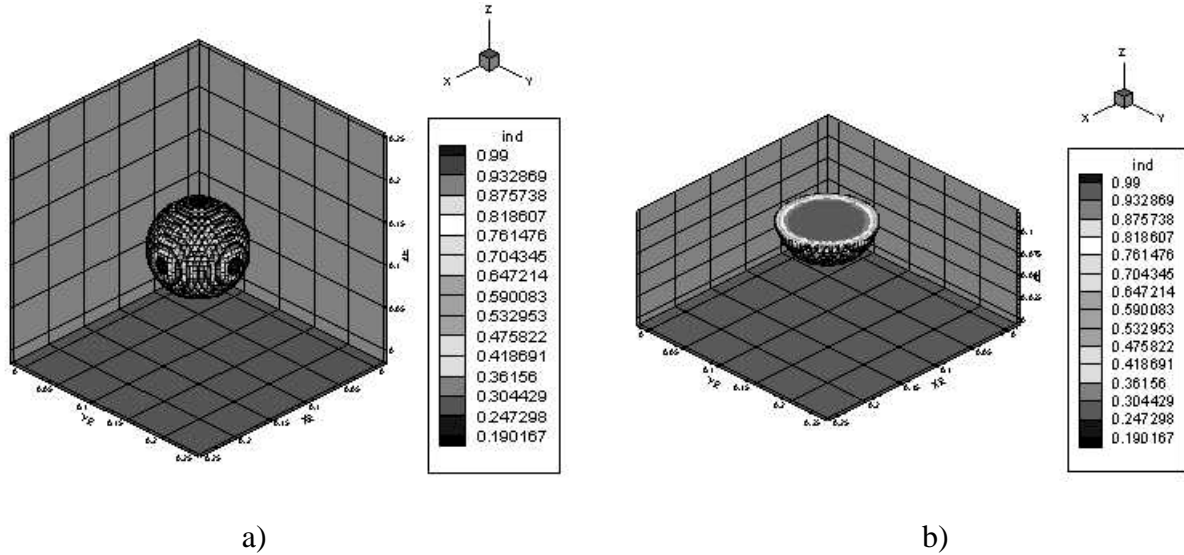


Figura 3 – Captura de uma interface esférica via função indicadora; raio da esfera igual a 25% do tamanho do domínio: a) esfera; b) corte hemisférico.

### 4.2.2. Campo de Velocidade Parabólico

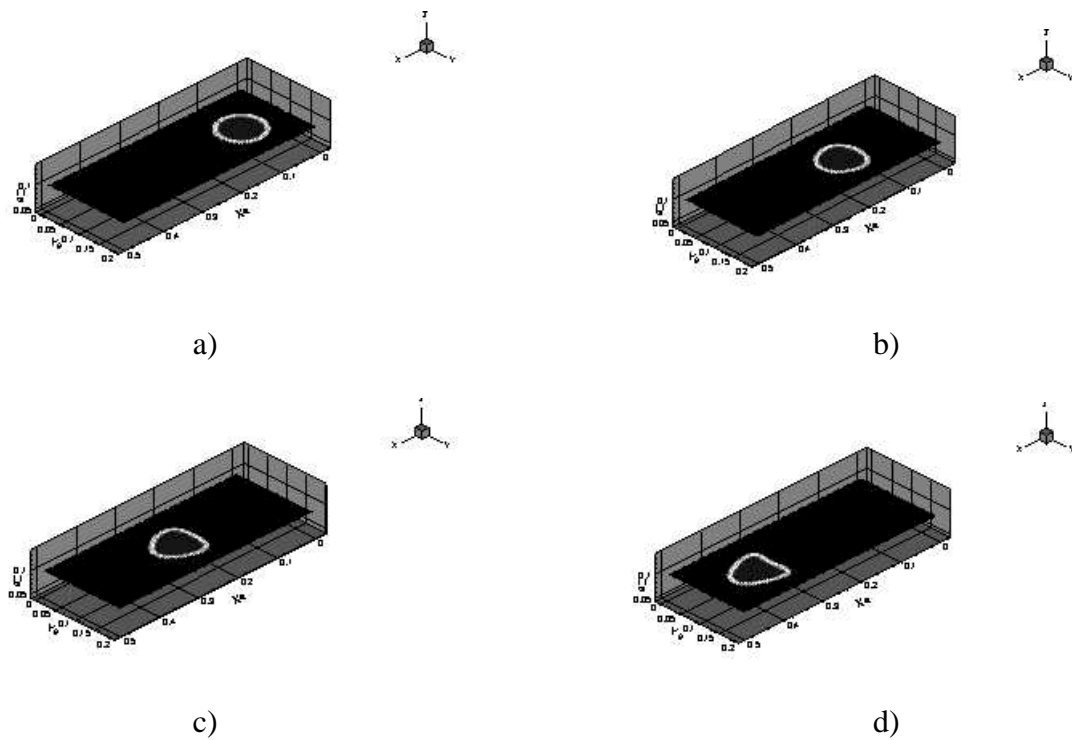


Figura 4 – Visualização da captura e do transporte da interface sob um campo de velocidades parabólico nos tempos: a) 0,0s, b) 0,04s, c) 0,06s, d) 0,09s.

### 4.2.3. Campo de Velocidade Cisalhante

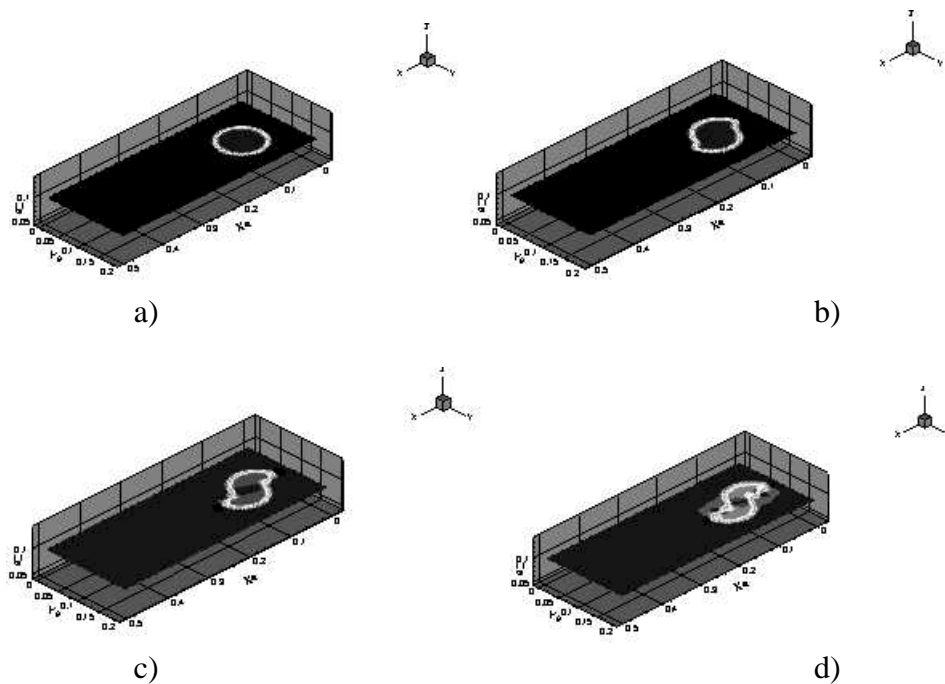


Figura 5 – Visualização da captura da interface sob um campo cisalhante com choque de velocidades nos tempos: a) 0,00s, b) 0,01s, c) 0,02s, d) 0,03s.

Percebe-se neste caso a necessidade de um processo de remalhagem (adição, subtração ou reconexão de nós) na interface. Devido a grande deformação ocorrida em alguns nós, a função indicadora não consegue mais capturar, com eficiência, a interface, fazendo com que após um determinado instante os resultados comecem a divergir.

## 5. CONCLUSÕES

Apresentou-se uma simulação numérica do processo de transporte passivo e deformação de uma interface tridimensional, utilizando-se campos de velocidade impostos e conhecidos. Foi implementado um procedimento para cálculo da Função Indicadora, a qual permite interpolar e determinar os campos de propriedades físicas como a densidade e a viscosidade. O processo de geração da malha inicial foi desenvolvido e implementado com sucesso.

## 6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Almeida, M. H. P. , 1998, "Simulação Numérica da Mecânica de Deformação de Partículas em Emulsões Diluídas", Dissertação de Mestrado, UnB, Brasília-DF.
- Cristini et al. , 1998, "Drop Breakup in Three-Dimensional Viscous Flows", Letters – Physics Fluids, vol 10, 8, pp. 1781-1783.
- Daly, B. J., 1969, 'A Technique for Including Surface Tension Effects in Hydrodynamic Calculation', Journal of Computational Physics, 4, pp. 97-117.
- Fauci, L. J. e Peskin, C. S., 1988 , "A Computational Model of Aquatic Animal Locomotion", Journal of Computational Physics, 77, pp. 85-108.

- Faber, T. E. , 1995, Fluid Dynamics for Physicists, Cambridge University Press.
- Fogelson, A. L. e Peskin, C. S. , 1988, 'A Fast Numerical Method for Solving the Three-Dimensional Stokes' equation in the Presence of Suspended Particles', Journal of Computational Physics, 79, pp. 50-69.
- Glimm et al. , 1988, "The Bifurcation of Tracked Scalar Waves", SIAM Journal of Science and Statistics Computational, 9, pp.61-79.
- Harlow, F. H. e Welch, J. E. , 1965, "Numerical calculation of Time-Dependent Viscous of Incompressible Flow of Fluid with Free Surface", Physics Fluids, 8, pp. 2182-2189.
- Hirt, C. W. e Nichols, B. D. , 1981, "Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries", Journal of Computational Physics, 39, pp. 201-225.
- Juric, D. e Tryggvason, G. , 1996, "A Front-Tracking Method for Dendritic Solidification", Journal of Computational Physics, 123, pp. 127-148.
- Lee, S. L. e Tzong, R. Y. , 1991, "An Enthalpy Formulation for Phase Change Problems with a Large Thermal Diffusivity Jump across the Interface", International Journal of Heat and Mass Transfer, vol 34, 6, pp. 1491-1502.
- Loewenberg, M. e Hinch, E. J., 1996, "Numerical Simulation of a Concentrated Emulsion in Shear Flow", Journal of Fluid Mechanics, 321, pp. 395-419.
- Mendes, P. J. T. , 1999, "Simulação Numérica Fina do Transporte de Interfaces", Dissertação de Mestrado, UFU, Uberlândia-MG.
- Peskin, C. S., 1977, "Numerical Analysis of Blood Flow in the Heart", Journal of Computational Physics, 25, pp. 220-252.
- Richtmyer, R. D. e Morton, K. W. , 1967, "Difference Methods for Initial-Value Problems", Interscience, New York.
- Silveira-Neto, A., 1997, "Simulation Numerique Fine des Ecoulements Turbulents Diphasiques non Miscibles", DTP/SMTH/LATA/97-06, Grenoble.
- Unverdi, S. O. e Tryggvason, G. A. , 1992, "Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-fluid Flows", Journal of Computational Physics, 100, pp. 25-37.
- Yu et al. , 1995, "The Collapse of a Cavitation Bubble in Shear Flows – A Numerical Study", Physics Fluids, 7, pp. 2608-2616.
- Zinchenko et al. , 1997, "A Novel Boundary-Integral Algorithm for Viscous Interaction of Deformable Drops", Physics Fluids, 9, pp. 1493-1511.