

SIMULAÇÃO NUMÉRICA FINA DO PROCESSO DE TRANSPORTE DE BOLHAS NO INTERIOR DE CONDUTOS

Paulo José Titara Mendes

Universidade Federal de Uberlândia, Pós Graduação em Engenharia Mecânica
38400-206 – Santa Mônica – Uberlândia – MG - Brasil

Francisco A. A. Pinho

Universidade Federal de Uberlândia, Pós Graduação em Engenharia Mecânica
38400-206 – Santa Mônica – Uberlândia – MG - Brasil

Aristeu Silveira Neto

Universidade Federal de Uberlândia, Pós Graduação em Engenharia Mecânica
38400-206 – Santa Mônica – Uberlândia – MG - Brasil

Resumo. Neste artigo, apresenta-se uma metodologia alternativa para modelar e simular fenômenos envolvendo o transporte de interfaces entre fluidos diferentes. Esta metodologia permite modelar, também, o processo de deformação de interfaces, quando elas são submetidas a efeitos de cisalhamento. Ela é baseada em uma formulação mista, envolvendo coordenadas eulerianas e lagrangeanas, simultaneamente. O escoamento da fase contínua é modelado com uma formulação euleriana enquanto que o transporte da interface é modelado com uma formulação lagrangeana. Os resultados apresentados neste artigo são bidimensionais. Simula-se o processo de transporte de bolhas em situações diversas, demonstrando-se a necessidade e a viabilidade do processo de regularização dinâmica da malha lagrangeana, com a qual se discretiza a interface. Transportam-se bolhas com uma formulação completa (Navier-Stokes com tensão interfacial e propriedades físicas variáveis) e compara-se o salto de pressão (sobre a interface) obtido via simulação numérica com o obtido via solução analítica, para interfaces circulares. A concordância entre os resultados é considerada boa.

Palavras-chave: Escoamentos bifásicos; transporte de interface; simulação numérica.

1. INTRODUÇÃO

Problemas de interface móvel estão presentes em um grande número de aplicações em engenharia. Exemplos típicos são os escoamentos bifásicos e multifásicos, interação fluido estrutura e em solidificação de materiais no interior de moldes. Os sistemas onde uma interface móvel é encontrada, têm como característica comum a presença de contornos internos ou interfaces, demarcando regiões com propriedades físicas diferentes. Ao cruzar estas interfaces, as propriedades físicas do fluido mudam muito rapidamente.

Nesta classe de problemas, faz-se necessário acoplar as equações de transporte de momento, massa e energia, com as equações que caracterizam o transporte, a evolução e a dinâmica da interface. Os parâmetros geométricos da interface, como a normal, a tangente e a curvatura, bem como a variação da densidade e da viscosidade, geram um termo fonte na equação de transporte da quantidade de movimento, afetando a dinâmica do escoamento.

Existem dificuldades em caracterizar a interface, uma vez que, dependendo do tipo de escoamento, ela pode sofrer severas deformações, como dilatação, compressão, coalescência ou fragmentação.

Os escoamentos bifásicos podem ser encontrados dentro de uma larga gama de configurações, as quais estão representados na Fig. 1.

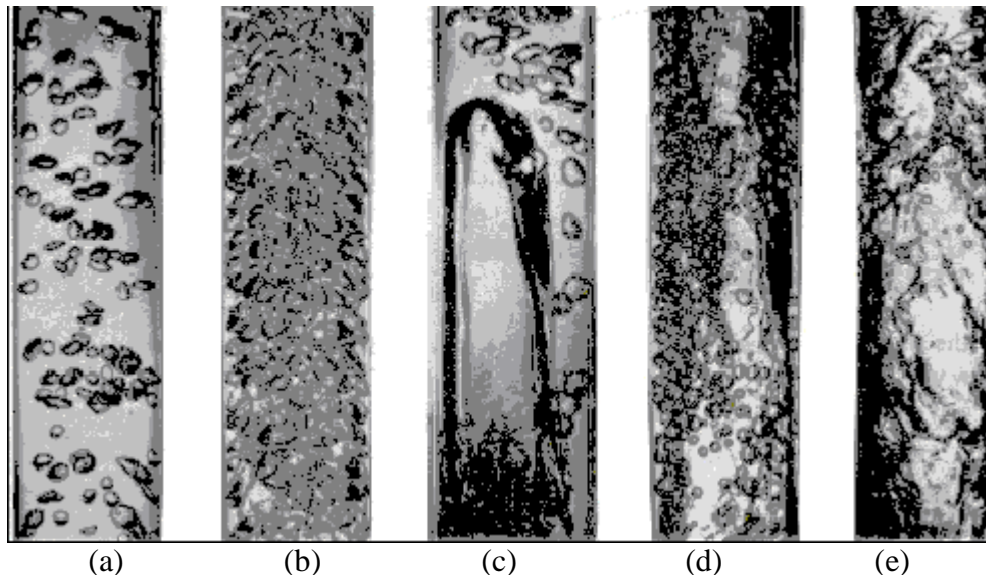


Figura 1- Escoamentos bifásicos em condutos verticais (Roumy, 1969): (a) bolhas independentes; (b) pacotes de bolhas; (c) pistonado; (d) agitante e (e) anular.

Alternativamente às técnicas experimentais de análise dos escoamentos bifásicos, têm surgido metodologias modernas e alternativas para *simulação numérica fina* deste tipo de escoamento. Neste caso, as interfaces são modeladas e simuladas localmente, de forma a capturar sua evolução ao longo do tempo. As equações médias para cada fase são substituídas por uma formulação local, válida para qualquer fase presente naquela posição e naquele tempo. Este tipo de simulação está relacionado com os trabalhos de Peskin (1977), que desenvolveu uma análise numérica do escoamento no interior de um coração. Resolveu-se as equações de Navier-Stokes, na presença de interfaces móveis (válvulas e parede do coração), as quais interagem com o fluido em escoamento. Utilizando este tipo de formulação, Silveira-Neto (1997) simulou numericamente escoamentos bifásicos turbulentos que transportam bolhas no interior de um canal fechado, através da técnica de *captura de interfaces*, desenvolvida por Unverdi e Tryggvason (1992).

No presente trabalho objetiva-se simular numericamente, de forma local e instantânea, o processo de transporte de bolhas no interior de um conduto forçado. As bolhas são discretizadas por uma malha que se movimenta ao longo do domínio de cálculo, denominada de malha lagrangeana. A fase que transporta as bolhas, ou seja, a fase contínua, é discretizada por uma malha fixa em um sistema de coordenadas, chamada malha euleriana. O método aqui utilizado (*front-tracking*), proposto Unverdi e Tryggvason (1992), consiste no cálculo de uma função denominada indicadora, que permite localizar dinamicamente a interface e também torna possível a variação das propriedades físicas, viscosidade e densidade, ao longo do escoamento. O cálculo da função indicadora consiste, basicamente, na distribuição da normal dos pontos lagrangeanos na malha euleriana. O transporte da interface pressupõe, também, a caracterização de sua geometria e o uso de uma função distribuição/interpolação proposta por Juric (1996).

2. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

No presente trabalho, ambas as fases, contínua e dispersa, que compõem os escoamentos bifásicos, são discretizadas por uma mesma malha euleriana, enquanto que a interface entre elas é discretizada por uma malha lagrangeana. Na Fig. 2 abaixo, ilustram-se as duas malhas no domínio de cálculo.

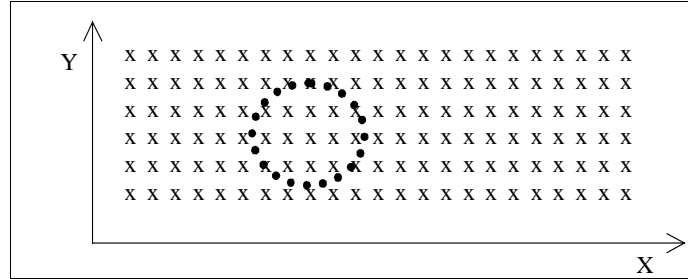


Figura 2- Esquema ilustrativo das duas malhas presentes no domínio: (x) malha euleriana e (●) malha lagrangeana.

2.1 Formulação euleriana para o transporte da fase contínua

Ambas as fases, contínua e dispersa, são modeladas pelas equações clássicas de conservação. Para escoamentos incompressíveis, elas são escritas na seguinte forma:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} \right] = -\nabla p + \rho \vec{g} + \nabla \cdot \left\{ \mu (\nabla \vec{V} + \nabla^T \vec{V}) \right\} + \vec{F}, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0. \quad (2)$$

Todos os termos desta equação são clássicos e dispensam maiores detalhamentos, exceto o termo \vec{F} que representa a força interfacial, a qual depende da geometria da interface e das propriedades físicas do par de fluidos que a definem. A solução destas equações é obtida por uma metodologia do tipo volumes finitos com malhas localizadas e com um esquema semi-implícito no tempo. O sistema linear para a pressão é resolvido via método SOR. É importante dizer que esta solução fornece o campo euleriano de velocidade $\vec{V}(\vec{x}, t)$ e de pressão $p(\vec{x}, t)$, os quais são utilizados para transportar a interface.

2.2 Formulação lagrangeana para o transporte da fase dispersa

A fase dispersa é aquela que é transportada pela fase contínua, por exemplo, bolhas num meio líquido ou particulados num meio gasoso. Uma interface que separa estas fases, pode ser imaginada, do ponto de vista discreto, como um conjunto de pontos $\vec{x}_k = x_k \vec{i} + y_k \vec{j}$ (ver Fig. 3 (a)). As coordenadas (x_k, y_k) são obtidas pela configuração inicial, estabelecida no início da simulação. O transporte desta interface é feito com a equação lagrangeana abaixo:

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

Esta equação é resolvida de forma explícita, utilizando-se o campo de velocidade relativo ao tempo precedente para determinar a nova posição da interface no tempo atual. Os valores da velocidade lagrangeana $\vec{V}_k(\vec{x}_k, t)$ são obtidos pela interpolação do campo de velocidade euleriano, determinado pela solução das Eq. (1) e (2). Este processo de interpolação é descrito a seguir:

$$\vec{V}_k(\vec{x}_k) = \sum_i D_{ij}(\vec{x}_i - \vec{x}_k) \vec{V}_i(\vec{x}_i) h^2, \quad (4)$$

onde h é o tamanho da malha regular euleriana e D_{ij} é uma função interpolação, como sugerido por Peskin (1977). Observa-se que ela pode ser utilizada tanto para a interpolação, quanto para a distribuição das propriedades físicas. O processo de interpolação das velocidades está ilustrado na Fig. 3 (b), onde pode-se visualizar que a velocidade lagrangeana $\vec{V}_k(\vec{x}_k, t)$ é o resultado das influências das velocidades dos pontos vizinhos $\vec{V}(\vec{x}, t)$.

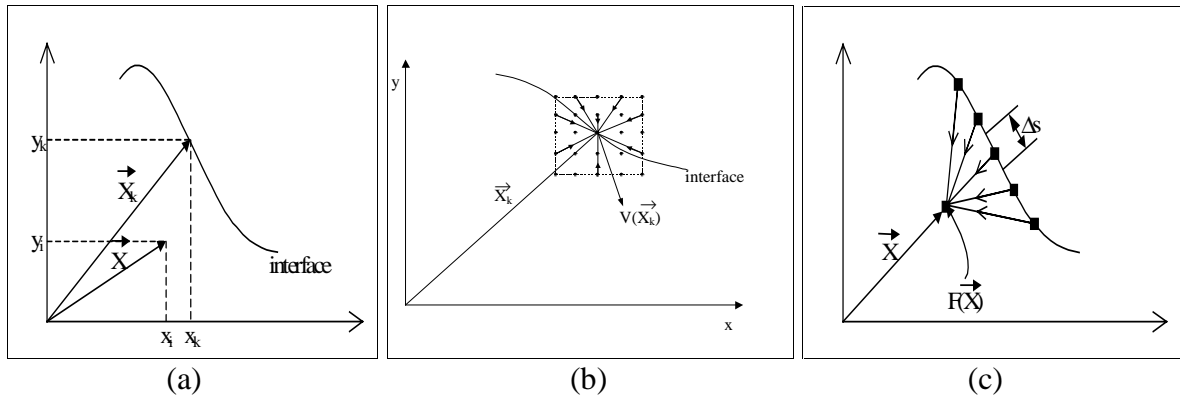


Figura 3- (a) Coordenadas eulerianas e lagrangeanas representadas por vetores; (b) processo de interpolação das velocidades eulerianas; (c) processo de distribuição da intensidade de força \vec{f} (grandeza lagrangeana) para obter \vec{F} (grandeza euleriana).

2.3 Cálculo do campo de força interfacial e dos campos de propriedades físicas

O termo \vec{F} , que representa um termo fonte na Eq. (1), é calculado através da distribuição da força interfacial (ver Fig. 3 (c)). Unverdi e Tryggvason (1992) propuseram a seguinte equação para o cálculo do termo fonte:

$$\vec{F}(\vec{x}) = \sum_k D(\vec{x} - \vec{x}_k) \vec{f}(\vec{x}_k) \Delta s(\vec{x}_k). \quad (5)$$

A intensidade de força interfacial $\vec{f}(\vec{x}_k)$ depende do par de fluidos e dos parâmetros geométricos da interface. O termo $\Delta s(\vec{x}_k)$ é o comprimento de um elemento de arco centrado num ponto \vec{x}_k . Classicamente, a intensidade de força interfacial é calculada através da seguinte equação:

$$\vec{f}(\vec{x}_k) = \sigma \kappa(\vec{x}_k) \vec{n}(\vec{x}_k), \quad (6)$$

onde σ o coeficiente de tensão interfacial [N/m], $\kappa(\vec{x}_k)$ é a curvatura [1/m] e $\vec{n}(\vec{x}_k)$ é a normal.

Para o cálculo das propriedades físicas utiliza-se um método proposto também por Unverdi e Tryggvason (1992). Este método é baseado em uma função chamada indicadora. Esta função resulta da solução de uma equação de Laplace e, dependendo das condições de contorno, ela admite solução 1 para a fase dispersa, 0 para a fase contínua e valores intermediários ao longo da interface. Desta forma, o cálculo das propriedades físicas é realizado através das seguintes equações:

$$\rho(\vec{x}, t) = \rho_0 + (\rho_1 - \rho_0)I(\vec{x}, t), \quad (7)$$

$$\mu(\vec{x}, t) = \mu_0 + (\mu_1 - \mu_0)I(\vec{x}, t). \quad (8)$$

onde o índice “0” representa as propriedades da fase contínua e o índice “1” representa a fase dispersa.

2.4 Formulação para o cálculo da função indicadora

Define-se uma função $\vec{G}(\vec{x}, t)$ como o gradiente da função indicadora:

$$\vec{G}(\vec{x}, t) \equiv \vec{\nabla}I(\vec{x}, t). \quad (9)$$

Por outro lado, esta função pode ser calculada pela distribuição da normal à interface:

$$\vec{G}(\vec{x}, t) = \sum_k D(\vec{x} - \vec{x}_k) \vec{n}(\vec{x}_k) \Delta s(\vec{x}_k). \quad (10)$$

Desta forma, aplicando-se o operador divergente sobre a Eq. (9) obtém-se:

$$\nabla^2 I(\vec{x}, t) = \vec{\nabla} \cdot \vec{G}(\vec{x}, t). \quad (11)$$

Esta equação é discretizada pelo método das diferenças finitas. O sistema linear resultante é resolvido pelo método das Sobre-Relaxações Sucessivas (SOR).

2.5 Considerações sobre o cálculo dos parâmetros geométricos

No cálculo da força interfacial e da função indicadora nota-se a necessidade de conhecer os parâmetros geométricos da interface. Ela pode ser modelada por uma equação vetorial paramétrica e por ajuste de polinômios de Lagrange de grau “n” sobre um conjunto de “n+1” pontos seqüenciais. Neste trabalho, em particular, o grau do polinômio utilizado é 4. Com isto, calculam-se os parâmetros geométricos de interesse: normal, tangente, curvatura e comprimento de elementos de arco.

2.6 Formulação para o processo de remalhagem

Uma interface deve ser definida, inicialmente, por meio de um conjunto de pontos de coordenadas conhecidas. O número de pontos lagrangeanos necessários para discretizar a interface também é definido inicialmente. No entanto, quando a interface é transportada, ela pode passar por processos de deformação, dependendo da natureza do campo de velocidade que a transporta. Neste caso, para manter a regularidade da malha necessita-se refazê-la, alterando-se o número de pontos e redistribuindo-os. A necessidade da remalhagem se deve a

problemas de instabilidades numéricas no processo de transporte da interface, caso as distâncias entre os pontos fiquem muito aleatórias. Para tanto, utiliza-se o seguinte critério de estabilidade, baseado no tamanho típico da malha euleriana: $0,9 \leq \Delta s / h \leq 1,1$, onde Δs é a distância entre os pontos lagrangeanos da interface e h é o tamanho típico da malha euleriana. Os limites deste critério são determinados por meio de experiências numéricas que apresentam estabilidade. O processo de regularização pode ser resumido nos seguintes passos:

1. Escolhem-se dois pontos lagrangeanos k e $k+1$, sendo k o ponto de partida. Calcula-se a distância entre estes dois pontos, utilizando-se da equação abaixo:

$$\Delta s_{k+1/2} = \sqrt{(x_{k+1} - x_k)^2 + (y_{k+1} - y_k)^2}; \quad (12)$$
2. Submete-se esta distância ao critério acima. Caso o critério não seja obedecido, retira-se ou acrescenta-se um ponto. No caso de se acrescentar um ponto, o processo é feito de tal forma que ele pertença à reta que passa pelos dois pontos adjacentes a este novo ponto;
3. Retorna-se ao item 1 e repete-se o processo para os pontos $k+1$ e $k+2$;
4. Varrem-se todos os pontos da interface, após o que a malha estará regularizada.

2.7 Algoritmo resumido para o transporte da interface

A solução das equações apresentadas no presente trabalho exige uma seqüência de cálculo, baseada no seguinte algoritmo:

1. Para o tempo inicial, define-se uma geometria conhecida para a interface. Desta forma, caracteriza-se a interface no instante t_0 ;
2. Calculam-se os parâmetros geométricos da interface;
3. Resolve-se a equação para a função indicadora;
4. Avaliam-se os campos de densidade (ρ), de viscosidade (μ) e da força interfacial (\vec{F});
5. Resolvem-se as equações de Navier-Stokes com propriedades físicas variáveis e com a presença da força interfacial;
6. Interpolam-se as velocidades calculadas, encontrando as velocidades da malha lagrangeana e transporta-se a interface;
7. Conhecendo-se as novas posições dos pontos da interface, caracteriza-se uma nova geometria;
8. Retorna-se ao passo 2.

3. RESULTADOS

3.1 Influência da remalhagem no transporte passivo de interfaces com campos de velocidades impostos

Objetiva-se, com este teste, um rigoroso processo de deformação através de um choque de velocidades. O campo de velocidades é uniforme, porém composto de dois fluxos de mesma intensidade e de sentidos contrários (ver Fig. 4(a)). O raio da circunferência é $r=5 \text{ mm}$. Na Fig. 4(b) mostra-se a interface em diferentes instantes. Observa-se o rigoroso processo de deformação. Observa-se que a malha permanece bem regularizada. No início do processo de transporte, o número de pontos lagrangeanos é 100, enquanto no final tem-se 207 pontos, o que ilustra a regularização dinâmica da malha.

Na Fig. 5, mostra-se a evolução temporal do processo de deformação, utilizando-se a função indicadora. A cor escura corresponde a $I=0,0$, ou seja, à fase contínua, enquanto que a cor clara, no interior da interface, corresponde a $I=1,0$, ou seja, à fase dispersa.

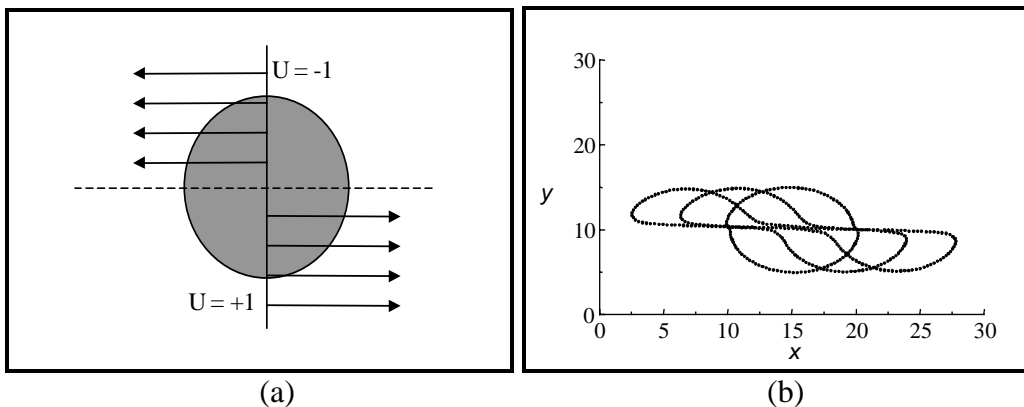


Figura 4-(a) Perfil de velocidades cizalhante imposto; (b) evolução temporal do processo de transporte de uma interface inicialmente circular; $u_s=-1,0$ m/s e $u_i=+1,0$ m/s; u_s é a velocidade no campo superior e u_i é a velocidade no campo inferior em relação à cota $y = 10$.

Observa-se o rigoroso processo de deformação e, no entanto, a malha fica completamente regular, como ilustrado na Fig. 4 (b). Observa-se ainda que a massa no interior da bolha permanece constante ao longo do processo de deformação.

É interessante perceber que a bolha é conduzida a um processo de fragmentação. O modelo deste processo físico está sendo proposto e será objeto de estudos futuros.

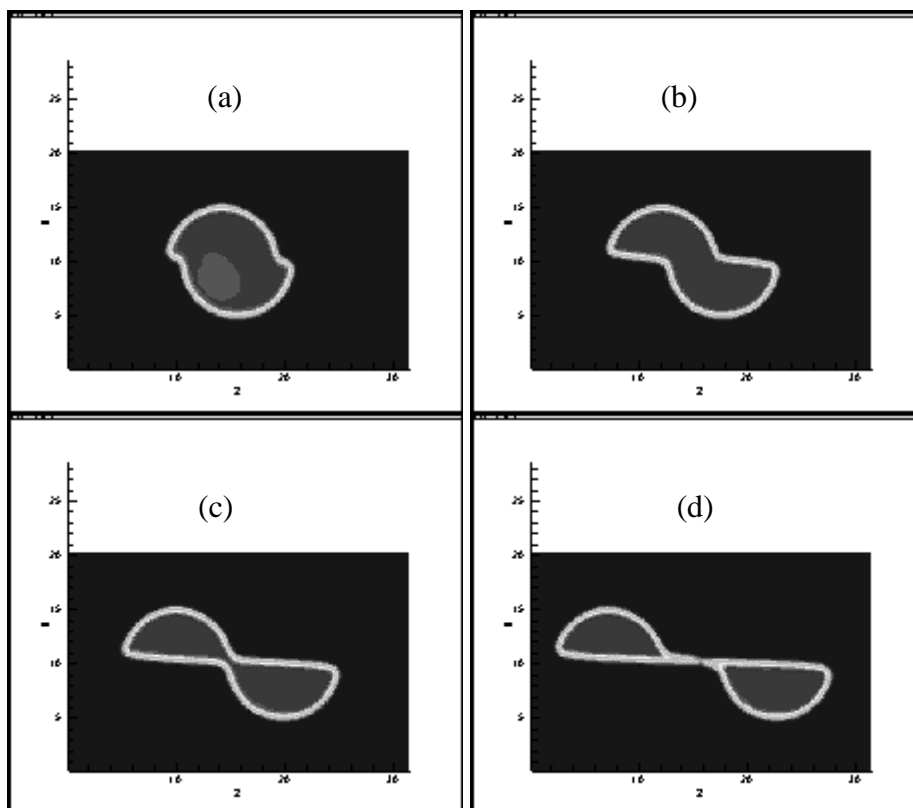


Figura 5- Bolha deslocando em escoamento cizalhante, descrito na figura 4(a) para tempos de: (a) 0,7s, (b) 2,8s, (c) 4,2s e (d) 6,3s.

3.2 Transporte passivo de interfaces via solução da equação de Navier-Stokes

Neste exemplo, simula-se o escoamento entre duas placas planas paralelas onde a placa inferior permanece em repouso e a placa superior tem velocidade $U_s = 1,0$ (escoamento de Couette). Na entrada impõe-se velocidade $U_e = 1,0$ e na saída utiliza-se derivada nula como condição de contorno. Os resultados estão apresentados na Fig. 6. Observa-se neste teste, que a interface se deforma em conformidade com o campo de velocidade. Esta é uma simulação simplificada do processo de interação de uma bolha com uma camada limite.

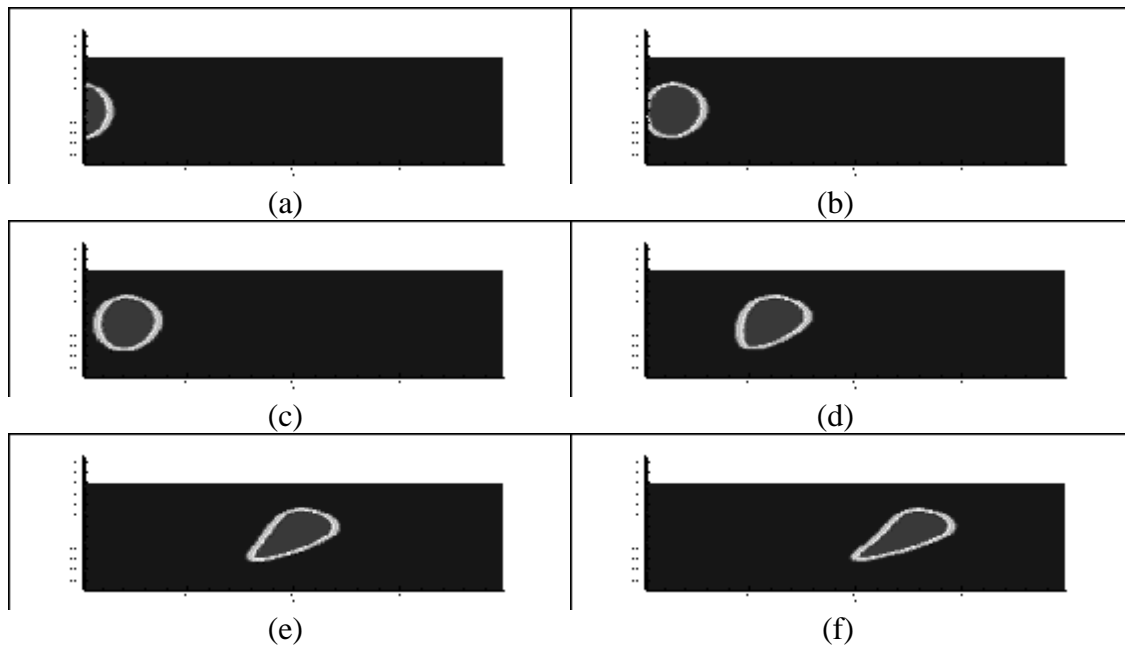


Figura 6- Transporte de uma bolha por um campo cizalhante de velocidades entre duas placas planas; a placa superior movimentada-se com velocidade $U_s = 1,0$; visualiza-se os tempos de: (a) 0,2s (b) 0,3s (c) 0,35s, (d) 0,6s, (e) 0,85s e (f) 1,0s.

Para o exemplo apresentado na Fig. 6, ainda não se leva em conta, na solução das equações de conservação, as variações das propriedades físicas e a presença de interfaces. Esta é a razão pela qual fala-se, ainda, de transporte passivo.

3.3 Transporte ativo de interfaces via solução da equação de Navier-Stokes com termo de força de interface e propriedades físicas variáveis

Neste item, apresenta-se um exemplo mais realista que o caso anterior. Aqui, o campo de velocidades euleriano não é mais imposto. Ele é calculado via solução das equações de Navier-Stokes completas, como descrito no item 2.1. Neste exemplo, simula-se o escoamento em um canal formado por duas placas planas paralelas.

Na Fig. 7 mostra-se o transporte de uma bolha no interior do canal paralelo, para dois valores da tensão interfacial, representada aqui pelo número de Eötvos, definido como $Eo = \rho_o g d_o^2 / \sigma$, onde ρ_o é a densidade da fase contínua, g é a gravidade, d_o é o diâmetro da bolha e σ é o coeficiente de tensão interfacial. A relação entre a viscosidade da fase dispersa é $\mu_0 / \mu_1 = 100$ e a relação de densidades é igual a 1. Contudo, novos testes estão sendo realizados com densidade variável.

Demonstra-se, analiticamente (White, 1991), que o salto de pressão ($\Delta^* p$) sobre uma interface circular é uma constante e é igual a $2/Eo$. Para realizar o presente teste, faz-se

necessário que a fase dispersa tenha um raio constante, ou seja, a interface não pode se deformar durante o processo de transporte. Neste caso, as forças de interface devem predominar sobre as forças de inércia. O número de Eötvös é o número adimensional que controla estas duas forças e para que as forças de interfaciais sejam predominantes, este número deve possuir baixos valores. No presente trabalho, calcula-se o salto de pressão para dois valores distintos de tensão interfacial (σ). Para ambos os casos, o tempo é o mesmo e igual a 1,0 s. O diâmetro inicial da bolha (d_1) é igual a 0,03 m, a gravidade (g) é igual a 9,81 m/s^2 e $\rho_o = 1000 \text{ kg}/m^3$. Com estes valores, obtém-se dois valores de Eo para os dois valores de σ , conforme especificados na Fig. 7.

Em ambos os casos, verificou-se que as interfaces permanecem circulares ao longo do tempo. Verificou-se ainda que à medida que se aumenta o número Eo a interface se deforma proporcionalmente. Nestes dois casos, os saltos de pressão obtidos via simulação numérica foram calculados. Os resultados são comparados com o resultado analítico citado acima.

Para o caso (a), $Eo=8,8 \times 10^{-4}$, obteve-se um salto de pressão numérico de $\Delta^* p_N=2,047/Eo$, comparado com o salto de pressão analítico, $\Delta^* p_A=2,0/Eo$, obtém-se um erro de 2,3%. Para o caso (b), $Eo=8,8 \times 10^{-5}$, o erro é de 0,035%. O erro é menor para tensões interfaciais maiores, onde a deformação da interface é menor.

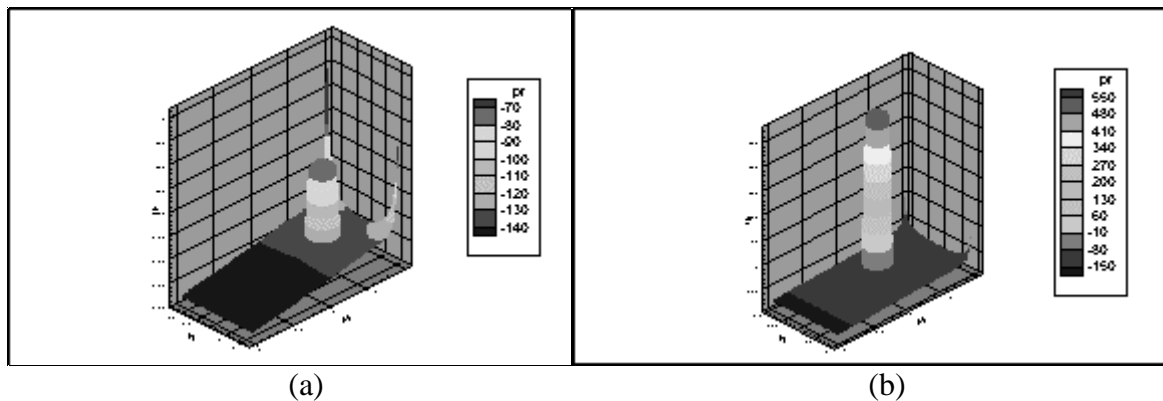


Figura 7- Bolhas circulares: (a) $Eo= 8,8 \times 10^{-4}$ ($\sigma = 10$); (b) $Eo= 8,8 \times 10^{-5}$ ($\sigma = 100$).

Para os dois casos acima, plotou-se os valores do salto de pressão em função da posição x e sobre o plano de simetria $y = 0$, o qual passa pelo centro da bolha. Os resultados estão apresentados na Fig. 8.

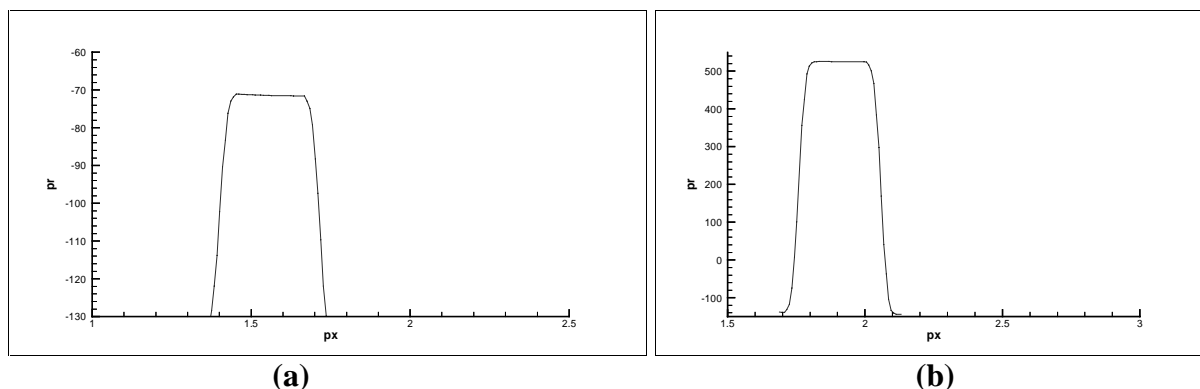


Figura 8- Salto de pressão em função da posição x para : (a) $\sigma = 10$ e (b) $\sigma = 100$.

Considerando que o campo de pressão é calculado de forma acoplada com o campo de velocidade, e que o salto de pressão sobre uma interface é o resultado do cálculo como um todo, deduz-se que a metodologia e a discretização das equações governantes fornecem

resultados confiáveis. Outras comparações serão realizadas para melhor validação da metodologia.

4. CONCLUSÃO

Foi apresentado um modelo matemático para o processo de transporte de interfaces. Apresentam-se resultados com campos de velocidades impostos. Apresentam-se, também, resultados de transporte de interface através de campo de velocidades calculados via solução das equações de conservação completas. O processo de regularização da malha lagrangeana mostrou-se necessário principalmente em regiões de fortes deformações, onde o espaçamento entre os pontos lagrangeanos não obedece ao critério adotado. Em relação a este critério, diferentes possibilidades foram testadas e, quanto mais rigoroso o mesmo se torna, ou seja, quanto menor a distância entre o limite inferior e superior, a malha lagrangeana torna-se mais regular. Contudo, o tempo computacional aumenta. O critério adotado no presente trabalho possibilitou uma boa regularização da malha com um tempo computacional não muito elevado. A função indicadora permite localizar dinamicamente a interface, assim como a determinação dinâmica dos campos de propriedades físicas. Mostrou-se que a massa inicial contida no interior da interface se conserva ao longo do transporte. Testes iniciais para o cálculo do salto de pressão possibilitaram bons resultados frente a resultados analíticos, para o caso de interfaces circulares.

Agradecimentos

Agradecemos ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da UFU e ao CNPq pelo apoio recebido, sem o qual este trabalho não poderia ter sido desenvolvido.

REFERÊNCIAS

- Juric, D., 1996, Computation of Phase Change, Ph.D. Thesis, Mech. Eng. Univ. of Michigan.
- Peskin, C.S., 1977, Numerical Analysis of Blood Flow in Heart, J. of Computational Physics, vol. 25, pp. 220-252.
- Roumy, R., 1969, Structure des Ecoulements Diphasiques Eau-air. Etude de la Fraction de Vide Moyenne et des Configurations d'Ecoulement, CEA-R-3892.
- Silveira-Neto, A., 1997, Simulation Numerique Fine des Ecoulements Turbulents Diphasiques non Miscibles, Grenoble.
- Unverdi, S. O. & Tryggvason, G. A., 1992, Front-Tracking Method for Viscous, Incompressible, Multi-Fluid Flows, J. Computational Physics, vol. 100, pp 25-37.
- White, F. M., 1991, Viscous Fluid Flow, McGraw-Hill Inc., New York.

LOCAL NUMERICAL SIMULATION OF THE INTERFACE TRANSPORT

Abstract: *In this work method for modeling two-phase flows is presented. It permits modeling interface transport and deformation when it is submitted to shear effects. This methodology is based on a mixt lagrangean/eulerian formulation. The continuos phase is modeled by a eulerian formulation and the disperse phase by a lagrangean formulation. In the present work, two-dimensional buble transport simulation are performed. The complete Naveir-Stokes, equations with variable physical property and with interfacial force are solved. The pressure jump over the interface is well predicted when compared with analitical solution for the case of a circular buble.*

Key words: two-fase flows; interface transport; numerical simulation.