



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”

Faculdade de Ciências e Tecnologia
Câmpus de Presidente Prudente

Tratamento numérico da condição de tensão normal para métodos de projeção em escoamentos com superfície livre

Débora de Oliveira Medeiros

Orientador: Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi

Coorientador: Prof. Dr. José Carlos Rodrigues

Programa: Matemática Aplicada e Computacional

Presidente Prudente, Abril de 2017

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional

**Tratamento numérico da condição de tensão
normal para métodos de projeção em
escoamentos com superfície livre**

Débora de Oliveira Medeiros

Orientador: Prof. Dr. Cassio Machiaveli Oishi

Coorientador: Prof. Dr. José Carlos Rodrigues

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Faculdade de Ciências e Tecnologia da UNESP para obtenção do título de Mestre em Matemática Aplicada e Computacional.

Presidente Prudente, Abril de 2017

FICHA CATALOGRÁFICA

M438t Medeiros, Débora de Oliveira.
Tratamento numérico da condição de tensão normal para métodos de projeção em escoamentos com superfície livre / Débora de Oliveira Medeiros.
- Presidente Prudente : [s.n.], 2017
83 f.

Orientador: Cássio Machiaveli Oishi
Coorientador: José Carlos Rodrigues
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Ciências e Tecnologia
Inclui bibliografia

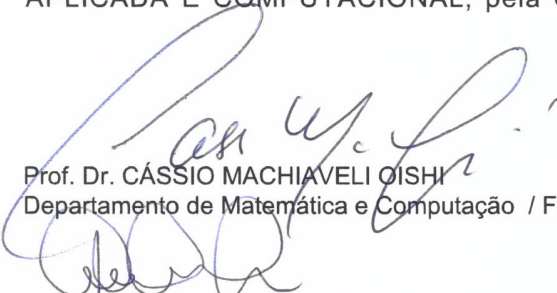
1. Condição de tensão normal. 2. Escoamentos com superfície livre. 3. Formulação laplaciano superficial. I. Oishi, Cássio Machiaveli. II. Rodrigues, José Carlos. III. Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Ciências e Tecnologia. IV. Título.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

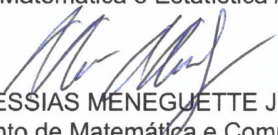
TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Tratamento numérico da condição de tensão normal para métodos de projeção em escoamentos com superfície livre

AUTORA: DÉBORA DE OLIVEIRA MEDEIROS
ORIENTADOR: CÁSSIO MACHIAVELI OISHI
COORIENTADOR: JOSÉ CARLOS RODRIGUES

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Mestra em MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, pela Comissão Examinadora:


Prof. Dr. CÁSSIO MACHIAVELI OISHI
Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente


Prof. Dr. WELLINGTON CARLOS DE JESUS
Instituto de Matemática e Estatística / Universidade São Paulo


Prof. Dr. MESSIAS MENEGUETTE JUNIOR
Departamento de Matemática e Computação / Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Presidente Prudente, 24 de abril de 2017

À todos meus familiares, em especial a minha mãe, Eliza.

Agradecimentos

Dedico este trabalho a minha mãe, que sempre me apoiou e deu forças para seguir nos estudos. E agradeço a toda minha família pelo incentivo e carinho ao longo desta jornada.

Gostaria de agradecer a amizade e apoio do professor Dr. José Carlos Rodrigues para meu ingresso no mestrado e a atenção, tempo e principalmente paciência do meu orientador, professor Dr. Cassio M. Oishi, e pelo conhecimento e a contribuição para o meu crescimento pessoal e científico proporcionados. Também gostaria de agradecer a atenção e as contribuições dos amigos do Laboratório de Simulação Numérica, Amauri G. Junior, Fernando Pacanelli, Hugo França e Irineu Palhares.

Agradeço a todos meus amigos que mesmo sem entender muito, torceram junto comigo para que as simulações numéricas dessem certo. Agradeço principalmente aos amigos do Pós-MAC, que se tornaram uma família durante esses dois anos de mestrado.

Agradeço também a todos os professores do departamento de matemática e computação da UNESP, por se disporem a tirar dúvidas, dar conselhos e contribuir para o meu crescimento científico.

Gostaria de agradecer à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro, processo nº 2015/01243-0. Tendo que as opiniões, hipóteses e conclusões ou recomendações expressas neste material são de responsabilidade do autor e não necessariamente refletem a visão da FAPESP.

Agradeço aos funcionários da Seção de Pós-Graduação e do Escritório de Pesquisa pela atenção e paciência por se disporem para sanar todas as dúvidas.

Finalmente, agradeço a todos que, diretamente ou indiretamente, contribuíram para a elaboração deste trabalho.

“ É do buscar e não do achar que nasce o que eu não conhecia”.
Clarice Lispector

Resumo

Neste trabalho é apresentado um estudo das equações de Navier Stokes incompressível com superfície livre e métodos de projeção com uma formulação recente denominada laplaciano superficial. Esta formulação tem como finalidade uma melhor descrição da força de tensão superficial e grandezas, como curvatura e vetores tangencial e normal, descritas sobre a interface. Assim, uma condição de tensão normal alternativa é definida, e esta quando discretizada implicitamente e combinada com o método de projeção, descrevem a formulação laplaciano superficial, cuja sua solução é utilizada como condições de contorno para resolver o sistema de equações que descrevem o escoamento.

A nova formulação destina-se a resolver um sistema tridiagonal de equações gerado sobre a interface, e usar a solução deste sistema de equações como uma condição de contorno na superfície livre para o sistema linear da correção da pressão no interior do domínio, que é resultante da aplicação do método de projeção.

A nova equação que define a condição de tensão normal conta com grandezas definidas na malha euleriana, no contexto *Marker-And-Cell* (MAC), que devem ser projetadas sobre a malha lagrangeana e também considera a curvatura e os vetores tangente e normal na sua descrição, sendo importante um estudo detalhado de geometria diferencial.

Finalmente, variações da formulação laplaciano superficial com tensão superficial para diferenças finitas são aplicadas para resolver os testes numéricos da oscilação da gota e da gota apoiada que possuem solução de referência, além da simulação de um problema com movimento de interface (*fountain flow*). Nestes testes, concluímos que a variação mais precisa e estável é aquela que aplica uma discretização da equação da tensão normal utilizando médias de valores alocados na malha MAC.

Palavras-Chave: *Condição de tensão normal, Tensão superficial, Fluidos newtonianos, Escoamentos com superfície livre, Formulação laplaciano superficial.*

Abstract

This work presents a study of the Navier-Stokes equations incompressible with free surface and a projection methods with a recent formulation defined as surface laplacian. The purpose of this formulation is to improve the description of the force of stress tension and quantities, as curvature and tangent and normal vectors, present at the interface. Thus, an alternative normal stress condition is defined, and when this is discretized implicitly and combined with the employ of projection method, describe the surface laplacian formulation, whose solution is used as boundary condition to solve the system of equations describing the flow.

The new formulation is intended to solve the tridiagonal system of equations generated at the interface, and to use this solution as a boundary condition at free surface for the linear system of the pressure correction inside of domain, which results of the application of the projection method.

The new equation used to define the normal stress condition considers quantities defined in the Eulerian mesh, in the *Marker-And-Cell* context (MAC), that should be projected on the Lagrangian mesh. In addition, in the new equation, it is also considered the influence of the curvature and normal and tangential vectors in your description, so that a detailed study of differential geometry for this computation is important.

Finally, variations of the surface laplacian formulation for finite differences are applied for solving numerical tests of the drop oscillation and sessile drop which have reference solutions, beyond of the simulation of a problem with free surface moving (*fountain flow*). In these tests, we concluded that the most accurate and stable variation is the one that applies a discretization of the normal stress equation using the mean of values in the MAC mesh.

Keywords: *Normal stress condition, Surface tension, Newtonian fluid, Free-surface Flow, Surface Laplacian Formulation.*

Lista de Figuras

1.1	Representação a esquerda uma gota livre e a direita uma gota em contato com a fronteira do domínio.	19
1.2	Representação da curva α e sua reta tangente em $t = \pi$	22
2.1	Representação da região D e a projeção de um ponto $\mathbf{x}$ sobre a interface Γ	28
2.2	Projeção do vetor velocidade $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x})$	29
2.3	Ilustração do gradiente superficial de um vetor $\mathbf{v}(\Pi_\Gamma)(\mathbf{x})$	30
2.4	Denominação das células em uma malha euleriana	33
2.5	Representação de uma célula do tipo MAC no ponto i, j , com as velocidades e pressão, denotadas respectivamente, sobre as faces e no centro.	33
2.6	Esboço da representação de um escoamento com superfície livre.	34
2.7	Representação do traço da curva $\omega(s)$ e seus vetores normal e tangencial sobre a malha euleriana.	35
2.8	Projeção de um ponto do centro da célula sobre a interface.	37
2.9	Esboço para a determinação do ponto médio.	38
2.10	Velocidade $\mathbf{u}_I$ projetada sobre a interface em uma célula do tipo MAC.	39
2.11	Vetores tangente $\mathbf{m}(s)$ e normal $\mathbf{n}(s)$, representados sobre a cura que descreve a interface.	40
3.1	Esboço de um dos casos possíveis para a descrição das células que descrevem a interface	46
3.2	Quadrante onde a projeção do ponto do centro se encontra.	49
3.3	Esquema de interpolação bi-linear para a velocidade.	49
4.1	Representação para variação de diâmetro da elipse para as diferentes formulações, com $Re = 100.0$, $We = 1.0$ e $Oh = 0.01$	56
4.2	Comparação entre a formulação laplaciano-1 e a formulação implícita MAC, com $Re = 100.0$, $We = 1.0$ e $Oh = 0.01$	56
4.3	Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, malha M1, $Re = 0.984$ e $We = 1.962$, no instante adimensional $t = 0.4$	57
4.4	Aproximação da região da geometria da gota apoiada, para as formulações do laplaciano superficial apresentadas neste trabalho, utilizando a malha M_6 , com $Re = 0.984$ e $We = 1.962$, no instante $t = 0.4$	58
4.5	Comparação entre a geometria da gota apoiada, para a formulação implícita MAC e variações do laplaciano superficial, utilizando a malha M_3 , com $Re = 0.1$ e $We = 1.962$, no instante $t = 40.0$	59
4.6	Comparação entre a geometria da gota apoiada, para as formulação implícita MAC e variações do laplaciano superficial, utilizando a malha M_6 com $Re = 0.1$ e $We = 0.2$, no instante $t = 0.4$	59

4.7	Comparação entre a geometria da gota apoiada, para as formulação implícita MAC e variações do laplaciano superficial, utilizando a malha M_3 , com $Re = 0.1$ e $We = 0.02$, no instante $t = 0.4$	60
4.8	Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, malha M_2 , $Re = 0.1$, no instante $t = 6.0$	62
4.9	Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, com malha M_4 , no instante $t = 6.0$	63
4.10	Comparação entre distância da frente do escoamento em função dos números de capilaridade.	64
4.11	Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, com malha M_3 , $Re = 0.01$, no instante $t = 6.0$	65
4.12	Variação do diâmetro da gota em impacto entre as formulações MAC implícito e laplaciano superficial -4, utilizando a malha M_3 com $\Delta x = \Delta y = 0.05$, com $Re = 20.0$ e $We = 0.4$	66
B.1	Pertubações na interface causadas por aproximações numéricas em uma célula da malha euleriana.	81
B.2	Exemplo de ondulação sobre a superfície livre.	82
B.3	Ondulação suavizada.	82

Lista de Tabelas

4.1	Erro relativo da aproximação da curvatura em diferentes malhas.	54
4.2	Passo temporal para o problema <i>fountain flow</i> com superfície livre das diferentes formulações.	61

Sumário

Resumo	7
Abstract	9
Lista de Figuras	10
Lista de Tabelas	12
Capítulos	
1 Introdução	17
1.1 Considerações iniciais	17
1.2 Equações governantes	19
1.3 Estudo de geometria diferencial	20
1.3.1 Curvatura	21
2 Condição de tensão normal em escoamentos com superfície livre via formulação laplaciano superficial	27
2.1 Conceitos básicos	27
2.2 Aplicação na formulação MAC	32
2.2.1 Aproximação da curvatura	34
2.2.2 Algoritmo para a aproximação numérica da curvatura	36
2.2.3 Demais aproximações sobre a interface	36
2.3 Forma alternativa para definir a condição de tensão normal	39
3 Método laplaciano superficial via método da projeção	43
3.1 Método de projeção para escoamentos confinados	43
3.2 Método laplaciano superficial	44
3.3 Discretização do método	45
3.4 Algoritmos	47
3.4.1 Algoritmo para a formulação implícita MAC	47
3.4.2 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-1	47
3.4.3 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-2	48
3.4.4 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-3	50
3.4.5 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-4	51
4 Resultados numéricos	53
4.1 Cálculo da curvatura	53
4.2 Gota oscilante	54
4.3 Gota apoiada (<i>Sessile drop</i>)	56
4.4 <i>Fountain flow</i>	60

4.4.1	Problema sem tensão superficial	60
4.4.2	Problema com tensão superficial	61
4.4.3	Gota em impacto	63
5	Conclusão	67
	Referências	68
	Apêndices	
A	Formulação variacional para escoamentos com tensão superficial	73
A.1	Descrição do Problema	73
A.2	Princípio das potências virtuais na superfície	75
A.3	Conclusão	79
B	Movimentação da superfície livre	81

Introdução

1.1 Considerações iniciais

Neste trabalho é realizado o tratamento numérico de escoamentos incompressíveis de fluidos newtonianos com superfície livre, descritos por equações de Navier-Stokes em coordenadas cartesianas bidimensionais. Fluidos newtonianos são caracterizados por terem a viscosidade sempre constante em relação a taxa de deformação do fluido, e o fluido é dito incompressível quando sua densidade não se altera ao longo do escoamento, ou sua variação pode ser desprezada [11, 20], a água por exemplo, é um fluido incompressível.

As equações que descrevem o problema são discretizadas por diferenças finitas, no contexto *Marker-And-Cell* (MAC), como descrito em [16]. Os primeiros estudos que mostram como é possível resolver as equações de Navier-Stokes para problemas de escoamentos incompressíveis, com superfície livre, de maneira desacoplada são apresentados em diversos trabalhos, como o de Harlow [16], Chorin em [6, 7], e Temam [37]. A técnica consiste em aplicar um método de decomposição que primeiro calcula um campo de pressão intermediário explicitamente utilizando um campo de velocidade intermediária aplicado na equação de conservação do momento, posteriormente calcula-se os campos de velocidade e pressão através da projeção e para este último processo é necessário resolver uma equação de Poisson.

A análise de métodos de projeção para solução numérica das equações de Navier-Stokes, em relação à aspectos numéricos como estabilidade, taxa de convergência, erros numéricos, ordem de precisão, tratamento das condições de contorno, entre outros, podem ser encontrados nos trabalhos [2, 13].

Dando atenção a outros aspectos no estudo de métodos de projeção, ainda se tem poucas informações sobre, por exemplo, simulações com baixos números de Reynolds. Em [34], os autores tratam de métodos de projeção para microescoamentos, com baixo número de Reynolds ($Re \ll 1$), e observando o passo de tempo (δt) percebe-se que ao combinar um baixo número de Reynolds com um largo passo de tempo se desenvolvem os chamados transientes espúrios, que poluem numericamente os campos de velocidade e pressão.

O tratamento da tensão superficial neste trabalho é importante, uma vez que o estudo de simulações que envolvem efeitos de tensão superficial vem crescendo com o tempo, dado que em sistemas microscópicos os fenômenos superficiais são dominantes e ter simulações precisas dependem de uma boa representação das forças presentes na interface que separa os fluidos imiscíveis. Os estudos realizados por Buscaglia e Ausas [4] apresentam as interpretações físicas das forças de tensão superficial, e utilizando formulação

variacional determinam as condições da tensão normal para problemas que envolvem tensão superficial, molhamento e capilaridade. O termo laplaciano superficial é apresentado como um operador definido na interface como nos trabalhos [1, 4, 10, 23, 32], e fornece uma importante relação com a constante de curvatura, que pode ser expressa na condição de tensão normal, a qual será empregada neste trabalho.

Para discretização, utiliza-se uma combinação de malha euleriana, denominada malha deslocada [11], que permite o armazenamento das incógnitas em posições diferentes para a aproximação da solução das equações no interior do domínio, e uma malha lagrangeana descrita pela formulação *Front-tracking* [19, 42], que separa o domínio em dois, como líquido e ar, por exemplo, o qual é usado para descrever a interface entre os dois fluidos. Esta formulação é utilizada por diversos autores, como em Tryggvason, Scardovelli e Zaleski [42] e em Prosperetti e Tryggvason [30]. Nestes trabalhos, encontra-se como os métodos de *Front-tracking* podem ser aplicados dependendo do problema a ser estudado. O trabalho de Mangiavacchi et al. [19] mostra como pode ser feito o tratamento numérico desta formulação para simulações com superfície livre. Já Oishi, Buscaglia e Cuminato [25], fazem o uso desta formulação combinada com a formulação do laplaciano superficial para tratar a condição de tensão normal, sem considerar os efeitos de tensão superficial.

Guermond et al. [13], Yang e Prosperetti [47] apresentam métodos que são adaptados de modo adequado para a velocidade estabelecida nas condições de contorno, em que a condição de tensão normal e tangencial são prescritas de modo a garantir precisão do método. Oishi et al. [27] apresentam uma formulação implícita para o cálculo da pressão na condição de tensão normal sobre a superfície livre e uma análise sobre as restrições para a estabilidade. Poux et al. [29] e Dong, Karniadakis e Chrysosostomidis [9] propõem diferentes esquema numérico para equações de Navier-Stokes incompressíveis que contribui para a precisão e ordem de convergência da velocidade e pressão combinando métodos de projeção com condições de tração.

Sussman et al. [36] apresentam um método que utiliza *level-set* e diferenças finitas combinados com o cálculo implícito da pressão através de métodos de projeção para resolver escoamentos de fluidos imiscíveis e garante uma precisão de segunda ordem para problemas com número de Reynolds mais elevados, fazendo verificações da precisão do método para $Re < 1$. Pyo e Shen [31] tratam dois novos esquemas que também utilizam métodos de projeção em simulações de escoamentos incompressíveis com densidade variável, onde são realizados estudos de convergência e estabilidade para a técnica aplicada. Brown, Cortez e Minion [3] investigam como a interação entre fórmulas de atualização da pressão e condições numéricas de contorno afetam a ordem de precisão do método e apresentam um novo esquema de projeção de segunda ordem.

Frente às investigações com baixos números de Reynolds e para tratamento da condição de tensão normal como nos trabalhos citados, instiga-se aprofundar estudos e tratar das dificuldades presentes nesses trabalhos. O tratamento das equações para a condição de tensão normal a ser empregada neste projeto, baseia-se no trabalho apresentado por Oishi et al. [25], com a tensão normal sendo descrita sobre a superfície livre utilizando formulação *Front-tracking*.

A nova formulação proposta neste trabalho segue o conceito de [25], entretanto, tem a intenção de tratar problemas com tensão superficial e fundamentar os estudos na formulação variacional apresentada em [4], buscando tomar todas as grandezas envolvidas na condição de tensão normal sobre a interface a fim de resolver o sistema de equações proveniente sobre a malha lagrangeana que descreve a interface, assim, o resultado obtido para este sistema pode ser aproximado para a malha euleriana e tomado como condição de contorno para o sistema a ser resolvido no interior do domínio. Alguns detalhes sobre o estudo da formulação variacional [4], são apresentados no Apêndice A.

Tomando o tratamento de tensão superficial combinado com essa formulação proposta, como no trabalho de Oishi, Buscaglia e Cuminato [25], se faz necessário utilizar os pontos que descrevem a interface para aproximar quantidades geométricas, como a curvatura que está presente na condição de contorno de tensão normal [30, 42]. Pretende-se apresentar resultados e relações de geometria diferencial que permitem as aproximações realizadas por Mangiavacchi et al. [19] e esta teoria e algoritmos serão mostrados ao longo deste trabalho.

Para compreender melhor, são detalhadamente apresentadas as equações envolvidas e como se dá a manipulação das mesmas para resolução numérica do problema.

1.2 Equações governantes

Considerando escoamentos incompressíveis de fluidos newtonianos imiscíveis, tem-se o domínio como descrito na Figura. 1.1, onde o fluido A é representado por Ω_+ , o fluido B por Ω_- e a interface por Γ , sendo o domínio definido por $\Omega = \Omega_- \cup \Omega_+ \cup \Gamma$ tendo sua fronteira descrita por $\partial\Omega = \Gamma_{s-} \cup \Gamma \cup \Gamma_{s+}$, para Γ_{s-} onde a interface dos dois fluidos coincidem, Γ a interface que separa os fluidos e Γ_{s+} para a fronteira do domínio que não possui contato com o fluido B.

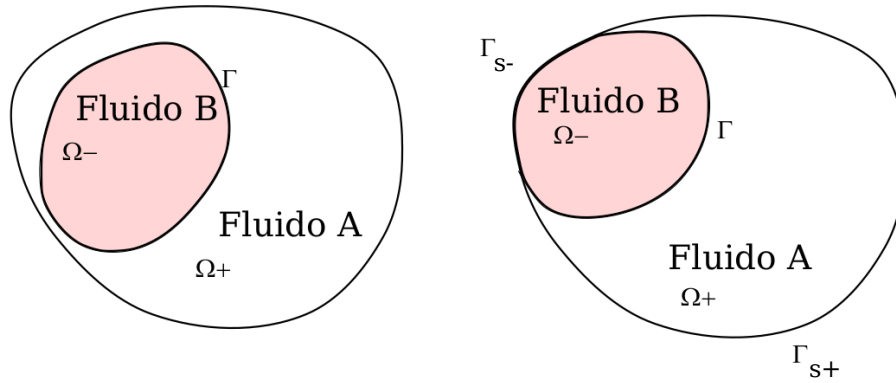


Figura 1.1: Representação a esquerda uma gota livre e a direita uma gota em contato com a fronteira do domínio.

Quando dois fluidos imiscíveis (fluido A e fluido B, como ilustrado na Figura 1.1) estão em contato existe um efeito de tensão superficial, uma consequência do aumento de energia das moléculas do fluido A sobre a interface, em comparação com as moléculas de uma área vizinha dessa molécula do fluido A, o que também ocorre ao observar o fluido B em relação a interface e suas moléculas vizinhas [4].

Para escoamentos incompressíveis de fluidos newtonianos imiscíveis, o problema via equações de Navier-Stokes no caso bidimensional é apresentado pelas equações de conservação da massa e do momento junto as condições de contorno, respectivamente:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (1.1)$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right] = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (1.2)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^t = -p_{atm} + \gamma \kappa, \quad \mathbf{x} \in \Gamma \quad (1.3)$$

$$\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^t = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma \quad (1.4)$$

em que o vetor $\mathbf{u} =: \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = (u(\mathbf{x}, t), v(\mathbf{x}, t))$ representa a velocidade, ρ a densidade do fluido, $\mathbf{g}$ é o campo gravitacional, $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor tensão total definido por

$$\boldsymbol{\sigma} =: -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}^N, \quad (1.5)$$

sendo a pressão $p = p(\mathbf{x}, t)$, o tensor identidade $\mathbf{I}$ e o tensor taxa de deformação $\boldsymbol{\tau}^N = 2\mu\mathbf{D}$, com $\mathbf{D} = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^t]$ e μ a viscosidade do fluido. Nas condições de tensão superficial formada pelas equações (1.3) e (1.4), $\mathbf{n}$ e $\mathbf{m}$ são os vetores normal e tangencial, respectivamente, à superfície livre, p_{atm} é a pressão atmosférica, κ é a curvatura da interface e γ é a constante de tensão superficial.

Reescrevendo as equações na forma adimensional [8, 11], a equação do momento (1.2) passa a ser dada por:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{1}{Re}\nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{Fr^2}\mathbf{g}. \quad (1.6)$$

O tensor de tensão total da equação (1.5), também deve ser reescrito na sua forma adimensional, logo a pressão e o tensor taxa de deformação podem ser escritos na forma adimensional, respectivamente, como:

$$p^* = \frac{1}{\rho U^2} p, \quad (1.7)$$

$$\boldsymbol{\tau}^{N*} = \frac{1}{Re} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t], \quad (1.8)$$

e com o tensor de tensão total adimensional, a condição de tensão normal (1.3) será:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^t = \frac{\kappa}{We}, \quad (1.9)$$

em que $Re = \frac{\rho UL}{\mu}$ é o número adimensional de Reynolds, $Fr = \frac{U}{\sqrt{|\mathbf{g}|L}}$ é o número de Froude e $We = \frac{\rho UL}{\gamma}$ é o número de Weber, considerando as grandezas específicas U como a velocidade do escoamento, L é o comprimento característico e para a equação (1.9), a pressão atmosférica p_{atm} , é considerada nula.

Como a intenção deste trabalho é tratar a condição de tensão normal empregando uma nova formulação que visa resolver o sistema de equações sobre a interface e utilizar essa solução como dados para a solução do sistema de equações no interior do domínio, se faz necessário apresentar algumas definições relevantes para o desenvolvimento do laplaciano superficial.

1.3 Estudo de geometria diferencial

Se baseando no trabalho de Oishi, Buscaglia e Cuminato [25], para o tratamento de tensão superficial combinado com a formulação laplaciano superficial é necessário utilizar os pontos que descrevem a interface para aproximar quantidades geométricas, como a curvatura e os vetores normal e tangente. Para determinar tais grandezas, segue-se o trabalho de Tenenblat [38] que apresenta resultados e relações de geometria diferencial que permitem as aproximações numéricas realizadas por Mangiavacchi et al. [19].

Ao utilizar a formulação *Front-tracking* para as partículas da interface Tryggvason et al. [42] ressaltam que é necessário determinar como a interface se move ao longo do tempo, como esta se deforma e como é realizada uma suavização nas deformações causadas por aproximações numéricas.

Como é suposto que ocorra o movimento da superfície livre ao longo do tempo, devido a velocidade do escoamento, tome a interface descrita por uma parametrização $\omega(s) = \mathbf{x}(s) = (x(s), y(s))$, com o parâmetro s que pertence a um intervalo real ($s \in B \subset \mathbb{R}$), e ao fim de cada iteração da simulação numérica a condição $\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathbf{u}^{n+1}$ deve ser resolvida, com $\mathbf{x} = (x(s, t), y(s, t))$ o vetor posição da partícula marcadora. Para calcular a nova posição a derivada é aproximada pela equação:

$$\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + \delta t \mathbf{u}(\mathbf{x}^n, t_{n+1}). \quad (1.10)$$

Por vezes, podem aparecer pequenas ondulações na interface e ser necessário uma suavização desta. Estas irregularidades surgem devido as aproximações numéricas e um estudo sobre como é feita a regularização da interface é feito no Apêndice B.

1.3.1 Curvatura

Pretende-se reescrever as equações que modelam fluido newtonianos incompressíveis em escoamentos com superfície livre baseando-se no trabalho de Oishi, Buscaglia e Cuminato [25], e nessa formulação proposta pelos autores a constante de curvatura está presente na condição de tensão normal, o que leva necessidade de se estudar como a curvatura pode ser calculada e como é aproximada numericamente com boa precisão.

Ao longo desta seção são apresentadas propriedades das curvas planas [38] que são significativas para poder definir grandezas exigidas pela formulação e calcular a curvatura da interface.

Definição 1 *Seja uma aplicação $\alpha : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$, $n \geq 2$ de classe C^∞ , isto é, α é uma aplicação diferenciável cuja derivadas de qualquer ordem são contínuas. A aplicação α é dita uma curva parametrizada diferenciável, cujo o traço determinado por $\alpha(t)$ em $\mathbb{R}^2$ é dito o traço da curva.*

Para ilustrar esta definição, tome a aplicação $\alpha(t) = (\sin(t), \cos(t))$ em $I = [0, 2\pi)$. Observe que a aplicação gera uma curva parametrizada diferenciável em $\mathbb{R}^2$ e seu traço coincide com a circunferência centrada na origem e com raio unitário.

Definição 2 *Seja $\alpha(t) = (x(t), y(t))$ uma aplicação de $I \subset \mathbb{R}$ em $\mathbb{R}^2$ uma curva parametrizada diferenciável. O vetor dado por $\dot{\alpha}(t_0) = (\dot{x}(t_0), \dot{y}(t_0))$ é dito vetor tangente a curva α no ponto $\alpha(t_0) \in I$, e $f(r) = \alpha(t_0) + r\dot{\alpha}(t_0)$, para $r \in \mathbb{R}$ é dita a reta tangente à α em $\alpha(t_0)$.*

Observação: uma curva parametrizada diferenciável é dita regular se $\forall t \in I$, $\dot{\alpha}(t) \neq 0$.

Tomando o exemplo anterior, $\alpha(t) = (\sin(t), \cos(t))$ em $t \in I = [0, 2\pi)$, o parâmetro $r \in \mathbb{R}$ e $t_0 = \pi$, é construída a reta tangente à curva parametrizada com $\dot{\alpha}(\pi) = (\cos(\pi), -\sin(\pi))$, como ilustrado na Figura 1.2.

Para melhor compreender como este vetor tangente é dado a partir de uma curva, Picado [28], faz uma breve abordagem teórica e geométrica, onde utiliza a definição de derivada para ilustrar estas definições.

Definição 3 *Seja $\alpha : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma curva regular, tal que para cada $t_0, t_1 \in I$, com $t_0 \leq t_1$, satisfaz*

$$\int_{t_0}^{t_1} \|\dot{\alpha}(t)\| dt = t_1 - t_0,$$

em que $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle}$ é a norma euclidiana, e $\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle$ denota o produto interno usual para $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, então a curva regular α é dita parametrizada por comprimento de arco.

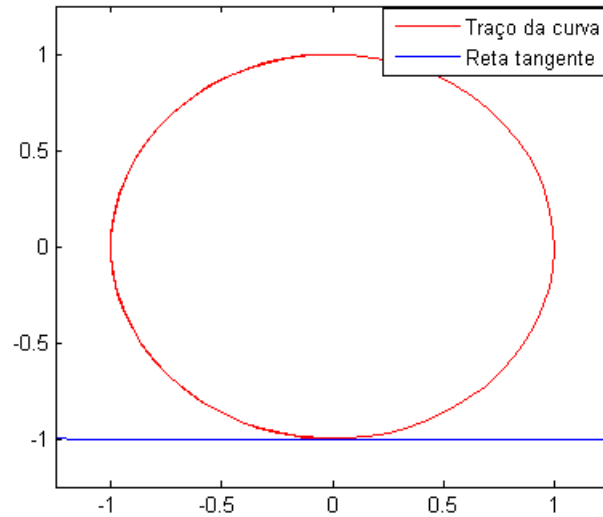


Figura 1.2: Representação da curva α e sua reta tangente em $t = \pi$.

Proposição 1 *Uma curva regular $\alpha : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ está parametrizada por comprimento de arco se, e somente se, $\forall t \in I$, $\|\dot{\alpha}(t)\| = 1$.*

Demonstração. Sejam α uma curva parametrizada por comprimento de arco e $t_0 \in I$ fixo e defina uma função $s : I \rightarrow \mathbb{R}$ da seguinte forma

$$s(t) = \int_{t_0}^t \|\dot{\alpha}(x)\| dx.$$

Se $t_0 \leq t$, pela **Definição 3**, tem-se

$$s(t) = \int_{t_0}^t \|\dot{\alpha}(x)\| dx = t - t_0,$$

logo, derivando em relação a t a igualdade $s(t) = t - t_0$, obtém-se $\dot{s}(t) = 1$.

Se $t_0 \geq t$, então

$$-s(t) = \int_t^{t_0} \|\dot{\alpha}(x)\| dx = t_0 - t.$$

Derivando a igualdade $s(t) = t - t_0$ em relação a t , obtemos $\dot{s}(t) = 1$, e observe que, $\dot{s}(t) = \|\dot{\alpha}(t)\|$, portanto $\|\dot{\alpha}(t)\| = 1$, $\forall t \in I$.

Agora suponha que uma aplicação $\alpha : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ verifica a relação $\|\dot{\alpha}(t)\| = 1$. Aplicando integral a norma $\|\dot{\alpha}(t)\|$ para $t_0 \in I$, temos

$$\int_{t_0}^t \|\dot{\alpha}(x)\| dx = \int_{t_0}^t dt = t - t_0,$$

que satisfaz a **Definição 3**. ■

Dentre outros resultados importantes para o estudo proposto neste trabalho, seguem agora as fórmulas de Frenet para curvas planas, as quais são aplicadas sobre a superfície livre do problema.

Definição 4 *Dada α uma curva parametrizada por comprimento de arco, define-se $\kappa(t) = \|\ddot{\alpha}(t)\|$ como a curvatura de α no ponto $\alpha(t)$.*

Proposição 2 *Seja $\alpha : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ uma curva regular, então para $t \in I$ vale*

$$\kappa(t) = \frac{\|\dot{\alpha}(t) \wedge \ddot{\alpha}(t)\|}{\|\dot{\alpha}(t)\|^3}. \quad (1.11)$$

Em que $\dot{\alpha}(t)$ é a derivada de primeira ordem em relação ao parâmetro t e $\ddot{\alpha}(t)$ é a derivada de segunda ordem da curva α em relação ao parâmetro t .

Demonstração. Tome $\alpha : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ e $\beta : J \rightarrow \mathbb{R}^2$ uma reparametrização por comprimento de arco de α e uma mudança de parâmetro $s : I \rightarrow J$. Escrevendo a função regular como composição das funções de reparametrização e mudança de parâmetro, $\alpha = \beta \circ s$, obtém-se

$$\dot{\alpha}(t) = \dot{\beta}(s(t))\dot{s}(t) \quad \text{e} \quad (1.12)$$

$$\ddot{\alpha}(t) = \ddot{\beta}(s(t))\dot{s}^2(t) + \dot{\beta}(s(t))\ddot{s}(t). \quad (1.13)$$

Então,

$$\dot{\alpha}(t) \wedge \ddot{\alpha}(t) = \dot{s}^3(t) \left(\dot{\beta}(t) \wedge \ddot{\beta}(t) \right), \quad (1.14)$$

aplicando a norma euclidiana em (1.14),

$$\|\dot{\alpha}(t) \wedge \ddot{\alpha}(t)\| = |\dot{s}(t)|^3 \|\dot{\beta}(s(t)) \wedge \ddot{\beta}(s(t))\|. \quad (1.15)$$

Pela **Proposição 1**, $\|\dot{\beta}(s(t))\| = 1$, logo aplicando este resultado na equação (1.12) normalizada, tem-se $|\dot{s}(t)| = \|\dot{\alpha}(t)\|$. Pela **Definição 4**, $\kappa(s(t)) = \|\dot{\beta}(s(t)) \wedge \ddot{\beta}(s(t))\|$, uma vez que a curvatura é a mesma independente da parametrização da curva. Então, manipulando (1.15),

$$\kappa(t) = \frac{\|\dot{\alpha}(t) \wedge \ddot{\alpha}(t)\|}{\|\dot{\alpha}(t)\|^3}. \quad (1.16)$$

■

A seguir, um resultado equivalente no caso de uma curva regular, não necessariamente parametrizada por comprimento de arco e uma forma mais usual para a curvatura, ainda análogo a Proposição 2.

Proposição 3 *Seja $\alpha(t) = (x(t), y(t))$, $t \in I$, uma curva regular. Então considere*

$$\mathbf{m}(t) = \frac{(\dot{x}(t), \dot{y}(t))}{\sqrt{\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2}} \quad \mathbf{n}(t) = \frac{(-\dot{y}(t), \dot{x}(t))}{\sqrt{\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2}},$$

a curvatura no ponto t é dada por:

$$\kappa(t) = \frac{-\ddot{x}(t)\dot{y}(t) + \ddot{y}(t)\dot{x}(t)}{(\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2)^{\frac{3}{2}}}.$$

Demonstração. Seja $\phi(s)$ uma reparametrização da curva $\alpha(t)$ por comprimento de arco com parâmetro $s \in I$, e considere $\phi(s(t)) = \omega(s)$. Derivando esta relação:

$$\frac{d\phi}{d\alpha} \frac{d\alpha}{ds} = \dot{\omega}(s), \quad (1.17)$$

derivando agora a expressão (1.17):

$$\frac{d^2\phi}{d\alpha^2} \frac{d\alpha}{ds} + \frac{d\phi}{d\alpha} \frac{d^2\alpha}{ds^2} = \ddot{\omega}(s). \quad (1.18)$$

Como foi feita uma reparametrização, então

$$\frac{d\alpha}{ds} = \|\dot{\omega}(s)\| = \sqrt{\langle \dot{\omega}(s), \dot{\omega}(s) \rangle}, \quad (1.19)$$

e derivando novamente,

$$\frac{d^2\alpha}{ds^2} = \frac{1}{2} \frac{\langle \ddot{\omega}, \dot{\omega} \rangle + \langle \dot{\omega}, \ddot{\omega} \rangle}{|\dot{\omega}|} = \frac{\langle \ddot{\omega}, \dot{\omega} \rangle}{|\dot{\omega}|}. \quad (1.20)$$

Das equações (1.17) e (1.19), obtém-se

$$\frac{d\phi}{d\alpha} = \frac{\dot{\omega}}{|\dot{\omega}|} = \frac{(\dot{x}, \dot{y})}{\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}} = \mathbf{m}(s). \quad (1.21)$$

com $\mathbf{m}(s)$ o vetor tangente a curva normalizado, e assim é possível tomar o vetor normal pela definição como anteriormente:

$$\mathbf{n}(s) = \frac{(-\dot{y}, \dot{x})}{\sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2}}. \quad (1.22)$$

Como $\mathbf{m}(s)$ é unitário, sua derivada é ortogonal a $\mathbf{m}(s)$, assim $\dot{\mathbf{m}}(s)$ proporcional ao vetor normal $\mathbf{n}(s)$. Denotando esta proporção por $\kappa(s)$, chama-se de curvatura de ω no ponto s [38], ou seja,

$$\dot{\mathbf{m}}(s) = \kappa(s)\mathbf{n}(s) \quad (1.23)$$

Desenvolvendo a relação de proporção entre os vetores tangente e normal:

$$\kappa(s) = \langle \dot{\mathbf{m}}(s), \mathbf{n}(s) \rangle = \langle \ddot{\omega}(s), (-y(s), x(s)) \rangle, \quad (1.24)$$

portanto,

$$\kappa = -\ddot{x}(s)\dot{y}(s) + \ddot{y}(s)\dot{x}(s). \quad (1.25)$$

O mesmo se verifica para o vetor normal, sua derivada é ortogonal a $\mathbf{n}(s)$ e vale a relação $\dot{\mathbf{n}}(s) = -\kappa(s)\mathbf{m}(s)$. De fato,

$$\kappa = \langle \dot{\mathbf{n}}(s), \mathbf{m}(s) \rangle = -\ddot{y}(s)\dot{x}(s) + \ddot{x}(s)\dot{y}(s). \quad (1.26)$$

Utilizando esta relação procede-se da seguinte forma:

$$\kappa(\alpha(s)) = \left\langle \frac{d^2\phi}{ds^2}, \mathbf{n}(s) \right\rangle, \quad (1.27)$$

logo,

$$\kappa(s) = \frac{\dot{x}\ddot{y} - \ddot{x}\dot{y}}{(\dot{x}^2 + \dot{y}^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (1.28)$$

Para simplificar a escrita, podendo escrever $y = f(x)$ uma função bem definida nos pontos sobre a interface onde é calculada a curvatura, então

$$\kappa = \frac{\frac{dx}{dx}\ddot{f}(x) - \frac{d^2x}{dx^2}\dot{f}(x)}{\left(\frac{dx}{dx}^2 + \dot{f}(x)\right)^{\frac{3}{2}}} \quad (1.29)$$

$$\kappa = \frac{\ddot{f}(x)}{(1 + \dot{f}(x))^{\frac{3}{2}}}. \quad (1.30)$$

■

Por exemplo, tomando uma circunferência de raio r definida por $\alpha_r(t) = (r \operatorname{sen}(t), r \operatorname{cos}(t))$, para $t \in [0, 2\pi]$. A curvatura pela equação (1.28) é

$$\kappa(t) = \frac{\dot{x}\ddot{y} - \ddot{x}\dot{y}}{(\dot{x}^2 + \dot{y}^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{-r^2(\operatorname{cos}^2(t) + \operatorname{sen}^2(t))}{(r \operatorname{sen}^2(t) + r \operatorname{cos}^2(t))^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{r}, \quad (1.31)$$

bem como é conhecido.

Uma vez definido o vetor tangente e a curvatura, determina-se um vetor normal tal que este seja ortogonal ao vetor tangente e formem uma base de $\mathbb{R}^2$. Considere a curva regular parametrizada por comprimento de arco $\alpha(t) = (x(t), y(t))$, com $t \in I \subset \mathbb{R}$, e o vetor unitário $\mathbf{m} = \dot{\alpha}(t) = (\dot{x}(t), \dot{y}(t))$. Dado o vetor normal $\mathbf{n} = (n_1, n_2)$, busca-se que este seja ortogonal ao vetor tangente, então

$$\langle \dot{\alpha}(t), \mathbf{n} \rangle = 0 \quad (1.32)$$

$$\Leftrightarrow \langle (\dot{x}(t), \dot{y}(t)), (n_1, n_2) \rangle = 0 \quad (1.33)$$

$$\Leftrightarrow \dot{x}(t) n_1 = -\dot{y}(t) n_2 \quad (1.34)$$

$$\Rightarrow (n_1, n_2) = (-\dot{y}(t), \dot{x}(t)). \quad (1.35)$$

Observe que $\mathbf{n}$ também possui norma igual a 1, $\|\mathbf{n}\| = \sqrt{\dot{y}^2(t) + \dot{x}^2(t)} = \|\dot{\alpha}(t)\| = 1$. Para verificar que estes vetores são uma base, deve-se conferir se são linearmente independente (LI), escrevendo

$$a_1(\dot{x}, \dot{y}) + a_2(-\dot{y}, \dot{x}) = 0 \quad (1.36)$$

A equação (1.36) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} a_1\dot{x} - a_2\dot{y} &= 0 \\ a_1\dot{y} + a_2\dot{x} &= 0 \end{aligned} \quad (1.37)$$

Resolvendo o sistema (1.37), obtém-se $a_1 = a_2 = 0$, portanto $\{\mathbf{m}, \mathbf{n}\}$ é um conjunto de vetores LI. Para verificar se são geradores de $\mathbb{R}^2$, tome (x, y) um vetor qualquer deste espaço, e escrevendo este vetor como combinação linear dos vetores linearmente independentes.

$$(x, y) = a_1\mathbf{m} + a_2\mathbf{n}, \quad (1.38)$$

reescrivendo o seguinte sistema

$$\begin{aligned} x &= a_1\dot{x} - a_2\dot{y}, \\ y &= a_1\dot{y} + a_2\dot{x}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Resolvendo este sistema, e desde que $\mathbf{x} \neq 0$, tem-se que os vetores são geradores. Portanto $\{\mathbf{m}, \mathbf{n}\}$ é dito um referencial de Frenet. Assim, os resultados apresentados são suficientes para poder tratar as equações governantes a serem discretizadas na malha representada pela Figura 2.6.

Condição de tensão normal em escoamentos com superfície livre via formulação laplaciano superficial

Para a formulação proposta neste trabalho é necessário apresentar alguns conceitos importante para a construção do mesmo. Fundamentando esta parte do estudo, são estudados trabalhos que apresentam propriedades e técnicas importantes que serão utilizadas, [19, 25, 30, 42].

2.1 Conceitos básicos

Ao resolver as equações de Navier-Stokes sobre a interface é importante compreender como os operadores diferenciais são descritos na interface, assim define-se um método de projeção de funções e vetores que auxiliarão nas demais definições. Buscaglia e Ausas [4], apresentam um estudo de formulação variacional onde se emprega uma técnica eficiente de projeção dos pontos da malha lagrangeana (que descreve a interface) para a malha euleriana que se utiliza no restante do domínio. Outro método muito utilizado para tratar as projeções de diferentes quantidades da interface para a malha euleriana é o método denominado *closest point method* [33], ou método do ponto mais próximo. A seguir são apresentadas definições e propriedades que permitem a manipulação das equações nas diferentes malhas.

Definição 5 *Seja $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$ uma aplicação de uma região $D \subset \Omega$ sobre a interface, que projeta um ponto $\mathbf{x} \in D$ em um ponto pertencente a Γ , em que Γ representa a interface como ilustrado na Figura 1.1, e coincide com um ponto da superfície mais próximo de $\mathbf{x}$,*

$$\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = \arg \left(\min_{\mathbf{y} \in \Gamma} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| \right), \quad \mathbf{x} \in D$$

em que é assumido que Γ seja regular o suficiente para que o vetor normal unitário $\mathbf{n}$ esteja definido em todos seus pontos e que, a região volumétrica finita $D \supset \Gamma$ é tal que seja possível definir um único valor $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$ para cada região.

A região D , ilustrada na Figura 2.1, representa uma faixa em torno da interface entre os fluidos, e é tal que as propriedades necessárias para resolver o sistema de equações

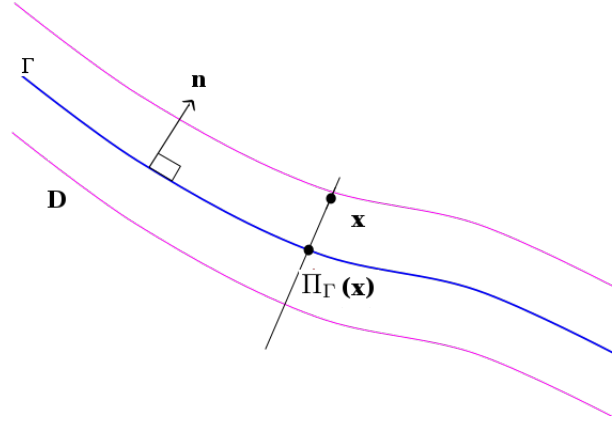


Figura 2.1: Representação da região D e a projeção de um ponto $\mathbf{x}$ sobre a interface Γ .

(1.1) – (1.4), estão bem definidas. Para determinar o conjunto dos pontos que definem a região D , assuma que existe $\delta > 0$, tal que

$$D = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2; \mathbf{x} = \mathbf{y} + a\mathbf{n}(\mathbf{y}), \mathbf{y} \in \Gamma \text{ e } |a| < \delta\}, \quad (2.1)$$

isto é, a região D é o conjunto dos pontos fora da interface, onde estes pontos são selecionados a partir do ponto $\mathbf{y} = \Pi_\Gamma(\mathbf{x})$, somado uma quantidade pequena, $a\mathbf{n}(\mathbf{y})$, proporcional ao vetor normal que parte do ponto $\mathbf{y}$ sobre a interface. Tendo que para algum ponto $\mathbf{x}$ pertencente a região D a sua projeção é dada pelo ponto sobre a interface que está a menor distância de $\mathbf{x}$, e por resultados de geometria analítica, sabe-se que o ponto que tem a menor distância é o que se dá pelo encontro da reta perpendicular a curva e passa por $\mathbf{x}$ e a curva que descreve a interface, de modo que a correspondência entre $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ é única, considerando um escalar a .

Veja que é possível relacionar uma função distância ϕ com a projeção normal realizada por $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$, sendo

$$\phi(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{n}. \quad (2.2)$$

Observe que $\mathbb{R}^2$ é um espaço vetorial normado com a métrica induzida pela norma euclidiana, $\mathbf{n}$ é um vetor unitário em um ponto $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) \in \Gamma$ e decorrente da **Definição 5**, a menor distância entre $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$ e $\mathbf{x}$ está sobre o vetor normal que passa por estes pontos, então, calcular $\phi(\mathbf{x})$ é o mesmo que calcular a norma euclidiana entre estes pontos, isto é

$$\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})\| = \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2}, \quad (2.3)$$

para $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ e $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = (y_1, y_2)$. Aplicando o gradiente na equação (2.3):

$$\nabla\phi(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial\phi(\mathbf{x})}{\partial x}, \frac{\partial\phi(\mathbf{x})}{\partial y} \right) = \left(\frac{x_1 - y_1}{\|\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})\|}, \frac{x_2 - y_2}{\|\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})\|} \right), \quad (2.4)$$

logo,

$$\nabla\phi(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})}{\|\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x})\|} = \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}). \quad (2.5)$$

em que $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ representa o vetor com origem em $\mathbf{x}$ e extremidade em $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$, que é o mesmo que ter o vetor normal projetado de $\mathbf{x} \in D$ em $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) \in \Gamma$. Portanto da equação (2.2), e das relações provenientes de geometria analítica, podem ser obtidas as seguintes igualdades

$$\nabla\phi(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \quad (2.6)$$

e

$$\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \phi(\mathbf{x})\mathbf{n}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x})). \quad (2.7)$$

Definição 6 A extensão de uma função f definida em Γ , é a definição de novos valores a esta função em uma região diferente do domínio de f . Assim a extensão normal de f é dada por

$$\hat{f}(\mathbf{x}) =: f(\Pi_\Gamma(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} \in \Gamma.$$

Observe que a **Definição 6** é válida também para extensão de vetores ou tensores de qualquer ordem, como cita Buscaglia e Ausas [4] e Montefusco [23]. Note que para cada $\mathbf{x} \in D$, a extensão $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x})$ para $\mathbf{x}$ é feita por transporte de $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}))$ paralelo a este mesmo vetor e na direção normal a partir do ponto $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$ para o ponto $\mathbf{x}$, como ilustrado na Figura 2.2.

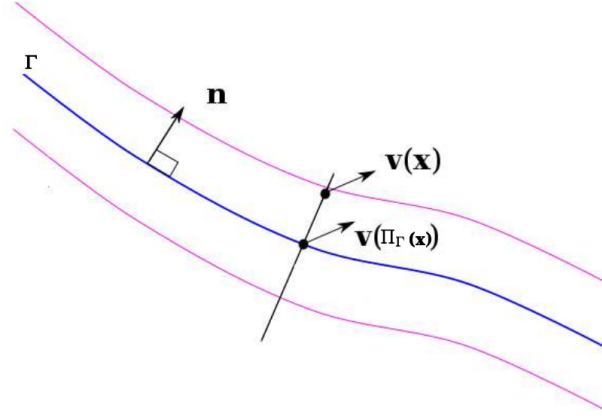


Figura 2.2: Projeção do vetor velocidade $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x})$.

Com base nas extensões apresentadas, são definidos operadores diferenciais sobre a interface. Começando pela definição do operador gradiente.

Definição 7 Seja a função definida $f : D \rightarrow \mathbb{R}^2$, o gradiente de superfície denotado por ∇_Γ é dado por:

$$\nabla_\Gamma f(\mathbf{x}) = \nabla \hat{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Gamma$$

que também pode ser escrita como $\nabla_\Gamma f(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(\mathbf{x}) \cdot \nabla f(\mathbf{x})$, em que $\mathbf{P}$ é a matriz de projeção ($\mathbf{P} = \mathbf{I}_d - \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}$).

Seguindo a **Definição 7**, aplicar o gradiente de superfície a uma função é definido como o gradiente convencional sobre a dada função projetada sobre a interface Γ , e aplicada sobre pontos $\mathbf{x} \in \Gamma$. O produto definido pelo operador $\otimes$ é dito produto diádico, equivalente a multiplicação matricial $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \mathbf{u}\mathbf{v}^T$, para $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$, d a dimensão do espaço.

A mesma notação pode ser aplicada para campos vetoriais, por exemplo, $\nabla_\Gamma \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \nabla \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x})$, que por sua vez, pela **Definição 6**, também é equivalente a escrever $\nabla_\Gamma \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \nabla \mathbf{v}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}))$.

No caso em que $f(\mathbf{x}) = \hat{f}(\mathbf{x})$, isto é, $f(\mathbf{x}) = f(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}))$, então a matriz de projeção coincide com a matriz identidade, $\mathbf{P} = \mathbf{I}_d$, ou seja, $\mathbf{x} = \Pi_\Gamma(\mathbf{x})$. Lembrando que a mesma definição é válida para campos vetoriais e tensores.

Definição 8 Seja $\mathbf{v}$ um campo vetorial definido $\mathbf{v} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}^2$, definimos o divergente superficial do campo vetorial $\mathbf{v}$ como sendo

$$\nabla_\Gamma \cdot \mathbf{v} = \mathbf{P} : \nabla \mathbf{v} = \text{tr}(\nabla \hat{\mathbf{v}}) = \text{tr} \left(\begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} & \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} \\ \frac{\partial \hat{v}}{\partial x} & \frac{\partial \hat{v}}{\partial y} \end{pmatrix} \right) = \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}.$$

em que $tr(\cdot)$ representa o traço de uma matriz. Tal que $\hat{\mathbf{v}} = \hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = (\hat{u}(\mathbf{x}), \hat{v}(\mathbf{x}))$, é a extensão do vetor $\mathbf{v}$ para a região D , dada pela equação (2.1), lembrando a notação proposta na **Definição 6**, $\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}))$.

O produto definido por dois pontos $(:)$, chama-se dupla contração, que para dois tensores $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$ é feito $\mathbf{A} : \mathbf{B} = tr(\mathbf{A}\mathbf{B}^t)$ e propriedades podem ser encontradas nos trabalhos [32, 42]. O operador ∇_Γ referido nas **Definições 7 e 8**, é denominado como *derivada tangencial* [4], como exemplificado a seguir e ilustrado na Figura 2.3.

Agora, por resultados de geometria, sabe-se que a curvatura pode ser expressa em termos da combinação das formas fundamentais ou invariantes principais, assim como o comprimento ou área de um elemento. Vamos definir agora um tensor de ordem 2 utilizando os operadores diferenciais e vamos comparar os resultados obtidos que envolvem as curvaturas. Dessa forma, tome

$$\mathbf{H} =: \nabla_\Gamma \mathbf{n}, \quad (2.8)$$

onde $\mathbf{H} \in M_3(\mathbb{R})$ e $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)^T$. Pela equação (2.6), temos que este é um tensor simétrico pois

$$(\mathbf{H})_{ij} = \frac{\partial \hat{n}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x_i \partial x_j}. \quad (2.9)$$

Observe que o tensor $\mathbf{H} \in M_3(\mathbb{R})$ possui as derivadas de segunda ordem de uma função escalar que satisfazem o Teorema de Schwarz [18], $\frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y}$ logo, o tensor será simétrico.

Se o gradiente de superfície é tangente a interface, como ilustrado pela Figura 2.3, então este gradiente é ortogonal ao vetor normal a essa interface [4, 5, 32], assim pela construção podemos concluir que se verifica a expressão $\mathbf{H}\mathbf{n} = (\nabla_\Gamma \mathbf{n})\mathbf{n} = (\nabla \hat{\mathbf{n}})\mathbf{n} = 0$, e ainda, pela definição de um problema de autovetor e autovalor, $\mathbf{n}$ é um autovetor do tensor $\mathbf{H}$ definido associado a um autovalor nulo.

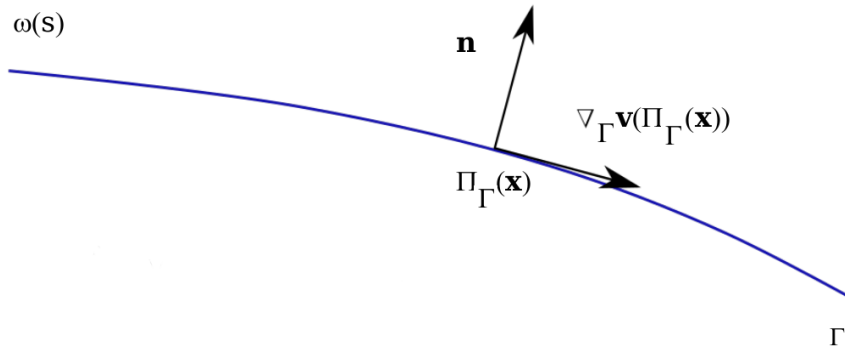


Figura 2.3: Ilustração do gradiente superficial de um vetor $\mathbf{v}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}))$.

Tendo estas considerações vamos definir os invariantes do tensor $\mathbf{H}$ como pode ser encontrado no trabalho de Gurtin et al. [15].

Para introduzir os invariantes principais de uma matriz A quadrada de ordem 3, partimos das relações entre os coeficientes do polinômio característico da matriz e suas raízes, $\lambda^3 - I_1(\mathbf{A})\lambda^2 + I_2(\mathbf{A})\lambda - I_3(\mathbf{A}) = 0$, tendo

$$I_1(\mathbf{A}) = tr(\mathbf{A}), \quad (2.10)$$

$$I_2(\mathbf{A}) = \frac{1}{2}[tr^2(\mathbf{A}) - tr(\mathbf{A}^2)], \quad (2.11)$$

$$I_3(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{A}). \quad (2.12)$$

No caso em que a matriz $\mathbf{A}$ seja simétrica, ela pode ser diagonalizável através de uma matriz ortogonal $\mathbf{Q}$, da forma $\mathbf{Q}^t \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{D}$, sendo possível calcular os invariantes principais a partir dos autovalores da matriz, que note que como $\mathbf{A} \in M_3(\mathbb{R})$ temos três autovalores, permitindo escrevermos

$$I_1(\mathbf{A}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3, \quad (2.13)$$

$$I_2(\mathbf{A}) = \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_1 \lambda_3, \quad (2.14)$$

$$I_3(\mathbf{A}) = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3. \quad (2.15)$$

Aplicando estas propriedades ao tensor $\mathbf{H}$ que definimos em (2.8), os autovalores $\kappa_1(\mathbf{x})$ e $\kappa_2(\mathbf{x})$ são chamados de curvaturas principais e o terceiro autovalor, como foi visto anteriormente, é nulo. Logo, através das equações (2.10) – (2.15), os invariantes do tensor $\mathbf{H}$ são

$$I_1(\mathbf{H}) = \text{tr}(\mathbf{H}) = \kappa_1 + \kappa_2, \quad (2.16)$$

$$I_2(\mathbf{H}) = \frac{1}{2}[\text{tr}^2(\mathbf{H}) - \text{tr}(\mathbf{H}^2)] = \kappa_1 \kappa_2, \quad (2.17)$$

$$I_3(\mathbf{H}) = \det(\mathbf{H}) = 0. \quad (2.18)$$

Como citado por Gurtin et al. [15], cada $I_k(\mathbf{H})$, com $k = 1, 2, 3$, é dito invariante principal pois satisfazem

$$I_k(\mathbf{H}) = I_k(\mathbf{Q} \mathbf{H} \mathbf{Q}^T), \quad (2.19)$$

para todo $\mathbf{Q}$ ortogonal, as igualdades são as mesmas em qualquer sistema de coordenadas cartesianas e I_1 e I_2 podem ser verificadas fazendo o desenvolvimento algébrico para matrizes de ordem n , tendo que, como $\mathbf{Q}$ é ortogonal temos $\mathbf{Q} \mathbf{Q}^t = \mathbf{I}_d$. Já para a terceira invariante I_3 , utilizamos propriedades dos determinantes, tendo $I_3(\mathbf{Q} \mathbf{H} \mathbf{Q}^t) = \det(\mathbf{Q}) \det(\mathbf{H}) \det(\mathbf{Q}^t) = \det(\mathbf{H})$.

A invariante I_1 é dito curvatura média e I_2 a curvatura Gaussiana. Observe que a curvatura média $\kappa = \kappa_1 + \kappa_2$ é o traço do tensor, portanto

$$\kappa = H_{11} + H_{22} + H_{33} = \frac{\partial \hat{n}_1}{\partial x} + \frac{\partial \hat{n}_2}{\partial y} + \frac{\partial \hat{n}_3}{\partial z}, \quad (2.20)$$

que toma $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) = (\hat{n}_1(\mathbf{x}), \hat{n}_2(\mathbf{x}), \hat{n}_3(\mathbf{x}))$, e que parte da construção do tensor e que permite escrever a curvatura média como $\kappa = \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$, com $\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{n}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}))$, ou de modo equivalente, $\kappa = \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{n}$, para $\mathbf{n}$ o versor normal que parte do ponto $\mathbf{x}$.

Seguindo a definição dos operadores, vamos definir agora o laplaciano superficial ou operador Laplace-Beltrami [1, 10].

Definição 9 *Seja $f : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e um ponto $q \in \Gamma$, o laplaciano superficial de f é dado por*

$$\Delta_\Gamma f = \nabla_\Gamma^2 f = \nabla_\Gamma \cdot \nabla_\Gamma f. \quad (2.21)$$

Para $\hat{\mathbf{I}}(\mathbf{x})$ uma extensão da função identidade $\mathbf{I}(\mathbf{x})$ em uma vizinhança de Γ , isto é, em que $\mathbf{x} \in D$, com D a região definida por (2.1), prova-se que $\Delta_\Gamma \mathbf{I} = -\kappa \mathbf{n}$.

Lema 1 *Considere uma função identidade $\mathbf{I}_d(\mathbf{x})$ e denotando por $\hat{\mathbf{I}}_d$ a extensão normal destes valores em Γ . Então são satisfeitas as seguintes propriedades:*

$$\hat{\mathbf{I}}_d(\mathbf{x}) = \Pi_\Gamma(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D \quad (2.22)$$

$$\nabla_\Gamma \mathbf{I}_d(\mathbf{x}) = \mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n} \quad (2.23)$$

$$\Delta_\Gamma \mathbf{I}_d(\mathbf{x}) = \nabla_\Gamma^2 \mathbf{I}_d(\mathbf{x}) = -\kappa \mathbf{n}. \quad (2.24)$$

Demonstração.

A igualdade (2.22), representa a função de projeção da **Definição 5**, logo podemos escrever $\hat{\mathbf{I}}_d(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$, $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \phi(\mathbf{x})\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ e como a função distância $\phi(\mathbf{x}) = 0$ para $\mathbf{x} \in \Gamma$, então $\hat{\mathbf{I}}_d = \Pi_\Gamma(\mathbf{x})$.

Para verificar a igualdade (2.23), em notação indicial, fazemos:

$$(\nabla_\Gamma \mathbf{I}_d)_{ij} = (\nabla \hat{\mathbf{I}}_d)_{ij} = \frac{\partial I_i}{\partial x_j} \quad (2.25)$$

em que $I_i = x_i - \phi \hat{n}_i$, e fazendo a substituição

$$(\nabla_\Gamma \mathbf{I}_d)_{ij} = \delta_{ij} - \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \hat{n}_i \quad (2.26)$$

e como $\nabla \phi = \hat{\mathbf{n}}$ pela equação (2.6), então $\frac{\partial \phi}{\partial x_i} = \hat{n}_i$, logo

$$(\nabla_\Gamma \mathbf{I}_d)_{ij} = \delta_{ij} - \hat{n}_j \hat{n}_i \quad (2.27)$$

Demonstrando assim que:

$$\nabla_\Gamma \mathbf{I}_d = \mathbf{I} - \hat{\mathbf{n}} \otimes \hat{\mathbf{n}}. \quad (2.28)$$

Para demonstrar a igualdade (2.24), vamos aplicar o divergente superficial na expressão obtida em (2.27)

$$(\Delta_\Gamma)_{ij} = (\nabla_\Gamma \cdot \nabla_\Gamma \mathbf{I}_d)_{ij} = \frac{\partial \hat{n}_i}{\partial x_i} \hat{n}_i \quad (2.29)$$

Pela equação em que definimos a curvatura (2.20), concluímos que $\Delta_\Gamma \mathbf{I}_d = -\kappa \hat{\mathbf{n}}$. ■

2.2 Aplicação na formulação MAC

Seja o domínio sobre a malha euleriana com suas células classificadas por [S] para as células onde passa a interface (células SURFACE), de forma que se tenha ao menos uma célula adjacente vazia (células EMPTY, que estão representadas pelas células em branco na Figura 2.4), e para as células que contém fluido, denotamos por [F], células que determinam parede e injetor são denominadas, respectivamente, [B] e [I] (células BOUNDARY e INFLOW) como ilustrado na Figura 2.4.

Para a discretização de um problema bidimensional, toma-se um domínio euleriano onde são discretizadas as equações governantes por diferenças finitas no contexto *Marker-and-cell* (MAC) [16], considerando uma malha deslocada sempre fixa [11] para a discretização das equações que modelam o problema, onde o domínio é dividido em células retangulares de comprimento Δx e altura Δy . Nessa malha a primeira componente da velocidade $\mathbf{u}$ é aproximada nas faces verticais, a segunda componente, v , da velocidade é aproximada nas faces horizontais e as demais grandezas, como a pressão, são aproximadas no centro da célula como ilustrado na Figura 2.5.

Na superfície livre utiliza-se a formulação lagrangeana para as partículas da interface, como ilustrado na Figura 2.6 e justificado por Prosperetti e Tryggvason [30]. A formulação *front-tracking* permite separar o domínio em dois, como no caso em que tratamos de superfície livre separa-se, líquido e ar, sob um domínio cartesiano fixo onde pode ser utilizada uma malha deslocada e que será utilizado para discretizar as equações que modelam o problema, e uma malha móvel, dita lagrangeana, o qual é usada para descrever a interface entre líquido e ar e discretizar as equações para a formulação laplaciano superficial. Tryggvason, Scardovelli e Zaleski [42] e Prosperetti e Tryggvason [30], apresentam como

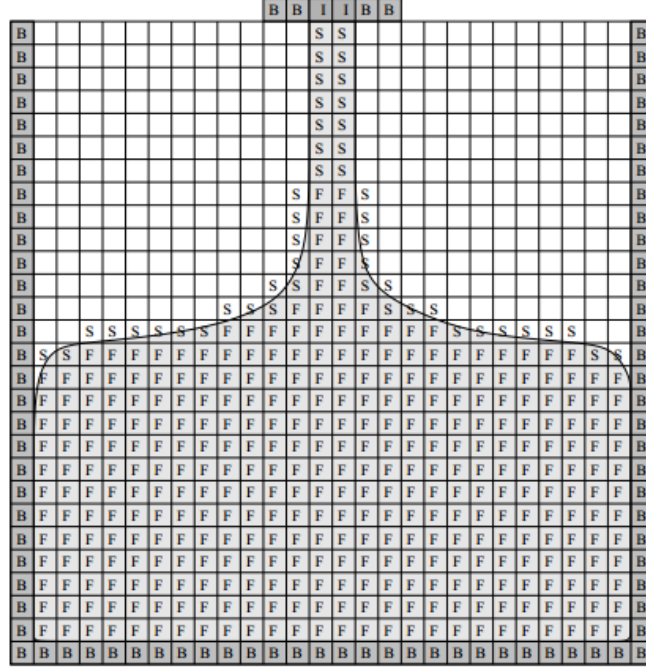


Figura 2.4: Denominação das células em uma malha euleriana

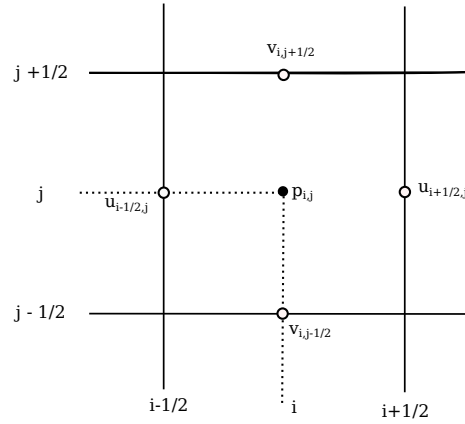
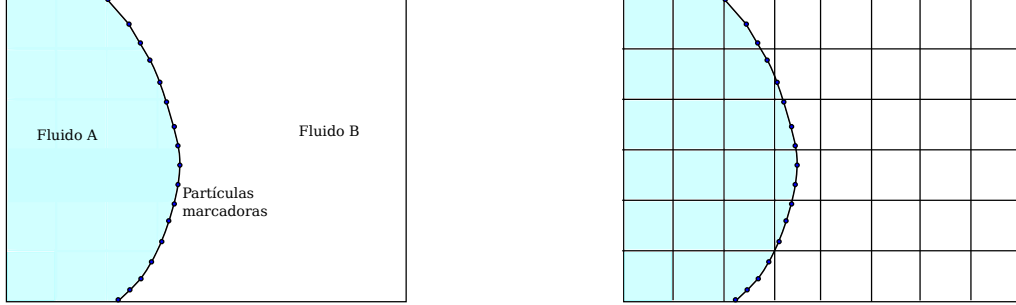


Figura 2.5: Representação de uma célula do tipo MAC no ponto i, j , com as velocidades e pressão, denotadas respectivamente, sobre as faces e no centro.

os métodos de *front-tracking* podem ser aplicados dependendo do problema a ser estudado. Em Mangiavacchi et al. [19], mostra-se como pode ser feito o tratamento numérico desta formulação para simulações com superfície livre, e em Villar [44], utiliza um método híbrido *front-tracking/front-capturing* e formulação lagrangeana para escoamentos bifásicos.

Mangiavacchi et al. [19] consideram diversas partículas que são utilizados para descrever a interface. A cada ciclo numérico os pontos da interface são ajustados para a movimentação da superfície livre, grandezas geométricas como a curvatura são determinadas utilizando método dos mínimos quadrados e funções são inseridas para remover pequenas ondulações que podem ocorrer em um processo numérico.

Seguindo este mesmo procedimento, considere um escoamento com superfície livre em que a interface entre o líquido (fluido A) e o ar (fluido B) é descrita por partículas marcadoras conectadas por pequenos segmentos de reta que se movem junto ao escoamento, como na Figura 2.6.



(a) Representação da interface entre os fluidos por *front-tracking*.

(b) Esboço das malhas euleriana e lagrangeana para a discretização proposta.

Figura 2.6: Esboço da representação de um escoamento com superfície livre.

Agora, sobre estas malhas, apresenta-se como são determinados os vetores tangente e normal, a curvatura, como são considerados os operadores diferenciais e como é realizada a aproximação destes sobre a interface utilizando as informações guardadas apenas na malha deslocada.

2.2.1 Aproximação da curvatura

A curvatura da superfície livre é calculada em cada célula do tipo [S], e em cada célula deve ser estimada uma curva que melhor se encaixa sobre as partículas da superfície nesta célula. Para usar uma aproximação que seja eficiente para regiões onde a curvatura é quase constante e para regiões onde os pontos apresentam uma certa dispersão em torno de uma curva regular, uma aproximação polinomial quadrática apresenta resultados precisos e então é a aproximação que será utilizada.

Fixando uma medida prescrita, e denotando por $\mathbf{x}_c$ o ponto no centro de uma dada célula [S], em um dado nível de tempo t do cálculo e seja M o número de partículas virtuais sobre a superfície livre na célula [S], que descrevem a malha lagrangeana, em uma vizinhança definida pela distância prescrita. Cada partícula terá a posição $\mathbf{x}_i = (x_i, y_i)$, para $i = 1, \dots, M$.

Primeiro, determina-se a reta normal à superfície na célula [S], estimando por uma reta que melhor aproxima a posição das partículas em uma vizinhança do centro da célula. Resolvendo por mínimos quadrados a equação da forma $z_1 x_i + z_2 = y_i$ para cada ponto $\mathbf{x}_i$, com $i = 1, \dots, M$ que fornece o seguinte sistema:

$$\begin{aligned} x_1 z_1 + z_2 &= y_1 \\ x_2 z_1 + z_2 &= y_2 \\ &\vdots \\ x_M z_1 + z_2 &= y_M \end{aligned} \tag{2.30}$$

que pode ser escrito na forma matricial $A\mathbf{z} = \mathbf{y}$, com os coeficientes z_1 e z_2 sendo incógnitas e A uma matriz não quadrada. Resolvendo o sistema equivalente $A^t A \mathbf{z} = A^t \mathbf{y}$, encontram-se os coeficientes da equação da reta e determina-se o vetor normal. Então escrevendo

$F(x, y) = z_1x - y + z_2$, calcula-se seu gradiente, $\nabla F = (z_1, -1)$ que tem a mesma direção do vetor normal a superfície. Normalizando este vetor:

$$\mathbf{n} = \left(\frac{z_1}{\sqrt{z_1^2 + 1}}, \frac{-1}{\sqrt{z_1^2 + 1}} \right). \quad (2.31)$$

Observação 1 Caso a matriz dos coeficientes seja singular, isto é, caso não seja invertível a melhor aproximação é uma reta dada por uma constante, como por exemplo $x = c$, e assim o vetor normal será $(1, 0)$. Para os demais casos resolvemos o sistema por algum método numérico.

Tendo calculado o vetor normal à superfície, facilmente obtém-se o vetor tangente

$$\mathbf{m} = \left(\frac{-1}{\sqrt{z_1^2 + 1}}, \frac{-z_1}{\sqrt{z_1^2 + 1}} \right), \quad (2.32)$$

e procede-se para a aproximação da curvatura. Primeiramente é preciso rotacionar e transladar o sistema de coordenadas (x, y) , de tal forma que o novo eixo de coordenada η tenha a mesma direção e sentido do vetor normal e passe através do centro da célula $\mathbf{x}_c$, como ilustrado na Figura 2.7.

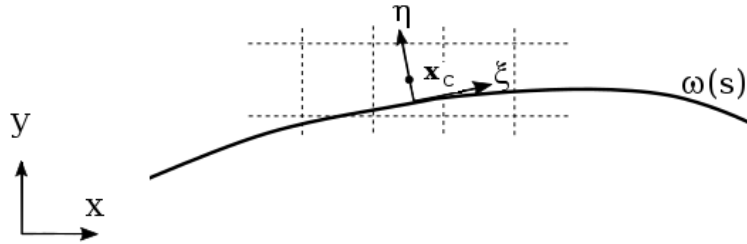


Figura 2.7: Representação do traço da curva $\omega(s)$ e seus vetores normal e tangencial sobre a malha euleriana.

Esta mudança de coordenadas pode ser representada por:

$$\xi = (x - x_c)n_y - (y - y_c)n_x, \quad (2.33)$$

$$\eta = (x - x_c)n_x - (y - y_c)n_y. \quad (2.34)$$

Fazendo uma aproximação quadrática para estimar a curvatura, escreve-se uma função da forma $\eta = a_2\xi^2 + a_1\xi + a_0$ para cada partícula sobre a superfície dentro da medida fixada no início deste processo. Então para cada $\mathbf{x}_i$, $i = 1, \dots, M$ têm-se uma equação, fornecendo o seguinte sistema:

$$\begin{aligned} a_2\xi_1^2 + a_1\xi_1 + a_0 &= \eta_1 \\ a_2\xi_2^2 + a_1\xi_2 + a_0 &= \eta_2 \\ &\vdots \\ a_2\xi_M^2 + a_1\xi_M + a_0 &= \eta_M \end{aligned} \quad (2.35)$$

e resolvendo por mínimos quadrados o sistema, são determinados os coeficientes a_0, a_1 e a_2 que descrevem a parábola. Além disso, escrevendo $\eta = f(\xi) = a_2\xi^2 + a_1\xi + a_0$, e seguindo o estudo da seção 1.3.1, e segundo a equação (1.30), a curvatura é escrita como

$$\kappa = \frac{f''(\xi)}{\left(1 + f'(\xi)\right)^{\frac{3}{2}}} = \frac{2a_2}{[1 + (2a_2\xi + a_1)^2]^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.36)$$

Para determinar o sinal da curvatura, uma vez que os coeficientes e ξ_i , $i = 1, \dots, M$ são conhecidos, seu sinal é determinado perante o resultado do produto interno entre o vetor normal $\mathbf{n}$ calculado por (2.31) e o vetor normal $\mathbf{n}^*$, que é determinado a “grosso modo”, se baseando na classificação das células da discretização, tendo células [S] por onde se tem a superfície livre, [F] para células que possuem fluido e [B] denotando células no contorno rígido. Por exemplo, o vetor normal ao centro da célula que aponta para fora do fluido e na direção paralela ao eixo x é tomado como $\mathbf{n}^* = (1, 0)^T$, sendo o caso em que a célula do tipo [S] anterior e posterior se encontram, respectivamente, acima e a baixo da célula a qual se encontra a discretização e a célula a esquerda é do tipo [F].

No caso de $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^* < 0$ os sinais do vetor normal $\mathbf{n}$ e da curvatura κ devem ser alterados, caso contrário, se mantém o sinal obtido nas aproximações, assim como descrito em [19].

2.2.2 Algoritmo para a aproximação numérica da curvatura

Para fazer o calculo da curvatura considere uma matriz onde será armazenada para cada célula os coeficientes necessários para a aproximação da parábola, os vetores tangencial e normal, e finalmente a curvatura.

- **Passo 1:** primeiro percorre-se todas as células da malha por onde passa a interface, células do tipo [S], zerando os elementos da matriz e calculando os coeficientes da matriz de aproximação via método dos mínimos quadrados para cada célula.
- **Passo 2:** o vetor normal é calculado no centro de cada célula, sendo estimado a partir das suas células vizinhas e a aproximação do vetor normal sobre a superfície por (2.31).
- **Passo 3:** é verificado se o número de partículas contabilizado para cada célula dentro da medida prescrita, é suficiente para fazer uma aproximação quadrática, isto é, se tivermos apenas dois ou menos pontos computados a aproximação para a curvatura é zero, caso contrário resolve-se o sistema (2.35) e tal como descrito pela igualdade (2.36).
- **Passo 4:** por fim, verifica-se o sinal da curvatura pelo sinal resultante do produto entre os vetores normal calculado no centro da célula e o calculado sobre a superfície.

Para verificar este código, no Capítulo 4, são apresentados os testes numéricos realizados e os resultados obtidos.

2.2.3 Demais aproximações sobre a interface

Seja $\omega(s)$ uma curva parametrizada por comprimento de arco que descreve a interface Γ e $\mathbf{x}_c$ um ponto armazenado no centro da célula de coordenadas i, j , como ilustrado na Figura 2.8. Para poder utilizar a projeção normal apresentada na **Definição 5**, é necessário conhecer o vetor normal pelo menos no centro da célula i, j e conhecer a menor

distância entre o ponto no centro da célula e a curva, que é representada na Figura 2.8 por δs , então define-se agora uma região D entorno da interface, como feito anteriormente na seção 2.1, mas sobre a célula do tipo MAC, representada na Figura 2.8.

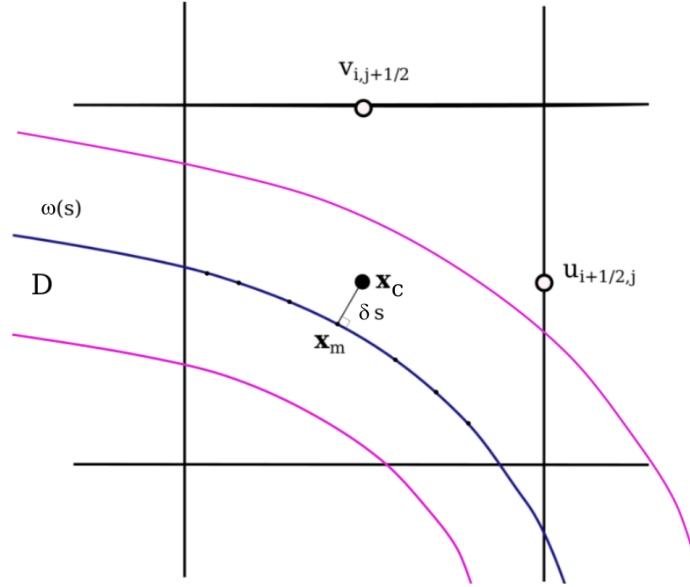


Figura 2.8: Projeção de um ponto do centro da célula sobre a interface.

O vetor normal é calculado pelo algoritmo já implementado e apresentado na seção 2.2.1. Para o seu cálculo é considerada uma medida prescrita δ_{presc} , que é utilizada para determinar uma região circular centrada em $\mathbf{x}_c$ de uma célula $[S]$ no nível i, j . Supondo que estejam compreendidas M partículas marcadoras nesta região circular, utiliza-se o método de mínimos quadrados para aproximar a interface pela função $F(x, y)$ (representada pela reta r na Figura 2.9) e por fim, calculando o gradiente da equação obtida determina-se o vetor normal.

Observe que, ao fazer a construção do vetor normal, obtém-se um segmento de reta com seus extremos sob uma circunferência de raio δ_{presc} e centro em $\mathbf{x}_c$ como ilustrado na Figura 2.9. Então para determinar o ponto sobre a interface de menor distância de $\mathbf{x}_c$ basta determinar o ponto médio do segmento de reta obtido. Considerando que os extremos desse segmento podem ser tomados como sendo os pontos $\mathbf{x}_1 = (x_1, y_1)$ e $\mathbf{x}_M = (x_M, y_M)$, o ponto médio será $\mathbf{x}_m = (\frac{x_1+x_M}{2}, \frac{y_1+y_M}{2})$.

Por resultados de geometria, o segmento tomado é perpendicular ao raio da circunferência e se intersectam sobre o ponto médio do segmento de reta, dessa forma, o vetor normal calculado está definido sobre o ponto médio $\mathbf{x}_m$ e passa por $\mathbf{x}_c$.

Note que quanto mais refinada a malha, mais próximo o segmento de reta estará da interface, dessa forma, o ponto médio $\mathbf{x}_m$ será o que possui a menor distância do centro da célula, e o qual será utilizado como projeção de $\mathbf{x}_c$ sobre a interface.

Em alguns casos, como quando a interface na célula analisada se aproxima de uma reta horizontal, o ponto da interface que é a melhor aproximação pode ser obtido fazendo a média entre as coordenadas x_l , $l = 1, \dots, M$, e obtendo sua respectiva ordenada y_l , para um número M de partículas compreendidas uma distância prescrita do centro da célula, [19]. Neste caso podemos ter a distância entre o ponto $\mathbf{x}_c = (x_c, y_c)$ e $\mathbf{x}_m = (x_m, y_m)$ dada por

$$D(\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_m) = \sqrt{(x_c - x_m)^2 + (y_c - y_m)^2} \quad (2.37)$$

Também pode-se utilizar a reta r dada por $y = ax + b$, que é calculada por mínimos quadrados pelo sistema (2.30), para se determinar o vetor normal. Com esta reta a

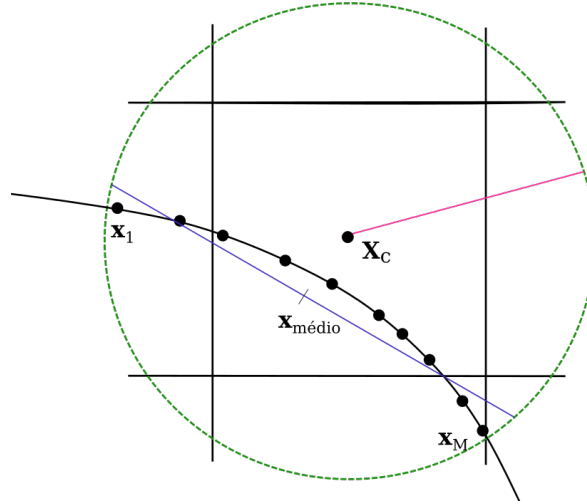


Figura 2.9: Esboço para a determinação do ponto médio.

distância do centro da célula a reta é

$$D(\mathbf{x}_c, r) = \frac{|ax_c - y_c + b|}{\sqrt{x_c^2 + y_c^2}} \quad (2.38)$$

Logo, para determinar a projeção do ponto $\mathbf{x}_c$ sobre a interface, utiliza-se a expressão (2.7), obtendo

$$\Pi_\Gamma(\mathbf{x}_c) = \mathbf{x}_c - \delta s \mathbf{n}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}_c)), \quad (2.39)$$

em que δs assume o papel da função distância ϕ calculada entre o ponto $\mathbf{x}_c$ e sua projeção sobre a interface.

Ao aplicar o teorema da decomposição de Helmholtz-Hodge [8], ao vetor $\mathbf{u}$, considera-se um campo vetorial intermediário $\tilde{\mathbf{u}}$ e uma função escalar ψ , tal que:

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} - \nabla \psi, \quad (2.40)$$

mas para estender esta decomposição a interface, define-se:

Definição 10 *Seja $\mathbf{u} = (u, v)$ um campo vetorial que pertence a faixa em torno da interface definida por D . A velocidade projetada $\mathbf{u}_I = \hat{\mathbf{u}} = (\hat{u}, \hat{v})$ ilustrada na Figura 2.10, onde toma-se $u_I = \hat{u}$ e $v_I = \hat{v}$ para não sobrecarregar a notação, é decomposta nas componentes tangencial e normal a interface, respectivamente:*

$$u_m = u_I m_x + v_I m_y, \quad (2.41)$$

e

$$u_n = u_I n_x + v_I n_y, \quad (2.42)$$

para $\mathbf{m} = (m_x, m_y)$ e $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$.

Então, é possível aplicar o teorema da decomposição as componentes tangencial e normal do campo vetorial $\mathbf{u}$ que estão definidos sobre a interface. Entretanto, o gradiente da função ψ não está definido sobre a interface, e para tal é preciso aplicar o gradiente a função ψ projetada a interface, isto é, fazer $\nabla \hat{\psi}$, que também podemos denotar por $\nabla_\Gamma(\psi)$, como visto na **Definição 7**.

Observe que ao tomar a equação (2.40), com as grandezas já projetadas sobre a interface, e multiplicá-la pelo vetor tangente $\mathbf{m}$, obtemos

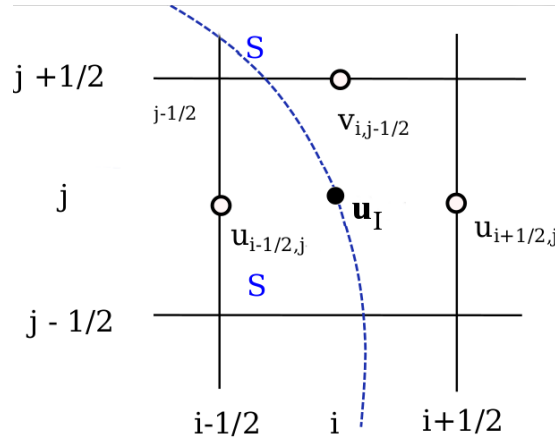


Figura 2.10: Velocidade $\mathbf{u}_I$ projetada sobre a interface em uma célula do tipo MAC.

$$\mathbf{u}_I \cdot \mathbf{m} = \tilde{\mathbf{u}}_I \cdot \mathbf{m} - (\nabla \hat{\psi}) \cdot \mathbf{m}, \quad (2.43)$$

e por definição, $(\nabla \hat{\psi}) \cdot \mathbf{m}$ é dita derivada direcional de ψ na direção tangencial a interface, $\mathbf{m}$. Então define-se o gradiente da função escalar sobre a interface sendo dada a partir da derivada direcional.

Definição 11 *Seja ω a curva parametrizada por comprimento de arco, com parâmetro $s \in \mathbb{R}$, então o gradiente superficial na direção do vetor tangente a curva de uma função escalar ψ , é dado por:*

$$\nabla_{\Gamma} \psi = \frac{d\hat{\psi}}{ds} \quad (2.44)$$

Então é possível escrever a decomposição de Helmholtz-Hodge, para a velocidade tangencial da seguinte forma:

$$u_m = \tilde{u}_m - \frac{d\hat{\psi}}{ds}. \quad (2.45)$$

Se a derivada direcional for aplicada novamente ao gradiente superficial da **Definição 11**, então teremos o laplaciano superficial.

Definição 12 *O laplaciano superficial a partir do **Lema 1** será representado para a função escalar ψ como sendo:*

$$\nabla_{\Gamma}^2 \psi = \frac{d^2 \hat{\psi}}{ds^2} \quad (2.46)$$

2.3 Forma alternativa para definir a condição de tensão normal

Considerando as equações de Navier-Stokes que modelam fluidos newtonianos e incompressíveis em escoamentos com superfície livre, o problema pode ser resolvido pela discretização por diferenças finitas no interior do domínio, considerando a condição de contorno na superfície livre reescrita de uma forma equivalente, porém consistente com o tratamento dos operadores sobre a interface. As equações (1.4) e (1.9) provêm do tratamento da interface, na região delimitada entre o fluido e o ar, de escoamentos incompressíveis. Como encontra-se em Tryggvason et al. [42] e em Prosperetti e Tryggvason [30], baseando-se nos conceitos físicos, é importante ter uma condição para a superfície

livre que descreva bem os efeitos sobre esta, pois nessa região há um salto ou variação de energia uma vez que os fluidos são imiscíveis, e existe uma influência das propriedades que são postas na superfície livre para o cálculo no interior do domínio.

Considere a superfície livre como uma curva regular ω parametrizada por comprimento de arco ($\omega(s) = (x(s), y(s))$), com $\mathbf{m}(s) = (m_x(s), m_y(s))$ e $\mathbf{n}(s) = (n_x(s), n_y(s))$ os vetores tangente e normal unitários, respectivamente, a um ponto $\mathbf{x}(s)$ sobre a curva, como mostra a Figura 2.11. Estes vetores $\mathbf{m}$ e $\mathbf{n}$, que serão utilizados ao longo do estudo, são tais que satisfazem as relações de Frenet-Serret [38], são ortogonais, unitários e uma base o espaço vetorial $\mathbb{R}^2$, apresentadas na seção 1.3.

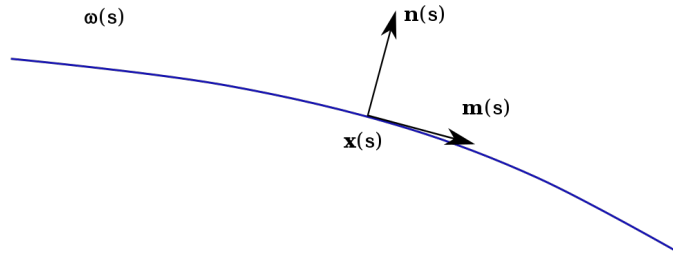


Figura 2.11: Vetores tangente $\mathbf{m}(s)$ e normal $\mathbf{n}(s)$, representados sobre a cura que descreve a interface.

Para dada velocidade $\mathbf{u} = (u, v)$ na região D entorno da interface, define-se a velocidade normal neste ponto como $u_n = u_I n_x + v_I n_y$ e a velocidade tangencial $u_m = u_I m_x + v_I m_y$.

Calculando a derivada normal de $u_n = u_I n_x + v_I n_y$:

$$\frac{\partial u_n(s)}{\partial n} = \frac{\partial}{\partial n}(u_I n_x + v_I n_y), \quad (2.47)$$

que por definição de derivada de uma função de várias variáveis, pode ser escrito da seguinte forma:

$$\frac{\partial u_n(s)}{\partial n} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{u_I(x + hn_x, y + hn_y)n_x + v_I(x + hn_x, y + hn_y)n_y - u_I(x, y)n_x - v_I(x, y)n_y}{h} \quad (2.48)$$

considerando o vetor normal $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ já conhecido e a definição de derivada parcial, reescrevendo:

$$\frac{\partial u_n(s)}{\partial n} = \left(\frac{\partial u_I}{\partial x} n_x + \frac{\partial u_I}{\partial y} n_y \right) n_x + \left(\frac{\partial v_I}{\partial x} n_x + \frac{\partial v_I}{\partial y} n_y \right) n_y \quad (2.49)$$

então,

$$\frac{\partial u_n(s)}{\partial n} = \frac{\partial u_I}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial v_I}{\partial x} + \frac{\partial u_I}{\partial y} \right) n_x n_y + \frac{\partial v_I}{\partial y} n_y^2. \quad (2.50)$$

Calculando a derivada direcional de $u_m = u m_x + v m_y$ sobre a curva

$$\frac{d u_m(s)}{ds} = \frac{d}{ds} (u_I(x(s), y(s))m_x + v_I(x(s), y(s))m_y) \quad (2.51)$$

equivalente à

$$\frac{d u_m(s)}{ds} = \frac{\partial u_I}{\partial x} \frac{dx}{ds} m_x + u_I \frac{dm_x}{dx} + \frac{\partial u_I}{\partial y} \frac{dy}{ds} m_x + \frac{\partial v_I}{\partial x} \frac{dx}{ds} m_y + \frac{\partial v_I}{\partial y} \frac{dy}{ds} m_y + v_I \frac{dm_y}{dy}. \quad (2.52)$$

Uma vez que o conjunto formado por estes vetores $\mathbf{m}$ e $\mathbf{n}$ é um referencial de Frenet da curva ω em s , como apresentado na seção 1.3.1, onde a **Proposição 1** garante que os vetores tangente e normal tomados têm, de fato, norma um. Então, para o cálculo da curvatura, utiliza-se a **Proposição 2** aplicada a curva $\omega(s)$.

Ao definir o vetor tangente a curva em s , como $\mathbf{m}(s) = (\frac{dx}{ds}, \frac{dy}{ds})$, a equação (1.22) permite escrever o vetor normal em função das entradas do vetor tangente e utilizando a relação fornecida pela equação (1.23), a equação (2.52) é reescrita da forma:

$$\frac{du_m(s)}{ds} = \frac{\partial u_I}{\partial x} m_x^2 + \left(\frac{\partial u_I}{\partial y} + \frac{\partial v_I}{\partial x} \right) m_x m_y + \frac{\partial v_I}{\partial y} m_y^2 + \kappa(u_I n_x + v_I n_y). \quad (2.53)$$

Somando as equações (2.50) e (2.53) e usando a condição de conservação de massa, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ definida em Ω ,

$$\frac{\partial u_n}{\partial n} + \frac{du_m}{ds} = \kappa u_n. \quad (2.54)$$

A equação (2.54) pode ser interpretada com a equação da continuidade definida na interface Γ .

Reescrevendo o lado esquerdo da equação (1.9), lembrando da definição do tensor tensão total em (1.5), tem-se uma forma alternativa para definir a condição de tensão normal para as grandezas definidas sobre a interface, sendo:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^t = -\hat{p} + \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u_n}{\partial n} \right), \quad (2.55)$$

pela derivada normal da velocidade normal (2.50), obtém-se:

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}^t = -\hat{p} + \frac{2}{Re} \left[\frac{\partial u_I}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial u_I}{\partial y} + \frac{\partial v_I}{\partial x} \right) n_x n_y + \frac{\partial v_I}{\partial y} n_y^2 \right], \quad (2.56)$$

Então, a partir da relação (2.54), a condição de tensão normal com a formulação do laplaciano superficial pode ser definida.

Definição 13 *Considerando efeitos de tensão superficial, a condição de tensão normal pela formulação laplaciano superficial é descrita por:*

$$-\hat{p} + \frac{2}{Re} \left(-\frac{du_m}{ds} + \kappa u_n \right) = \frac{\kappa}{We}. \quad (2.57)$$

Lembrando que os parâmetros adimensionais Re e We foram dados pelas equações (1.6) e (1.9), respectivamente.

A equação (2.57), pode ser escrita baseando-se nos operadores e definições apresentadas ao longo deste capítulo, sendo

$$-\hat{p} + \frac{2}{Re} (-\nabla_\Gamma(\mathbf{u} \cdot \mathbf{m}) + \kappa(\mathbf{u}_I \cdot \mathbf{n})) = \frac{\kappa}{We}. \quad (2.58)$$

Detalhes sobre a aproximação numérica a ser considerada, métodos utilizados para a discretização e descrição do algoritmo são apresentados no capítulo 3.

Método laplaciano superficial via método da projeção

Neste capítulo são apresentados detalhes numéricos para utilizar o tratamento proposto. Sobre a superfície livre, aplica-se a formulação laplaciano superficial, com a discretização da equação (2.57), que ocorre apenas nas células do tipo [S].

Para o interior do domínio, discretiza-se as equações via método das projeções, considerando uma malha cartesiana deslocada e utilizando como condição de contorno a solução do sistema originário da formulação laplaciano superficial que envolve ψ .

3.1 Método de projeção para escoamentos confinados

No domínio cartesiano, em uma dada célula $C_{i,j}$, considere o espaçamento na direção x dado por Δx e na direção y por Δy , utiliza-se o método de projeção para se resolver a equação (1.6) de maneira desacoplada, assim, pelo teorema da decomposição de Helmholtz-Hodge [8], defini-se um campo vetorial intermediário $\tilde{\mathbf{u}}$ por

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \frac{1}{Re} \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}} + \frac{1}{Fr^2} \mathbf{g}, \quad (3.1)$$

As velocidades finais são atualizadas a partir da solução encontrada para a função escalar ψ e pela velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}$, utilizando a equação (2.40).

Fazendo a discretização em cada célula $C_{i,j}$ do interior do domínio, em um nível de tempo $t = t_{n+1}$, com um passo temporal δt

$$\tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \frac{\delta t}{Re} \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^n - \delta t \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n - \delta t \nabla \tilde{p}^{n+1} + \frac{\delta t}{Fr^2} \mathbf{g}^{n+1}, \quad (3.2)$$

considerando a velocidade intermediária no nível de tempo anterior como $\tilde{\mathbf{u}}^n = \mathbf{u}^n$, o termo convectivo $\nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u})^n$ discretizado pelo esquema CUBISTA [20, 27], a pressão tentativa é tomada como $\tilde{p}^{n+1} = p^n$ e o campo de forças representado por $\mathbf{g}$, será considerado apenas como a força gravitacional, sendo constante em todo passo temporal.

As condições de contorno empregadas neste trabalho são as mesmas tratadas na metodologia GENSMAC (*GENeralized Simplified Marker-and-Cell*), que estão descritas no trabalho de Pacanelli [20].

Ao aplicar o divergente a equação (2.40) determina-se a função escalar ψ :

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \nabla^2 \psi^{n+1}, \quad (3.3)$$

que pela a equação da continuidade (1.1), reescreve-se:

$$\nabla^2 \psi^{n+1} = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}, \quad (3.4)$$

e discretizando por diferenças centradas em $C_{i,j}$:

$$\frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = \frac{\tilde{u}_{i+\frac{1}{2},j} - \tilde{u}_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} + \frac{\tilde{v}_{i,j+\frac{1}{2}} - \tilde{v}_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y}. \quad (3.5)$$

Tendo ψ e a velocidade intermediária, utiliza-se a equação (3.6), para determinar o campo de velocidade final:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1} - \nabla \psi^{n+1}, \quad (3.6)$$

finalmente obtendo os campos de velocidade finais, através da decomposição:

$$\mathbf{u}_{i,j}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}_{i,j}^{n+1} - \nabla \psi_{i,j}^{n+1}. \quad (3.7)$$

Para a atualização da pressão, utiliza-se a equação (3.8):

$$p_{i,j}^{n+1} = p_{i,j}^n + \frac{\psi_{i,j}^{n+1}}{\delta t}. \quad (3.8)$$

3.2 Método laplaciano superficial

Segundo Oishi et al. [26], para construir um esquema estável para escoamentos com superfície livre, é necessário discretizar a condição de tensão normal implicitamente. Então, pela **Definição 13**, discretiza-se a equação (2.57) no nível de tempo $(n+1)$

$$\hat{p}^{n+1} + \frac{2}{Re} \left(\frac{du_m}{ds} - \kappa u_n \right)^{n+1} = -\frac{\kappa}{We}. \quad (3.9)$$

Baseado no teorema da decomposição de de Helmholtz-Hodge [8], considera-se a função escalar ψ , que deve ser projetada sobre a interface para se resolver a nova formulação, dessa forma toma-se $\hat{\psi}$ e um campo de velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}$, também definido sobre a interface, elementos projetados sobre a interface, fazendo a discretização no tempo t_{n+1} :

$$\mathbf{u}_I^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}_I^{n+1} - \nabla \hat{\psi}^{n+1}. \quad (3.10)$$

Da equação (3.10), o campo de velocidade tangencial é calculado sobre a interface e é atualizada por:

$$u_m^{n+1} = \tilde{u}_m^{n+1} - \frac{d\hat{\psi}^{n+1}}{ds}. \quad (3.11)$$

A pressão sobre a interface é atualizada pela (3.8), considerando a pressão e a função escalar ψ definidas sobre a interface:

$$\hat{p}^{n+1} = \hat{p}^n + \frac{\hat{\psi}^{n+1}}{\delta t}. \quad (3.12)$$

Substituindo (3.11) e (3.12) em (3.9):

$$\left(\hat{p}^n + \frac{\hat{\psi}^{n+1}}{\delta t} \right) + \frac{2}{Re} \left[\frac{d}{ds} \left(\tilde{u}_m^{n+1} - \frac{d\hat{\psi}^{n+1}}{ds} \right) - \kappa u_n^{n+1} \right] = -\frac{\kappa}{We} \Rightarrow$$

$$\frac{\hat{\psi}^{n+1}}{\delta t} + \frac{2}{Re} \left(\frac{d^2 \hat{\psi}^{n+1}}{ds^2} - \kappa u_n^{n+1} \right) = -\frac{2}{Re} \frac{d\tilde{u}_m^{n+1}}{ds} - \frac{\kappa}{We} - \hat{p}^n. \quad (3.13)$$

Para facilitar os cálculos o valor da curvatura κ e dos vetores $\mathbf{m}$ e $\mathbf{n}$, são tomados como sendo o valor já calculado no nível de tempo $t = t_n$ e tendo a velocidade normal aproximada como a do nível anterior, no tempo t_n e denotado $u_n = \mathbf{u}_I^n \cdot \mathbf{n}$ e $\tilde{u}_m = \tilde{\mathbf{u}}_I^{n+1} \cdot \mathbf{m}$, a formulação a ser implementada será:

$$\frac{\hat{\psi}^{n+1}}{\delta t} + \frac{2}{Re} \left(-\frac{d^2 \hat{\psi}^{n+1}}{ds^2} \right) = \frac{2}{Re} \left(\kappa u_n - \frac{d\tilde{u}_m}{ds} \right) - \frac{\kappa}{We} - \hat{p}^n. \quad (3.14)$$

Observe que a velocidade normal u_n não é decomposta de forma equivalente a decomposição de Helmholtz-Hodge, fazendo $\mathbf{u}_n^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}_I^{n+1} + \frac{\partial \hat{\psi}^{n+1}}{\partial \mathbf{n}}$, pois esta aproximação torna o sistema de equações da formulação laplaciano superficial acoplado ao sistema de equações (3.4). Assim, as velocidades sobre a interface são tomadas no instante de tempo $t = t_n$, isto é, assumi-se u_I^n e v_I^n , para manter os sistemas de equações tridiagonais e desacoplados.

Portanto, tendo a formulação completa, resolve-se (3.14) para determinar ψ sobre a interface, e este será a condição de contorno empregado na superfície livre para calcular ψ e $\tilde{\mathbf{u}}$ no interior do domínio pela equação (3.4), considerando que ψ representa a variável que foi projetada da interface para o centro da célula. Determinando a velocidade final $\mathbf{u}^{n+1}$, na malha deslocada por (3.6), e por fim a pressão final por (3.8), também da malha deslocada.

As velocidades tangenciais e normais podem ser atualizadas pelas relações: $u_m = u_I m_x + v_I m_y$ e $u_n = u_I n_x + v_I n_y$. A curvatura, o vetor tangente e o vetor normal são considerados constantes e podem ser calculados do mesmo modo que foi apresentado na seção 2.2.1. Restando apenas compreender como melhor fazer as aproximações para cada termo da formulação final (3.14).

3.3 Discretização do método

Para a discretização das equações sobre a interface, considere $C_{i,j}$ uma célula do tipo [S], como na Figura 3.1. Nesta geometria se faz primeiramente a projeção das velocidades sobre a interface, como apresentado na seção 2.1, então é aproximado o valor da função escalar ψ sobre a interface resolvendo a formulação proposta (3.14).

Escrevendo a discretização da equação (3.14) na célula $C_{i,j}$:

$$\frac{\hat{\psi}_{i,j}^{n+1}}{\delta t} + \frac{2}{Re} \left(-\frac{d^2 \hat{\psi}^{n+1}}{ds^2} \Big|_{i,j} \right) = \frac{2}{Re} \left(\kappa_{i,j} u_{n,i,j}^n - \frac{d\tilde{u}_m^{n+1}}{ds} \Big|_{i,j} \right) - \frac{\kappa_{i,j}}{We} - p_{i,j}^n. \quad (3.15)$$

As quantidades expressas em função de suas derivadas, isto é, os termos em que aparece derivada, são aproximados por diferenças finitas calculadas sobre a interface. Para a derivada direcional de segunda ordem da função ψ , equivalente ao laplaciano superficial, é feito uma diferença centradas de segunda ordem:

$$\frac{d^2 \hat{\psi}^{n+1}}{ds^2} \Big|_{i,j} = \frac{\hat{\psi}_{i-1,j}^{n+1} - 2\hat{\psi}_{i,j}^{n+1} + \hat{\psi}_{i,j-1}^{n+1}}{(\Delta s)^2}, \quad (3.16)$$

em que Δs é o comprimento de arco entre as projeções $\hat{\psi}_{i-1,j}$, $\hat{\psi}_{i,j}$ e $\hat{\psi}_{i,j-1}$, que pode ser calculado medindo a distância entre os pontos projetados sobre a interface, como apresentado na **Definição 5**, $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}_{i-1,j})$, $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}_{i,j})$ e $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}_{i,j-1})$. Este comprimento de arco

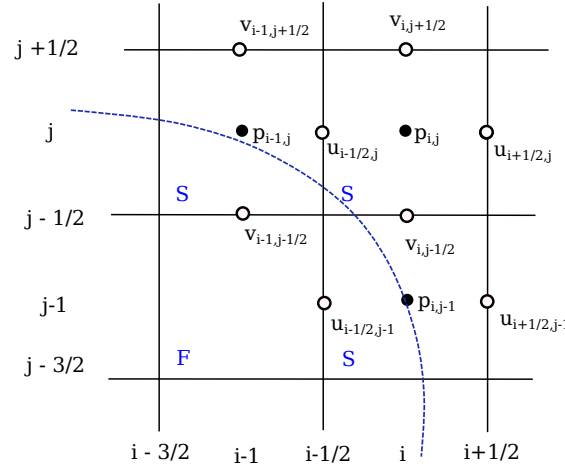


Figura 3.1: Esboço de um dos casos possíveis para a descrição das células que descrevem a interface

é diferente para cada célula, mas para malhas mais finas é suposto, para uma primeira aproximação, que estes pontos são igualmente espaçados. Para aplicar o método de diferenças finitas centradas de segunda ordem com malhas que não são igualmente espaçadas, pode-se fazer uma interpolação polinomial como sugere Fortuna [11].

A derivada sobre a velocidade tangencial por diferenças centradas é:

$$\left. \frac{du_m}{ds} \right|_{i,j} = \left. \frac{du_m}{ds} \right|_{i,j} = \frac{u_{m_{i-1,j}} - u_{m_{i,j-1}}}{2\Delta s}. \quad (3.17)$$

Nos casos em que se tem uma célula que determina uma fronteira rígida, diz-se que a célula é do tipo [B]. Quando se faz a discretização em uma célula [S] adjacente a uma [B], é necessário mudar a aproximação, então caso a célula $C_{i,j-1}$ seja do tipo [B], por exemplo, será utilizada uma aproximação progressiva, da forma:

$$\left. \frac{du_m}{ds} \right|_{i,j} = \left. \frac{du_m}{ds} \right|_{i,j} = \frac{u_{m_{i-1,j}} - u_{m_{i,j}}}{\Delta s}. \quad (3.18)$$

Caso a célula $C_{i-1,j}$ seja do tipo [B], a aproximação utilizada será regressiva.

Para determinar a velocidade normal e a velocidade tangencial que aparece no lado direito da equação (3.15) é realizada uma média das velocidades gravadas nas faces da célula $C_{i,j}$, e essa média decomposta na direção normal, por exemplo, pode ser feita da forma:

$$u_{n_{i,j}} = \frac{u_{i-\frac{1}{2},j} + u_{i+\frac{1}{2},j}}{2} n_x + \frac{v_{i,j-\frac{1}{2}} + v_{i,j+\frac{1}{2}}}{2} n_y, \quad (3.19)$$

Observe que para fazer estas aproximações é importante ter uma ordem para percorrer as células, para manter uma coerência mesmo percorrendo a interface. Nesta discretização é fixado o sentido anti-horário para considerar os pontos a fazer as discretizações.

A condição de tensão tangencial (1.4), manterá uma discretização explícita como em [40] visando manter a programação já implementada no código e a seguir, como proposto em [25] é necessário fazer algumas manipulações nas equações governantes para discretizar da forma implícita a condição de tensão normal na superfície livre envolvendo apenas sistemas lineares.

3.4 Algoritmos

3.4.1 Algoritmo para a formulação implícita MAC

O código já implementado no sistema *Freeflow 2D* [20, 26], tem a proposta de resolver a equação de Poisson, que determina ψ , para o interior juntamente com a interface.

Para apresentar a ideia da programação padrão que é utilizada hoje no sistema *Freeflow 2D*, para fazer simulações de escoamentos com superfície livre e que consideram tensão superficial, será apresentado o algoritmo do método na formulação implícita proposta por Oishi et al. [26].

Seja, em $t = t_0$, o campo de velocidade $\mathbf{u}$ e o campo de pressão p dados pela condição inicial do problema, e as condições de contorno para o campo de velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}$ são as mesmas condições de $\mathbf{u}$. Então a atualização para o campo de velocidade $\mathbf{u}$ e para o campo de pressão p , em um instante de tempo adimensional $t = t_0 + \delta t$, seguem os passos elencados:

- **Passo 1:** O campo de velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ é calculado pela equação (3.2) para todo o domínio.
- **Passo 2:** A equação (3.4) é resolvida junto a condição de contorno para a superfície livre (1.9). Onde a equação (1.9) é equivalente à:

$$p^{n+1} - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial x} \right) n_x n_y + \frac{\partial v^{n+1}}{\partial y} n_y^2 \right) = \frac{\kappa}{We} \quad (3.20)$$

e utilizando as equações (3.6) e (3.8), a equação para determinar ψ sobre a superfície livre é

$$\begin{aligned} & \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} - \frac{2}{Re} \left(\frac{\partial^2 \psi^{n+1}}{\partial x^2} n_x^2 - 2 \frac{\partial^2 \psi^{n+1}}{\partial x \partial y} n_x n_y + \frac{\partial^2 \psi^{n+1}}{\partial y^2} n_y^2 \right) = \\ & = \frac{2}{Re} \left(-\frac{\partial \tilde{u}^{n+1}}{\partial x} n_x^2 + \left(\frac{\partial \tilde{u}^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}^{n+1}}{\partial x} \right) n_x n_y - \frac{\partial \tilde{v}^{n+1}}{\partial y} n_y^2 \right) + \frac{\kappa}{We} - \tilde{p}^{n+1}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Dessa forma, resolve-se de maneira acoplada a equação (3.4) para células no interior do domínio e a equação (3.21) para células da superfície livre, o que gera um sistema linear não simétrico.

- **Passo 3:** A velocidade final é calculada por (3.6) no interior do domínio, com as equações (1.1) e (1.4).
- **Passo 4:** A pressão é atualizada pela equação:

$$p^{n+1} = \tilde{p}^{n+1} + \frac{\psi^{n+1}}{\delta t} \quad (3.22)$$

- **Passo 5:** Considerando que a formulação pretende tratar de problemas com superfície livre, o movimento da interface deve ser atualizada por (1.10).

3.4.2 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-1

Considere que não será realizada a projeção das quantidades definidas sobre a malha para a interface, apenas toma-se essas quantidades no centro das células $C_{i,j}$, e resolve-se o sistema (3.14), que será utilizado como condição de contorno para resolver a equação (3.4).

Para resolver o sistema gerado pela equação (3.14), são consideradas todas as possíveis combinações de células [S], e para cada uma é utilizada a estratégia de aproximação das derivadas, como ilustrado na seção 3.2 pela Figura 3.1 para um caso particular.

Os parâmetros que são necessários para a solução desta formulação são os vetores tangenciais e normais, a curvatura aproximada em cada célula e o comprimento de arco Δs . O vetor normal é calculado pelo método dos mínimos quadrados como apresentado no início da seção 2.2.1. Os vetores tangentes são determinados a partir destes vetores normais tomados, pela relação de Frenet-Serret vista na seção 1.3, que respeita a **Proposição 3**. A curvatura é tomada numericamente pelo método apresentado na seção 2.2.1.

Para os testes numéricos, o comprimento de arco é aproximado ao longo de toda interface, utilizando relações geométricas que envolvem os espaçamentos Δx e Δy . Considerando iguais o comprimento de arco entre as células [S] vizinhas da célula de discretização, para permitir utilizar a aproximação (3.16), como foi apresentada.

Considere que em $t = t_0$ o campo de velocidade $\mathbf{u}$ e o campo de pressão são conhecidos, e as condições de contorno para o campo de velocidade intermediária $\tilde{\mathbf{u}}$ são as mesmas condições de $\mathbf{u}$. Então a atualização para o campo de velocidade $\mathbf{u}$ e para o campo de pressão p , em um instante de tempo adimensional $t = t_0 + \delta t$, seguem os mesmos passos dados na formulação MAC *Freeflow*, a menos de algumas mudanças.

O **Passo 2** da seção 3.4.1, será modificado nos dois passos a seguir na formulação laplaciano superficial (Laplaciano-1):

- **Passo 2.1 Laplaciano –1:** A equação (3.15) é resolvida fornecendo ψ^{n+1} sobre a superfície livre, utilizando para a velocidade tangencial as componentes da velocidade que estão alocadas nas faces da célula, voltadas para o interior do fluido, e para a velocidade normal, utiliza-se a equação (3.19);
- **Passo 2.2 Laplaciano –1:** resolve-se a equação (3.4), utilizando os valores calculados para ψ^{n+1} sobre a interface, como condição de contorno.

A pressão também é atualizada de maneira um pouco diferente, onde nesta formulação o **Passo 4**, da seção 3.4.1, é reescrito:

- **Passo 4 Laplaciano –1:** A pressão é atualizada pela equação (3.12).

Para tentar aprimorar o modelo numérico e torná-lo mais consistente com a formulação proposta, são sugeridas duas variações da formulação laplaciano superficial, as quais projetam realmente os campos de velocidade sobre a interface. Estas variações são apresentadas nas seções 3.4.3 e 3.4.4.

3.4.3 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-2

Para aproximar os campos de velocidade das células sobre a interface, um dos possíveis métodos é fazer uma interpolação bi-linear como projeção. Assim, as quantidades como função escalar ψ e a pressão p são consideradas ainda no centro das células e as velocidades serão projetadas sobre a interface pela interpolação.

A cada célula do tipo [S] as componentes da velocidade são aproximadas sobre a interface, e para tal, é necessário determinar o ponto sobre a interface no qual serão realizadas as projeções. Como foi apresentado na seção 2.2.3, em dada célula $C_{i,j}$ da discretização, o ponto $\mathbf{x}_c$ é projetado sobre a interface e seguindo a **Definição 5**, sua projeção será denominada $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$ e coincide com alguma das partículas marcadoras utilizadas na malha lagrangeana.

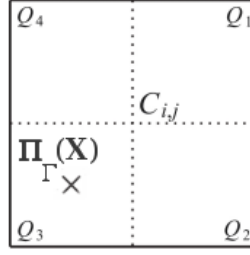


Figura 3.2: Quadrante onde a projeção do ponto do centro se encontra.

Para a interpolação bi-linear determina-se primeiramente o quadrante em que a partícula $\Pi_{\Gamma}(\mathbf{x})$ está, calculando a distância entre as coordenadas do ponto do centro da célula $\mathbf{x}_c$ e esta partícula e verificando seu sinal.

Se por exemplo, a partícula se encontra no terceiro quadrante como ilustra a Figura 3.2, utilizando as células mais próximas deste quadrante, aplica-se interpolação linear na direção x e na direção y . Para a componente da velocidade u , como mostra a Figura 3.3 (a), se aplica interpolação linear na direção x e, em seguida, na direção y :

$$u_B = \frac{x_{\Pi} - x_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i-\frac{1}{2}} - x_{i+\frac{1}{2}}} u_{i-\frac{1}{2},j-1} + \frac{x_{\Pi} - x_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} u_{i+\frac{1}{2},j-1}, \quad (3.23)$$

$$u_T = \frac{x_{\Pi} - x_{i+\frac{1}{2}}}{x_{i-\frac{1}{2}} - x_{i+\frac{1}{2}}} u_{i-\frac{1}{2},j} + \frac{x_{\Pi} - x_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} u_{i+\frac{1}{2},j}, \quad (3.24)$$

$$u_I = \frac{y_{\Pi} - y_{j-1}}{y_j - y_{j-1}} u_T + \frac{y_{\Pi} - y_j}{y_{j-1} - y_j} u_B. \quad (3.25)$$

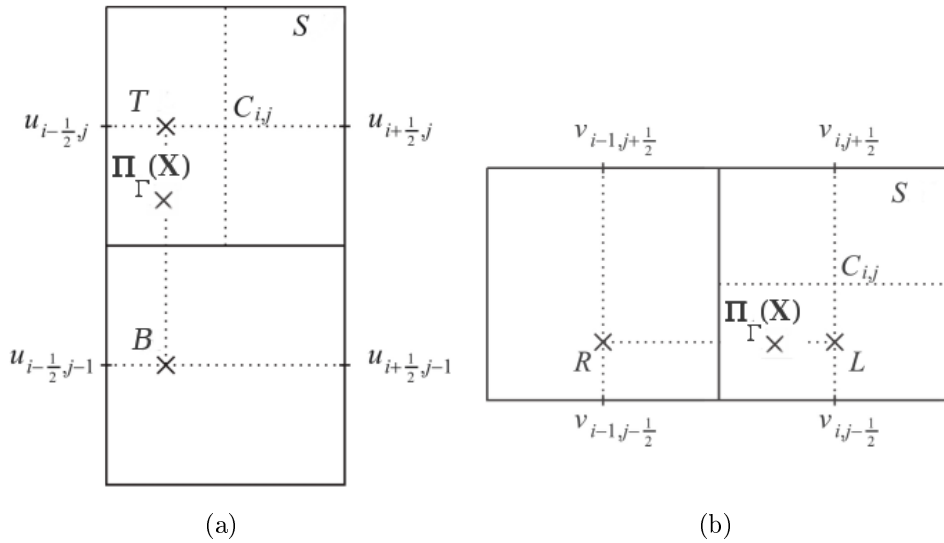


Figura 3.3: Esquema de interpolação bi-linear para a velocidade.

O mesmo se faz para a componente v da velocidade, mas primeiro aplicando interpolação linear na direção y e depois na direção x , como ilustrado na Figura 3.3 (b) e descrito pelas equações (3.26)-(3.28).

$$v_R = \frac{y_\Pi - y_{j+\frac{1}{2}}}{y_{j-\frac{1}{2}} - y_{j+\frac{1}{2}}} v_{i-1,j-\frac{1}{2}} + \frac{y_\Pi - y_{j-\frac{1}{2}}}{y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j-\frac{1}{2}}} v_{i-1,j+\frac{1}{2}}, \quad (3.26)$$

$$v_L = \frac{y_\Pi - y_{j+\frac{1}{2}}}{y_{j-\frac{1}{2}} - y_{j+\frac{1}{2}}} v_{i,j-\frac{1}{2}} + \frac{y_\Pi - y_{j-\frac{1}{2}}}{y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j-\frac{1}{2}}} v_{i,j+\frac{1}{2}}, \quad (3.27)$$

$$v_I = \frac{x_\Pi - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} v_L + \frac{x_\Pi - x_i}{x_{i-1} - x_i} v_R, \quad (3.28)$$

para $\mathbf{u}_I = (u_I, v_I)$, $\mathbf{x}_c = (x_c, y_c)$ e $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = (x_\Pi, y_\Pi)$. Se a equação **Definição 13** é aplicada sobre a interface então é necessário utilizar as definições dos operadores sobre a superfície, isto é, resolver a equação (3.15), agora com as componentes da velocidade aproximadas por interpolação bi-linear.

Os passos do algoritmo com esta modificação da formulação são os mesmos dos apresentados para a formulação laplaciano superficial –1, da seção 3.4.2, exceto pelos novos cálculos necessários, onde o **Passo 2** da seção 3.4.2, será alterado para os passos a seguir:

- **Passo 2.1 Laplaciano –2:** Para determinar o campo de velocidades $\mathbf{u}_I$ em todas as células do tipo [S], resolvem-se as equações (3.23)-(3.28);
- **Passo 2.2 Laplaciano –2:** A equação (3.15) é resolvida utilizando as velocidades u_I e v_I obtidas no passo anterior, fornecendo ψ^{n+1} sobre a superfície livre;
- **Passo 2.3 Laplaciano –2:** resolve-se a equação (3.4), utilizando os novos valores calculados para ψ^{n+1} sobre a interface, como condição de contorno.

Sendo os demais passos mantidos para atualização da pressão e o campo de velocidade final.

3.4.4 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-3

Outra possibilidade para projetar o campo de velocidade sobre a interface é utilizar a função de distribuição apresentada no trabalho de Unverdi e Tryggvason [43], definida como:

$$D(\mathbf{x} - \Pi_\Gamma(\mathbf{x}_c)) = \begin{cases} (4h)^2 \prod_{i=1}^d [1 + \cos(\frac{\pi}{2h}(x_i - y_{\Pi_i}))], & \text{se } |x_i - y_{\Pi_i}| < 2h, i = 1, 2, \dots, d \\ 0, & \text{senão.} \end{cases} \quad (3.29)$$

em que d representa a dimensão do espaço, e como este trabalho trata problemas bidimensionais considere que $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ é o ponto que determina o centro da célula $C_{i,j}$ da discretização para cada célula do tipo [S], $\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) = (y_{\Pi_1}, y_{\Pi_2})$ é a projeção do ponto $\mathbf{x}_c$ do centro da célula de discretização, como apresentado na **Definição 5** e tratada na seção 2.2.3, e em particular, neste trabalho considera-se $h = \Delta x = \Delta y$

Dessa forma, um campo vetorial definido no centro da malha deslocada, como a velocidade $\mathbf{u}_I = (u_I, v_I)$ pode ser projetado para a interface fazendo:

$$\mathbf{u}_I(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}_c)) = \sum_l D(\mathbf{x}_l - \Pi_\Gamma(\mathbf{x}_c)) \mathbf{u}(\mathbf{x}_l). \quad (3.30)$$

Este somatório, para cada célula de discretização, fixa um ponto $\mathbf{x}_c = (x_c, y_c)$ centro da célula $C_{i,j}$ e percorre todas as células da malha utilizando a função de distribuição (3.29), em que $\mathbf{x}_l = (x_l, y_l)$ é o ponto do centro de cada nova célula percorrida em uma vizinhança que dista até $2h$ do ponto $\mathbf{x}_c$ centro da célula em que ocorre a discretização.

O algoritmo para esta variação da formulação também altera o segundo passo do algoritmo apresentado na seção 3.4.2, sendo este:

- **Passo 2.1 Laplaciano –3:** Para cada ponto projetado $\Pi_\Gamma(\mathbf{x})$, percorre-se as células da malha verificando a função de distribuição e atualizando as componentes da velocidade pela equação (3.30).
- **Passo 2.2 Laplaciano –3:** Utilizando as velocidades aproximadas pela equação (3.30), resolve-se a equação (3.15) determinando ψ^{n+1} sobre a superfície livre.
- **Passo 2.3 Laplaciano –3:** Resolve-se a equação (3.4), utilizando os novos valores calculados para ψ^{n+1} sobre a interface, como condição de contorno.

3.4.5 Algoritmo para a formulação laplaciano superficial-4

Se ao tomar a equação (2.57) no nível de tempo $(n + 1)$, pela **Definição 13**, e fazer uma nova aproximação, agora para a velocidade normal u_n da forma:

$$u_n^{n+1} = \tilde{u}_n^{n+1} - \frac{\partial \psi^{n+1}}{\partial n}. \quad (3.31)$$

Combinando a aproximação (3.31) para velocidade normal u_n , a aproximação dada pela equação (3.11) para a velocidade tangencial u_m e atualizando o campo de pressão pela expressão (3.12), a equação (2.57) no nível de tempo $(n + 1)$ é discretizada da forma:

$$\hat{p}^n + \frac{\hat{\psi}^{n+1}}{\delta t} + \frac{2}{Re} \left[\frac{d}{ds} \left(\tilde{u}_m^{n+1} - \frac{d\hat{\psi}^{n+1}}{ds} \right) - \kappa \left(\tilde{u}_n^{n+1} - \frac{\partial \hat{\psi}^{n+1}}{\partial n} \right) \right] = - \left(\frac{\kappa}{We} \right)^{n+1}, \quad (3.32)$$

equivalente a:

$$\frac{\hat{\psi}^{n+1}}{\delta t} + \frac{2}{Re} \left[-\frac{d^2 \hat{\psi}^{n+1}}{ds^2} + \kappa \frac{\partial \hat{\psi}^{n+1}}{\partial n} \right] = \frac{2}{Re} \left(\kappa \tilde{u}_n^{n+1} - \frac{d\tilde{u}_m^{n+1}}{ds} \right) - \hat{p}^n - \frac{\kappa}{We}. \quad (3.33)$$

As aproximações para as derivadas são as mesmas já descritas na seção 3.3, com atenção para a derivada normal presente na equação (3.33).

Como neste projeto são tratados escoamento com superfície livre, a aproximação da derivada na direção normal deve possuir apenas informações que envolvem a interface e o interior do fluido, dessa forma, a derivada na direção normal será aproximada por diferenças regressivas ou progressivas, tendo atenção a configuração das células do tipo [S]. No caso de uma célula [S] ter uma célula vizinha do tipo [F] a esquerda, então a direção normal a interface que deve ser tomada é a direção do eixo x , e assim

$$\frac{\partial \psi^{n+1}}{\partial n} = \frac{\partial \psi^{n+1}}{\partial x}, \quad (3.34)$$

derivada esta que será aproximada por diferenças regressivas.

Para o algoritmo desta variação, novamente se altera o **passo 2** do algoritmo apresentado na seção 3.4.1, sendo:

- A equação (3.33) definida sobre a interface agora deve ser resolvida junto a equação de poisson (3.4) para o interior do domínio, resolvendo-se apenas um sistema, o qual acopla as informações da interface e interior do domínio.
- Os demais passos se mantêm.

Resultados numéricos

Neste capítulo são apresentados resultados das simulações numéricas realizadas para validação da nova formulação. As comparações são feitas entre as variações do laplaciano superficial sugeridas neste trabalho e a formulação que considera tensão normal clássica (1.9), que ao ser tratada de forma implícita gera o método MAC implícito [21, 20, 25, 26].

São realizados testes de precisão para avaliar a formulação implementada, comparando os resultados numéricos com soluções de referência e um teste *fountain flow* que avalia a estabilidade numérica do método.

Para os testes que serão realizados nesta seção são considerados o tempo adimensional e os seguintes passos adimensionais:

- M_1 : $\Delta x = \Delta y = 0.2$;
- M_2 : $\Delta x = \Delta y = 0.1$;
- M_3 : $\Delta x = \Delta y = 0.05$;
- M_4 : $\Delta x = \Delta y = 0.025$;
- M_5 : $\Delta x = \Delta y = 0.0125$;
- M_6 : $\Delta x = \Delta y = 0.00625$.

4.1 Cálculo da curvatura

Para verificação do código implementado para o cálculo da curvatura é realizado um teste de malha verificando o valor médio da curvatura calculada numericamente para o estudo de uma gota na forma de uma circunferência de raio $r = 0.5$.

A curvatura exata pode ser calculada facilmente para uma circunferência e tem sua expressão dada por $\kappa = \frac{1}{r}$, onde r é o raio da circunferência, dessa forma, vamos tomar o erro relativo, dado por:

$$E_{relativo} = \frac{|\kappa - \kappa_{exato}|}{|\kappa_{exato}|} \quad (4.1)$$

para κ a curvatura calculada numericamente e para conferir a ordem do erro cometido em cada malha apresentamos a Tabela 4.1. Considerando as malhas M_3, M_4, M_5 e M_6 uniformes, isto é, que tenham o mesmo espaçamento em x e em y , onde faremos as aproximações para a curvatura.

Tabela 4.1: Erro relativo da aproximação da curvatura em diferentes malhas.

Malha	Curvatura média	Erro relativo
M_3	2.062651	$6.4493 \cdot 10^{-2}$
M_4	2.027054	$3.4564 \cdot 10^{-2}$
M_5	2.014275	$9.852 \cdot 10^{-3}$
M_6	2.006875	$7.819 \cdot 10^{-3}$

Analisando a tabela podemos observar que quanto mais fina a malha, mais precisa é a aproximação da curvatura numérica e assim, o erro relativo ficam melhores quando refinamos a malha.

Para a verificação da formulação proposta neste trabalho, são apresentadas algumas simulações para problemas 2D, comparando as simulações do código implementado com as simulações da formulação implícita MAC [26].

Para os testes apresentados a seguir, são considerados passos temporais que satisfazem as restrições de estabilidade, sendo estas dadas por:

- **Restrição CFL:**

$$\delta t_{CFL} \leq \frac{\Delta x}{U}, \quad (4.2)$$

- **Restrição a tensão superficial:**

$$\delta t_{TS} \leq \sqrt{\frac{(\Delta x)^3 \rho}{4\gamma\pi}}. \quad (4.3)$$

Em que Δx é o espaçamento da malha, U é a velocidade de escala, ou velocidade característica, ρ a densidade do fluido, γ é a constante de tensão superficial e $\pi \approx 3.1416$.

4.2 Gota oscilante

Considere uma gota circular de raio inicial $1.0m$ e aplicada a ela uma perturbação na direção do eixo x , de forma a obter uma elipse, estática, desprezando forças de campo como gravidade e sobre os efeitos da tensão superficial, problema no qual as únicas condições de contorno são as impostas pela superfície livre.

Para este problema foram estudados alguns artigos que fizeram o teste numérico para o problema da gota oscilante, nos trabalhos de Watanabe [45, 46] resolve-se o problema para três dimensões usando método de level set e uma formulação de dois fluidos. Em seu primeiro artigo são verificadas diferentes frequências de oscilação para perturbação da gota e em [46], pode-se encontrar uma comparação de resultados que avaliam a relação entre amplitude da gota e o tempo para diferentes valores de Reynolds alto e número de Weber fixo ($We \geq 20$), gerando uma maior frequência de oscilações.

No trabalho de Montefusco, Sousa e Buscaglia [24], são usados métodos ALE (*arbitrary Lagrangian-Eulerian*) para problemas tridimensionais axissimétricos, e neste trabalho se referem a o número adimensional Oh , dito número de Ohnesorge e definido como $Oh = \frac{\mu}{\sqrt{\rho\gamma L}}$. Montefusco, Sousa e Buscaglia [24] consideram $Oh = 1.95 \times 10^{-2}$ para obter oscilações que tem amplitudes fracamente amortecidas.

Os trabalhos [17, 35, 41], tratam problemas bidimensionais considerando uma formulação dois fluidos, tomam baixos valores para viscosidade dinâmica e para a constante de tensão superficial, o que seria equivalente a ter altos números de Reynolds. Em que o trabalho de Tryggvason et al. [41] e Strubelj, Tiselj e Mavko [35] utilizam uma discretização sobre malhas eulerianas e Hou et al. [17] trata casos bidimensionais axissimétricos.

Tomando que os problemas na literatura para este teste em questão usam altos valores de Reynolds, ou ainda, viscosidade baixa, optou-se por seguir parâmetros como os apresentados nos artigos citados nesta seção, comparando as simulações numéricas com a solução pseudo-analítica.

Os dados empregados para esta simulação são:

- Domínio: $x \in [0.0, 3.0]m$, $y \in [0.0, 3.0]m$;
- Raio da elipse: na direção do eixo x é $R_x = 1.1m$ e na direção do eixo y , $R_y = 0.9m$;
- Comprimento característico: $L = 1.0m$;
- Dados do fluido: viscosidade $\mu = 0.01m^2/s$, densidade $\rho = 1.0Kg/m^3$, tensão superficial $\gamma = 1.0N/m$;
- Parâmetro adimensional: $Oh = 0.01$, $Re = 100.0$ e $We = 1.0$;
- Valores adimensionais dos espaçamentos para malha $M3$: $\Delta x = \Delta y = 0.05$ e malha $M4$: $\Delta x = \Delta y = 0.025$.

Para fazer uma verificação do código utiliza-se pseudo-soluções analíticas [23, 41], uma que delimita a amplitude esperada para a variação do diâmetro da elipse ao longo do tempo e outra que descreve exatamente a oscilação esperada, fazendo assim, uma comparação entre as soluções numéricas obtidas pelas diferentes formulações e as pseudo-soluções analíticas para este problema.

A equação que determina a amplitude esperada é dada pela seguinte expressão:

$$A(t) = A_0 \exp\left(\frac{-t}{\tau}\right), \quad (4.4)$$

em que $A_0 = 0.2m$ representa a amplitude total inicial aplicada na gota, t representa o instante de tempo e τ é o período definido por $\tau = \frac{R\mu}{5\rho}$ para este problema da elipse. A oscilação é descrita pela seguinte equação:

$$B(t) = R \cos(2.45t)A(t), \quad (4.5)$$

para R o raio da gota circular.

Na Figura 4.1 está representada a comparação entre os resultados obtidos pelas diferentes formulações de laplaciano superficial com a formulação implícita MAC e as pseudo-soluções analíticas nas malhas M_3 e M_4 . Na formulação implícita MAC que tem o código elaborado no trabalho [26], houve a inclusão de tensão superficial para os testes que realizados ao longo neste trabalho.

A Figura 4.2 apresenta a comparação entre as formulações que estão mais próximas da pseudo-solução analítica, isto é, compara a variação de diâmetro da elipse para as simulações numéricas com a malha M_3 e M_4 , utilizando as formulação MAC e as variações da formulação laplaciano superficial -1 e -4 .

Pode-se concluir pelos resultados numéricos obtidos, que das variações da formulação laplaciano superficial descritas neste trabalho, aquela que apresenta os melhores resultados é a formulação laplaciano superficial -4 , mais próxima da pseudo-solução analítica para baixo número de Ohnesorge.

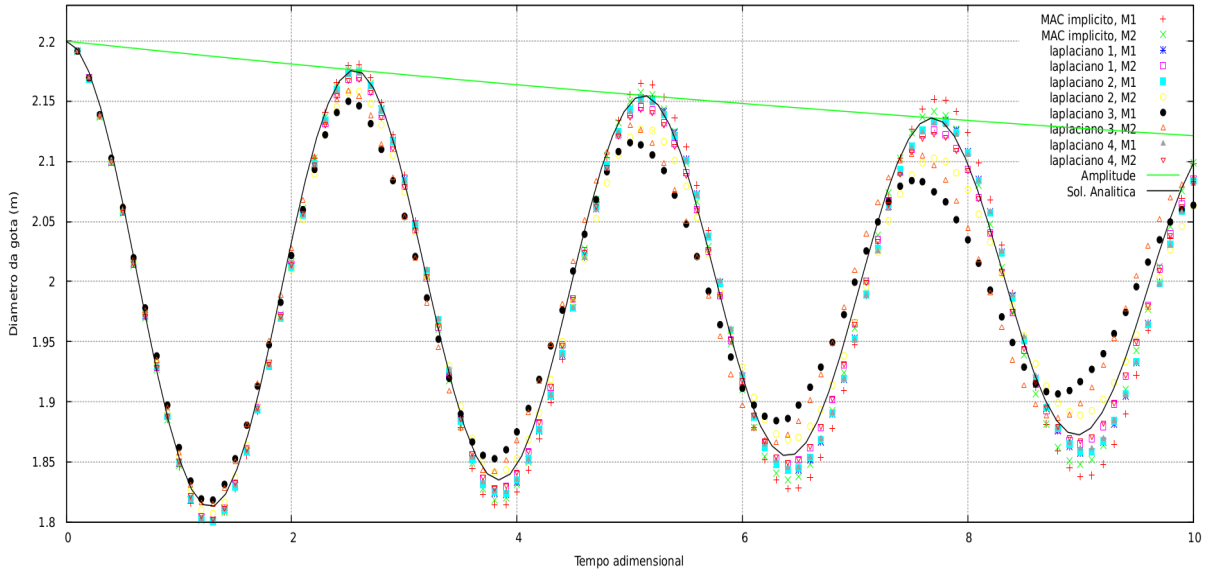


Figura 4.1: Representação para variação de diâmetro da elipse para as diferentes formulações, com $Re = 100.0$, $We = 1.0$ e $Oh = 0.01$.

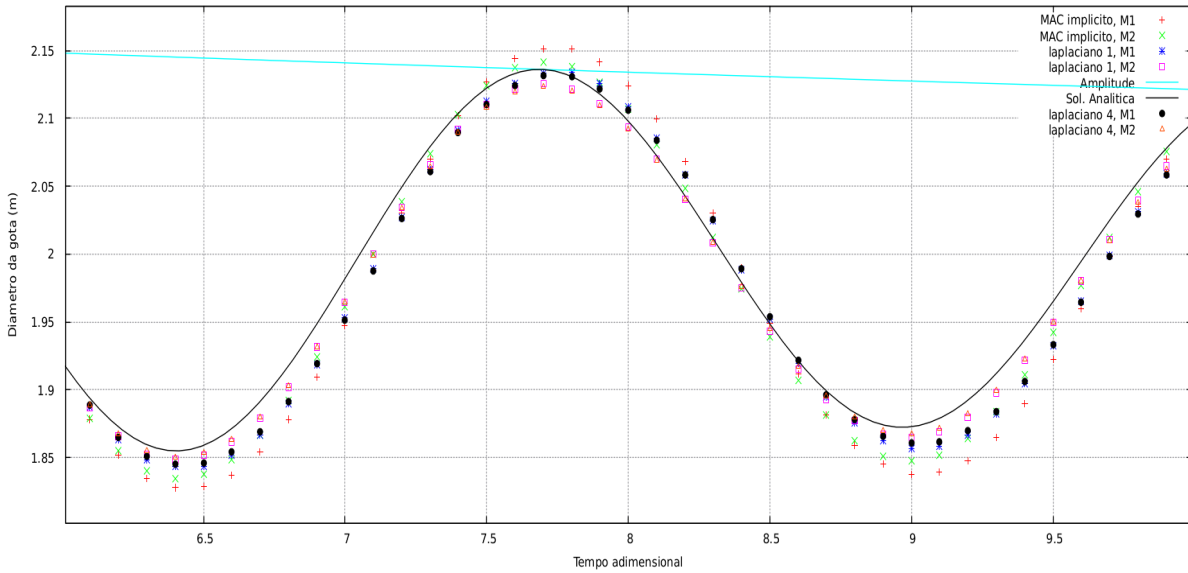


Figura 4.2: Comparação entre a formulação laplaciano-1 e a formulação implícita MAC, com $Re = 100.0$, $We = 1.0$ e $Oh = 0.01$.

4.3 Gota apoiada (*Sessile drop*)

Considere agora uma gota apoiada sobre uma parede sólida, sujeita ao efeito da gravidade e da tensão superficial, sem considerar o ângulo de contato. Para este problema, Mangiavanchi et al. [19] mostram a solução analítica para a interface, que pode ser utilizada para verificar o código implementado assim como a precisão obtida com o refinamento da malha. Os dados empregados para esta simulação são:

- Comprimento característico: $L = 2.0m$;
- Forças de campo consideradas: gravidade $|\mathbf{g}| = 9.81$;
- Dados do fluido: viscosidade $\mu = 9.0m^2/s$, densidade $\rho = 1.0Kg/m^3$, tensão superficial $\gamma = 20.0N/m$;

- Parâmetros adimensionais: $Re = 0.984$, $Fr = 1.0$ e $We = 1.962$;
- Valores adimensionais do espaçamento para malha M_3 : $\Delta x = \Delta y = 0.05$ e malha M_6 : $\Delta x = \Delta y = 0.00625$.

Para fazer as comparações entre as formulações, será plotado o perfil de velocidade na direção x , em um instante de tempo adimensional $t = 0.4$.

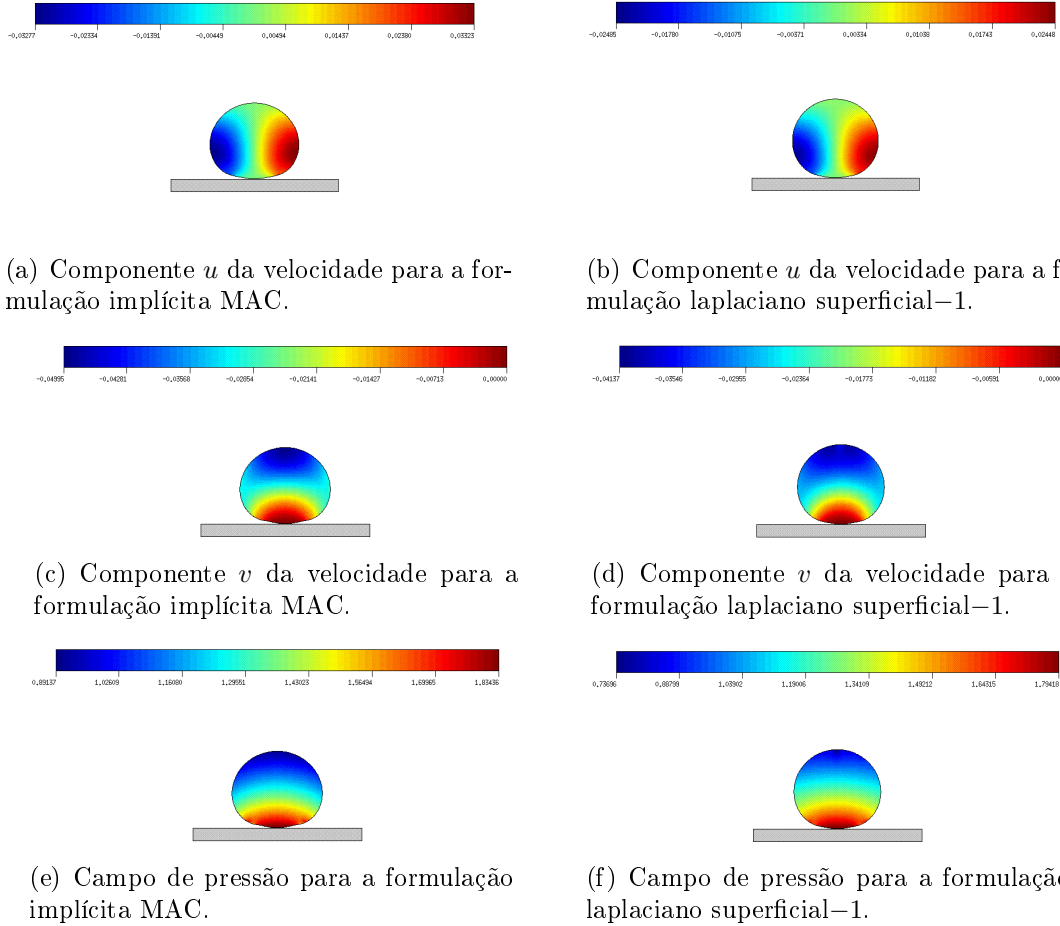


Figura 4.3: Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, malha M1, $Re = 0.984$ e $We = 1.962$, no instante adimensional $t = 0.4$.

A Figura 4.3, apresenta os perfis de velocidade na direção x e na direção y e o campo de pressão, em que é possível observar que a variação das velocidades e da pressão não se diferem muito preservando a simetria.

Utilizando a solução analítica fornecida por Mangiavacchi et al. [19], a Figura 4.4 compara os resultados numéricos com a solução analítica que delimita a geometria do problema no instante de tempo $t = 0.4$.

Para este problema, os testes numéricos foram realizados na malha M_6 para a comparação com a solução analítica, no instante $t = 0.4$, sendo as soluções numéricas da formulação laplaciano superficial-1 e -4 as que se mostram as melhores aproximações quando comparadas com a solução analítica, como apresentado na Figura 4.4.

Para acrescentar novos testes numéricos, são tomados valores mais baixo para os números de Reynolds e Weber, refazendo as simulações e fazendo novas comparações com as soluções analíticas. A Figura 4.5 exibe a comparação entre as geometrias do problema

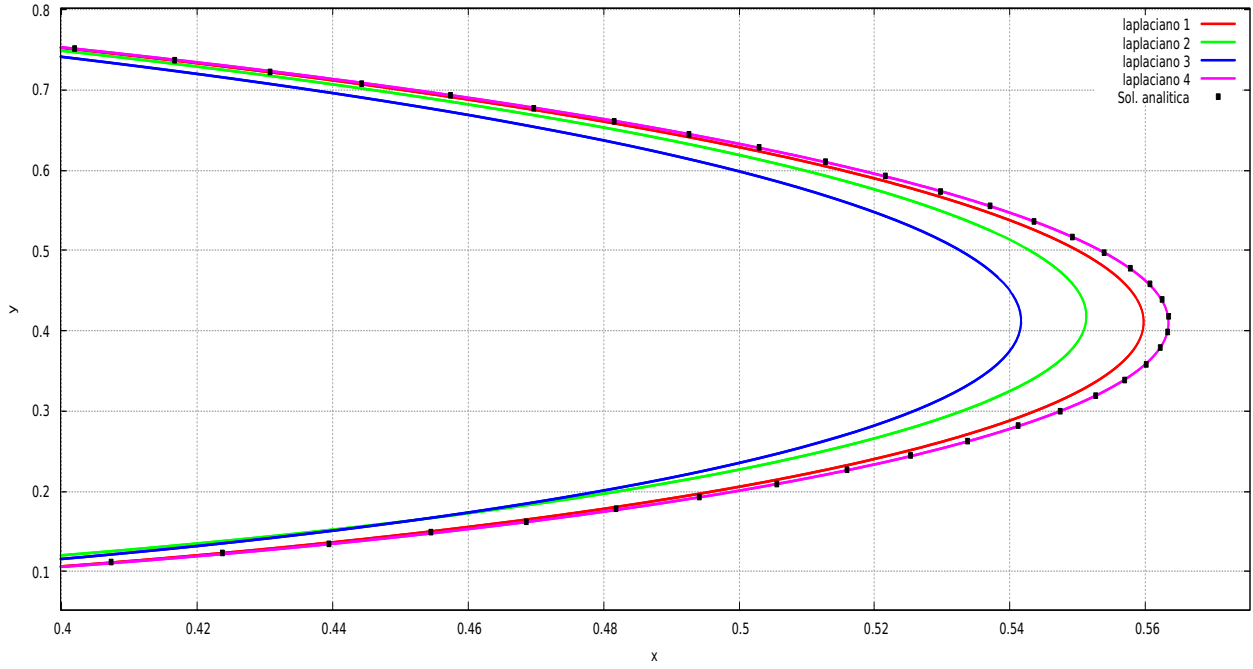


Figura 4.4: Aproximação da região da geometria da gota apoiada, para as formulações do laplaciano superficial apresentadas neste trabalho, utilizando a malha M_6 , com $Re = 0.984$ e $We = 1.962$, no instante $t = 0.4$.

obtidas pela formulação implícita MAC e pelas variações da formulação laplaciano superficial junto a solução analítica, no instante de tempo $t = 40.0$, considerando os seguintes parâmetros:

- Dados do fluido: viscosidade $\mu = 88.9m^2/s$;
- Parâmetro adimensional: $Re = 0.1$.

É possível observar pelas Figuras 4.4 e 4.5 que conforme o número de Reynolds diminui, mais os resultados numéricos se afastam da solução analítica, e também que ainda a formulação laplaciano superficial -1 é a variação que mais se aproxima do método implícito MAC e da solução analítica.

Agora, variando os valores para o número de Weber ($We \ll 1$) e fixando $Re = 0.1$, o teste numérico é feito e os resultados numéricos são comparados apenas com a solução numérica fornecida pelo método implícito MAC, uma vez que a solução analítica neste caso ainda precisa ser mais estudada. Os novos parâmetros:

- Dados do fluido: viscosidade $\mu = 88.9m^2/s$, tensão superficial $\gamma = 184.9N/m$;
- Parâmetros adimensionais: $Re = 0.1$ e $We = 0.2$.

A solução deste problema pode ser observada na Figura 4.6, onde há uma aproximação na região onde as soluções numéricas apresentam mais variação.

O mesmo problema para os mesmos parâmetros e um número de $We = 0.02$ é ilustrado na Figura 4.7, também apresentada com uma aproximação em uma região da geometria pois os resultados são bastante próximos.

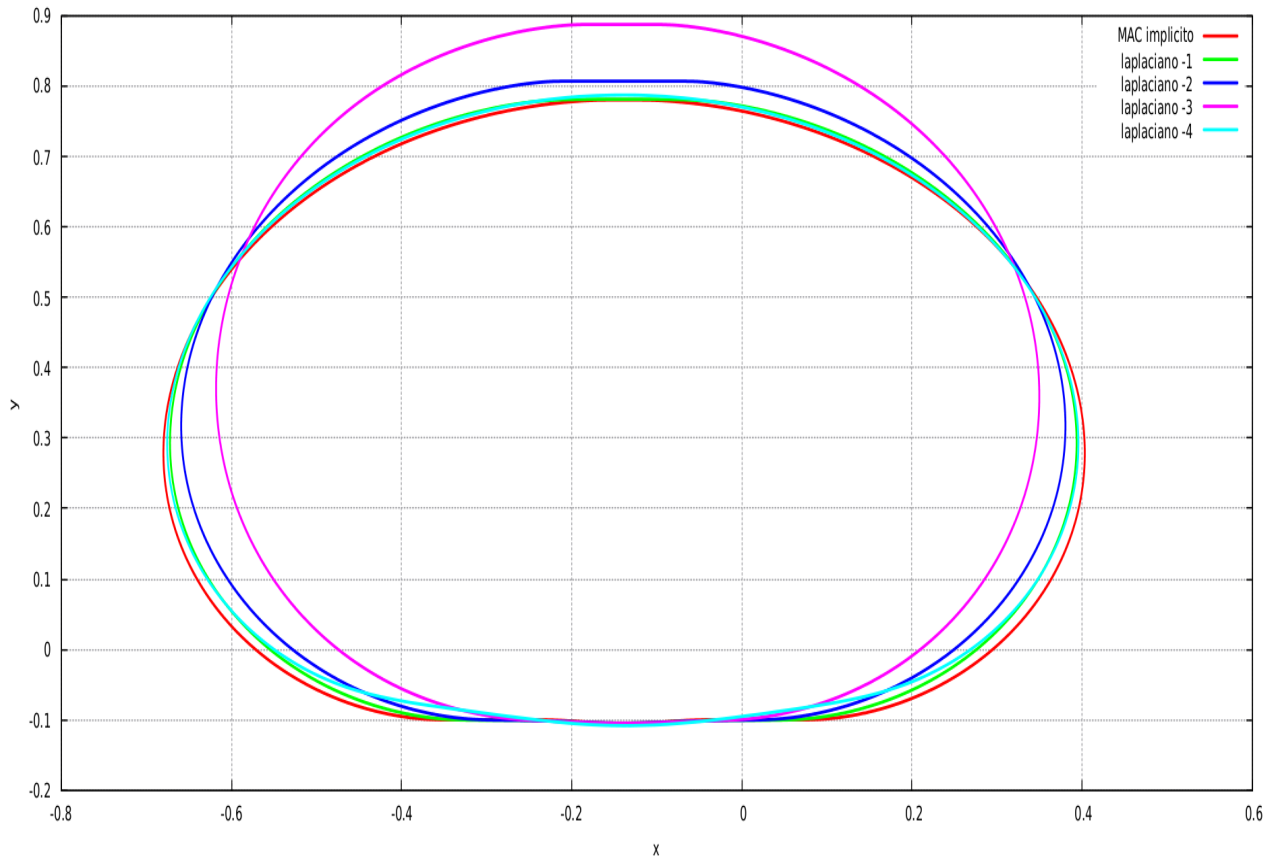


Figura 4.5: Comparação entre a geometria da gota apoiada, para a formulação implícita MAC e variações do laplaciano superficial, utilizando a malha M_3 , com $Re = 0.1$ e $We = 1.962$, no instante $t = 40.0$.

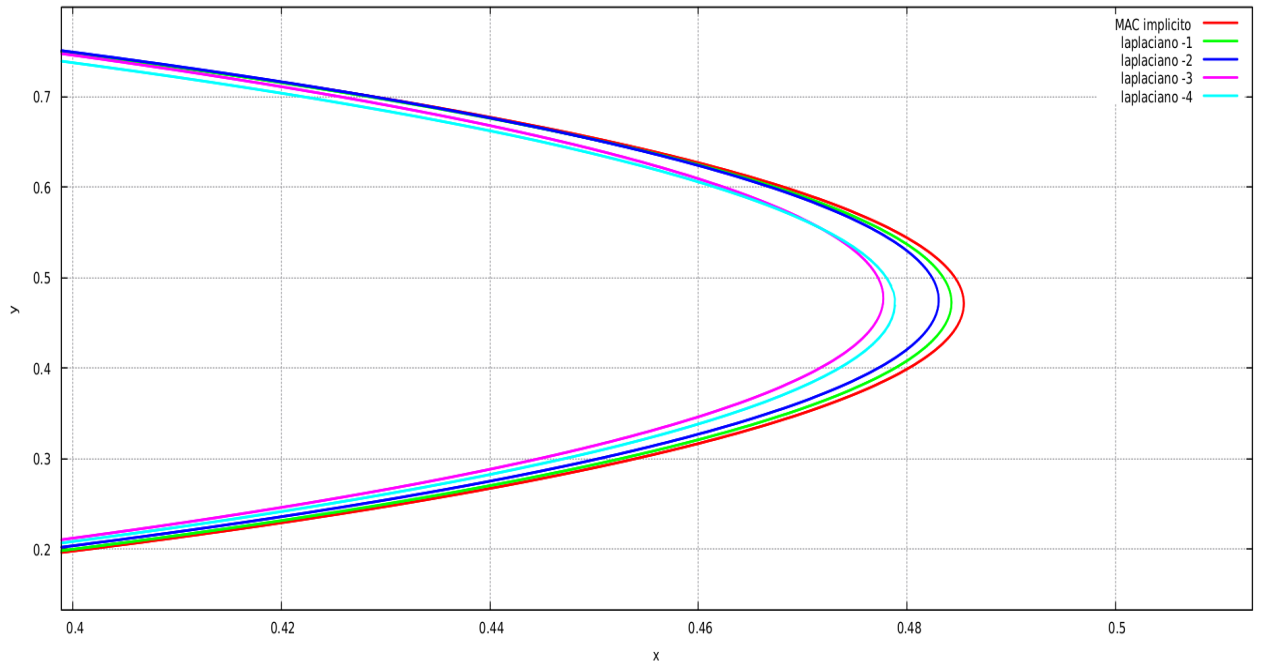


Figura 4.6: Comparação entre a geometria da gota apoiada, para as formulação implícita MAC e variações do laplaciano superficial, utilizando a malha M_6 com $Re = 0.1$ e $We = 0.2$, no instante $t = 0.4$.

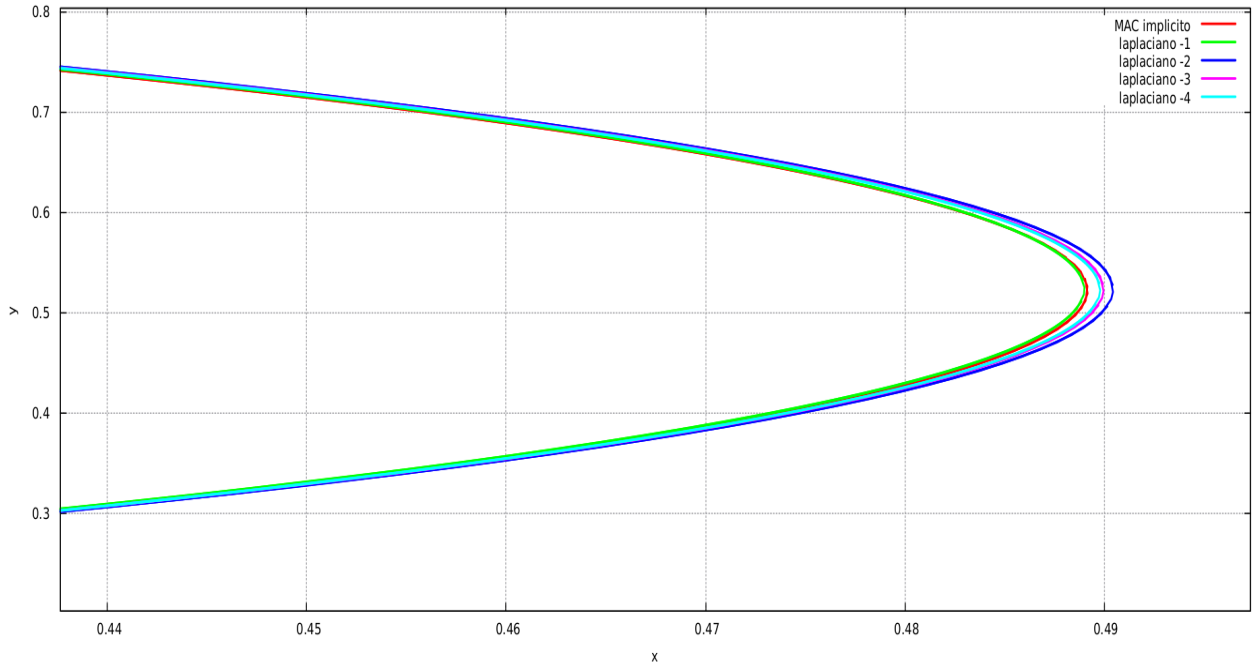


Figura 4.7: Comparação entre a geometria da gota apoiada, para as formulação implícita MAC e variações do laplaciano superficial, utilizando a malha M_3 , com $Re = 0.1$ e $We = 0.02$, no instante $t = 0.4$.

4.4 *Fountain flow*

Para este problema é necessário incluir condições de contorno como as condições de entrada de fluido (injetor) e condições de saída de fluido (ejetor), além das demais condições de contorno rígido e de superfície livre, que devem ser empregadas. As condições para este problema são as mesmas descritas e utilizadas no trabalho [20].

4.4.1 Problema sem tensão superficial

Para comparação com resultados da literatura, são realizadas simulações numéricas para o problema *fountain flow* sem considerar tensão superficial e para $Re < 1$, fundamentando estas comparações com o trabalho de Oishi et al. [26].

O problema é descrito pelos seguintes parâmetros:

- Comprimento do canal: $5.0m$;
- Altura do injetor: $1.0m$;
- Altura do ejeter: $1.0m$;
- Comprimento característico: $L = 1.0m$;
- Velocidade de escala: $U = 1.0m/s$;
- Dados do fluido: viscosidade $\mu = 10.0m^2/s$, densidade $\rho = 1.0Kg/m^3$;
- Parâmetros adimensionais: $Re = 0.1$;
- Valores adimensionais do espaçamento para malha M_2 : $\Delta x = \Delta y = 0.1$, malha M_3 : $\Delta x = \Delta y = 0.05$ e malha M_4 : $\Delta x = \Delta y = 0.025$.

No trabalho de Oishi et al. [26], são feitas comparações de precisão e estabilidade numérica entre a formulação implícita MAC [26], uma formulação semi-implícita [26] e uma formulação explícita [39], para problemas de *fountain flow*. Fazendo uma comparação de resultados com este trabalho, a Tabela 4.2 mostra os passos temporais que são utilizados em cada formulação garantindo a estabilidade numérica para o problema de *fountain flow* com superfície livre e $Re = 0.1$.

Tabela 4.2: Passo temporal para o problema *fountain flow* com superfície livre das diferentes formulações.

Formulação	$M - 2$	M_3	M_4
Explícita	1.0×10^{-4}	2.5×10^{-5}	6.25×10^{-6}
Semi-implícita	4.0×10^{-3}	8.75×10^{-5}	2.0×10^{-5}
MAC implícito	5.0×10^{-2}	1.0×10^{-3}	2.0×10^{-3}
Laplaciano superficial -1	2.25×10^{-4}	6.0×10^{-5}	7.5×10^{-6}
Laplaciano superficial -4	5.0×10^{-2}	1.0×10^{-3}	2.0×10^{-3}

É necessário observar pela Tabela 4.2, que as variações -2 e -3 da formulação laplaciano superficial também tem a mesma restrição temporal da formulação laplaciano superficial -1 e ainda, que a restrição sobre esta formulação se deve a aproximação realizada para o termo da velocidade normal u_n presente no lado direito da equação (2.57), que permite uma melhora quanto o passo temporal tomado para a formulação explícita apresentada no trabalho Tomé [39]. Já quando analisada a formulação laplaciano superficial -4 , consegue alcançar o mesmo passo temporal da formulação implícita.

Para comparar os perfis dos campos de velocidade e pressão entre o método implícito MAC e a formulação laplaciano superficial -1 , a qual teve melhores resultados nos testes já realizados, são apresentados os perfis nas Figuras 4.8 e 4.9, respectivamente nas malhas M_2 e M_4 , no instante de tempo $t = 0.6$.

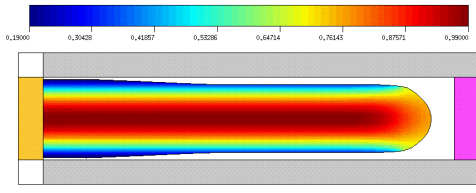
Observando as Figuras 4.8 e 4.9, pode-se verificar que o método estudo neste trabalho produz resultados semelhantes ao método implícito MAC. Entretanto, nota-se uma melhoria na precisão na simulação do *fountain flow* com a formulação laplaciano -1 na malha mais grossa, já que o canal é preenchido de forma mais consistente, sem deixar espaços entre a parede e o fluido, o que não ocorre para o método implícito MAC nem na formulação laplaciano superficial -4 mesmo utilizando passos de tempo reduzido, apenas com o refinamento da malha é possível perceber o preenchido de forma mais consistente para este métodos.

4.4.2 Problema com tensão superficial

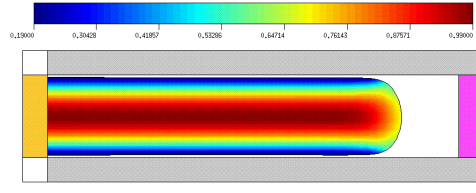
Mitsoulis [22], apresenta um estudo no qual varia diversos parâmetros envolvidos em problemas de *fountain flow* com superfície livre, fazendo comparações entre os resultados obtidos via métodos de elementos finitos para domínios planares e axissimétricos. Para os teste a seguir, o número de capilaridade, $Ca = \frac{\mu U}{\gamma}$, é tomado entre $Ca = 0.02$ e $Ca = 10000$, avaliando o perfil do escoamento assim como realizado em [22].

Os dados para este problema são:

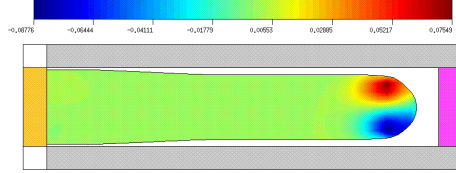
- Comprimento do canal: $5.0m$;
- Altura do injetor: $1.0m$;
- Altura do ejetor: $1.0m$;
- Comprimento característico: $L = 1.0m$;



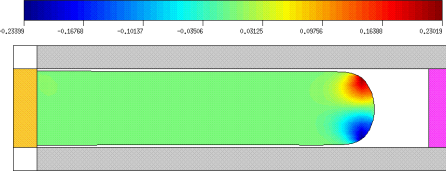
(a) Componente u da velocidade para a formulação implícita MAC.



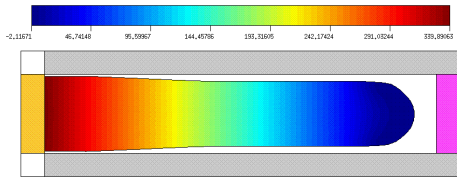
(b) Componente u da velocidade para a formulação laplaciano superficial-1.



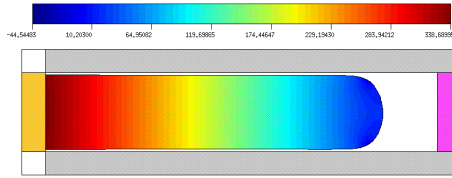
(c) Componente v da velocidade para a formulação implícita MAC.



(d) Componente v da velocidade para a formulação laplaciano superficial-1.



(e) Campo de pressão para a formulação implícita MAC.



(f) Campo de pressão para a formulação laplaciano superficial-1.

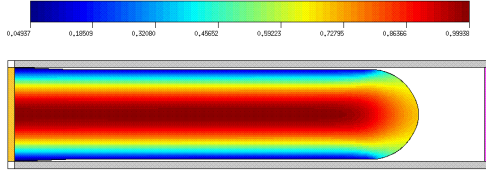
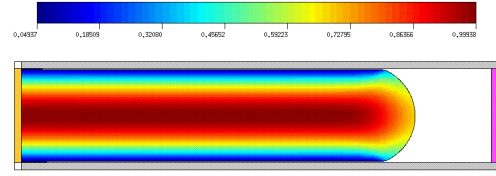
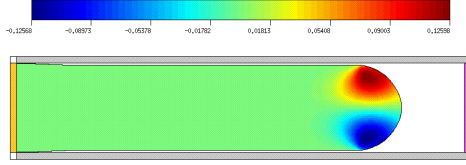
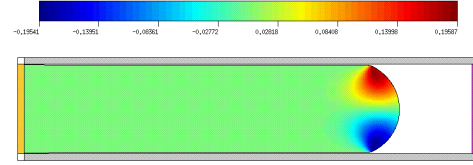
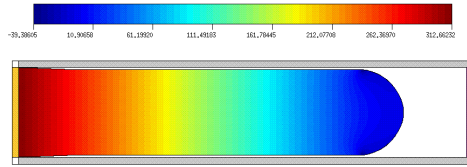
Figura 4.8: Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, malha M_2 , $Re = 0.1$, no instante $t = 6.0$.

- Velocidade de escala: $U = 1.0m/s$;
- Dados do fluido: viscosidade $\mu = 10.0m^2/s$, densidade $\rho = 1.0Kg/m^3$ e coeficiente de tensão superficial $\gamma \in [0.1, 500.0]N/m$;
- Parâmetros adimensionais: $Re = 0.01$;
- Valores adimensionais do espaçamento para malha M_1 : $\Delta x = \Delta y = 0.2$, malha M_2 : $\Delta x = \Delta y = 0.1$ e malha M_3 : $\Delta x = \Delta y = 0.05$.

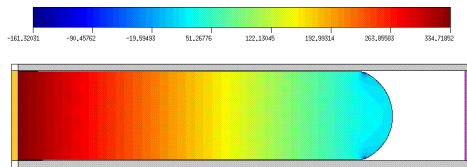
Para avaliar efeitos de tensão superficial sobre o escoamento, são utilizados diferentes números de capilaridade entre $Ca = 0.02$ e $Ca = 100.0$ e $Re \ll 1$, para verificar o comportamento da geometria no instante de tempo $t = 6.0$.

No trabalho de Mitsoulis [22], o número de Reynolds é desprezado, dessa forma os testes foram realizados para $Re = 0.01$, em que a Figura 4.10 apresenta um gráfico que compara a distância da frente do escoamento no preenchimento do canal em função dos números de capilaridade, como feito em [22]. É possível observar na Figura 4.10 que a medida que Ca se aproxima de zero, isto é, quando se há muita tensão superficial a interface que delimita o escoamento tende a ser menos curva. Para valores elevados de capilaridade, onde há pouca tensão superficial, o perfil do escoamento se assemelha a um escoamento sem tensão superficial, tendo uma interface mais curva.

A Figura 4.11 mostra os campos de velocidade u e pressão p , para $Ca = 0.02$, isto é, caso com muita tensão superficial e $Ca = 100.0$, onde há pouca tensão superficial

(a) Componente u da velocidade para a formulação implícita MAC.(b) Componente u da velocidade para a formulação laplaciano superficial-1.(c) Componente v da velocidade para a formulação implícita MAC.(d) Componente v da velocidade para a formulação laplaciano superficial-1.

(e) Campo de pressão para a formulação implícita MAC.



(f) Campo de pressão para a formulação laplaciano superficial-1.

Figura 4.9: Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, com malha M_4 , no instante $t = 6.0$.

influyente. Notando, que se mantém próximas as distribuições dos campos de velocidade e pressão.

4.4.3 Gota em impacto

Nesta seção considera-se uma gota de raio $0.01m$, com a atuação da gravidade e considerando os efeitos de tensão superficial. Os dados para este problema são:

- Comprimento característico (diâmetro): $D = 2.0 \cdot 10^{-2}m$;
- Velocidade de escala: $U = 1.0m/s$;
- Forças de campo consideradas: gravidade $|g| = 9.81$;
- Dados do fluido: viscosidade $\nu = 0.001m^2/s$, densidade $\rho = 1.0Kg/m^3$, $\gamma = 0.005N/m$;
- Parâmetros adimensionais: $Re = 20.0$, $We = 4.0$ $Fr = 2.26$;
- Malha M_3 : $\Delta x = \Delta y = 0.05$

Os resultados deste teste são apresentados na Figura 4.12, onde é comparada a variação do diâmetro da gota com o passar do tempo de simulação, entre a formulação implícita MAC e a formulação laplaciano superficial -4.

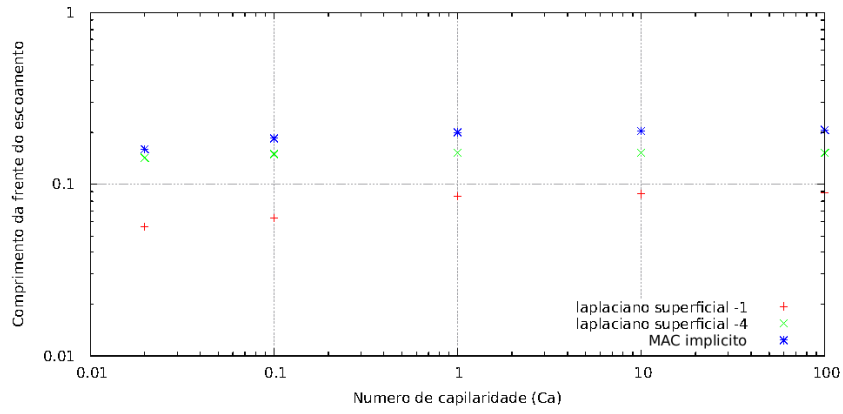
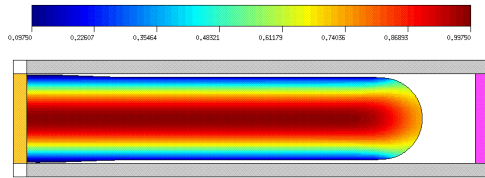
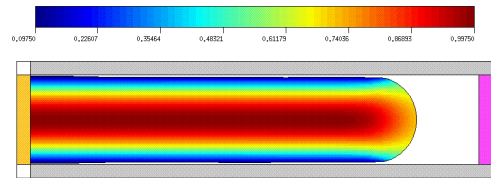


Figura 4.10: Comparação entre distância da frente do escoamento em função dos números de capilaridade.

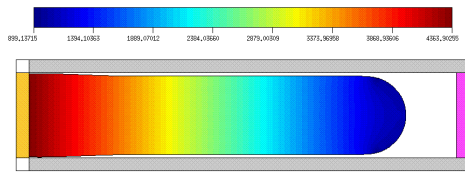
Uma observação para este teste, foi o passo temporal utilizado, enquanto a formulação implícita utiliza um passo temporal $\delta t = 5 \times 10^{-5}$, a formulação laplaciano superficial -4 utilizou o passo temporal $\delta t = 5 \times 10^{-4}$.



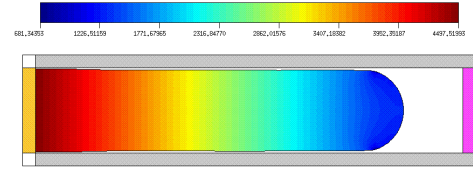
(a) Componente u da velocidade para a formulação implícita MAC, $Ca = 0.02$.



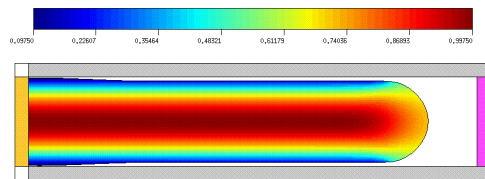
(b) Componente u da velocidade para a formulação laplaciano superficial-1, $Ca = 0.02$.



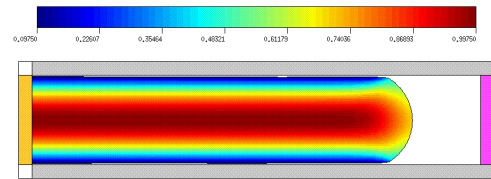
(c) Campo de pressão para a formulação implícita MAC, $Ca = 0.02$.



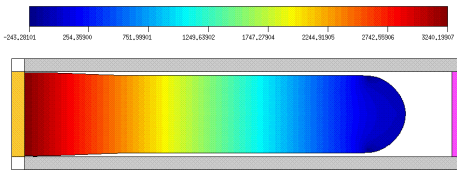
(d) Campo de pressão para a formulação laplaciano superficial-1, $Ca = 0.02$.



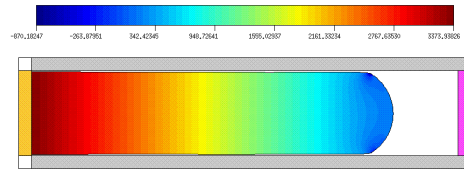
(e) Componente u da velocidade para a formulação implícita MAC, $Ca = 100.0$.



(f) Componente u da velocidade para a formulação laplaciano superficial-1, $Ca = 100.0$.



(g) Campo de pressão para a formulação implícita MAC, $Ca = 100.0$.



(h) Campo de pressão para a formulação laplaciano superficial-1, $Ca = 100.0$.

Figura 4.11: Comparação entre as simulações das formulação laplaciano superficial-1 e formulação implícita MAC, com malha M_3 , $Re = 0.01$, no instante $t = 6.0$.

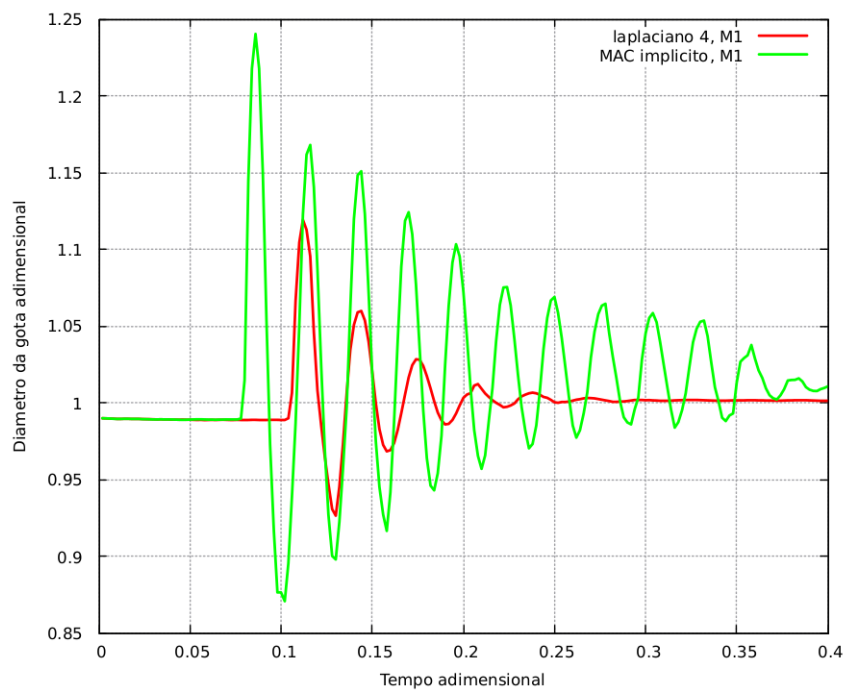


Figura 4.12: Variação do diâmetro da gota em impacto entre as formulações MAC implícito e laplaciano superficial -4 , utilizando a malha M_3 com $\Delta x = \Delta y = 0.05$, com $Re = 20.0$ e $We = 0.4$.

Conclusão

A formulação proposta neste trabalho vem como uma alternativa as formulações MAC explícita [39] e implícita [26], frequentemente utilizadas e que usam a tensão normal definida de forma clássica. Ao longo deste trabalho foi possível estudar a nova forma de definir a tensão normal, permitindo obter variações para a formulação e fazer primeiros testes numéricos utilizando a formulação laplaciano superficial completa.

No trabalho de Oishi, Buscaglia e Cuminato [25], foi apresentada uma versão para esta formulação, a qual não fazia consideração de tensão superficial e não tratava das propriedades, como curvatura e vetores normal e tangente, devidamente precisos. Fazer estas modificações neste trabalho permitiu analisar a formulação e ter variações que são consistentes com a construção desta.

Com este trabalho foi possível fazer um estudo de conceitos básicos de geometria diferencial que foram apresentados ao longo do Capítulo 1, a fim de verificar as operações realizadas para o cálculo das grandezas geométricas do trabalho [19], que por sua vez estão presentes na condição de tensão superficial normal.

Os resultados que foram obtidos para a aproximação da curvatura com a simulação numérica garantem uma boa ordem de precisão. Além disso, o vetor normal, sendo calculado a partir de aproximações como mostrado na Seção 2.2.1, permite poder tomar vetores menos genéricos do que aqueles que são tomados em algumas funções do Sistema *Freeflow 2D*, a partir dos próprios valores estimados no centro da célula [20].

Um importante estudo realizado neste trabalho foi apresentado no Capítulo 2, verificando os trabalhos de Oishi, Buscaglia e Cuminato [25] e Buscaglia e Ausas [4], que permitiram a elaboração da formulação laplaciano superficial para escoamentos de fluidos newtonianos com superfície livre, considerando os efeitos de tensão superficial. Parte fundamentada na formulação variacional combinados a métodos de projeção, para um tratamento via diferenças finitas.

O Capítulo 3 traz possíveis aproximações numéricas para a discretização da nova formulação e os resultados que foram obtidos com simulações numéricas das diferentes formulações estão no Capítulo 4. Os resultados numéricos permitem concluir que a aproximação para as velocidades presentes na formulação laplaciano superficial fazem grande diferença na precisão do método, e talvez seja possível melhorar os resultados obtidos via formulação laplaciano superficial, por exemplo na formulação laplaciano -3 , pode ser estudado o que ocorre quando é utilizada uma vizinhança maior ou menor para delimitar a função de distribuição dada pela equação (3.29).

Os testes realizados para a verificação do código para a formulação laplaciano superficial no Capítulo 4, mostram semelhança aos testes realizados pela formulação MAC implícita. Nos testes da oscilação da gota, a precisão se mostra boa para um teste reali-

zado para $Oh \ll 1$, seguindo os artigos estudados que fazem o mesmo teste numérico. Quando o problema da gota apoiada é comparado com a solução analítica proposta por Mangiavacchi et al. [19], a precisão para a malha reduzida, é bastante satisfatória, contando que os sistemas contaram com uma aproximação implícita apenas a um dos termos viscosos e o comprimento de arco é aproximado.

Os testes numéricos apresentados na seção 4.3, para $Re < 0.1$ e $We \ll 1$, sugere que a formulação proposta é mais estável quando se avaliam os campos de velocidade e pressão no problema, em um mesmo instante de tempo.

O problema de *fountain flow* com superfície livre permite perceber a instabilidade do método proposto, que restringe os passos de tempo δt . Essa restrição se deve as aproximações explícitas realizadas, como para velocidade normal u_n , entretanto, fazer o uso de uma aproximação implícita para este termo como na formulação laplaciano superficial -4 , acarreta no acoplamento dos sistemas resolvidos para o cálculo de ψ , e assim, não é possível manter a ideia de se resolver as equações sobre a interface, e utilizar esta solução como condição de contorno de superfície livre.

Finalmente, a variação da formulação laplaciano superficial -1 , além de manter a simetria esperada, permite que o preenchimento do canal no problema de *fountain flow* se estabeleça de modo uniforme ao longo de todo canal, mesmo em malhas menos reduzidas, o que não acontece para a formulação implícita MAC e nem para a variação laplaciano superficial -4 .

Como trabalhos futuro, pretende-se aprimorar as implementações: podendo melhorar a aproximação numérica investigando a restrição do passo temporal, fazer novos testes numéricos a serem realizados para diferentes geometrias e para o problema da gota com impacto apresentado na seção 4.4.3, também considerando outros valores para os parâmetros adimensionais, principalmente para $Re \ll 1$ e $We \ll 1$.

Referências

- [1] E. Bansch. Finite element discretization of the Navier-Stokes equations with a free capillary surface. *Numerische Mathematik*, 88:203–235, 2001.
- [2] J. B. Bell; P. Colella; H. M. Glaz. A second order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85:257–283, 1989.
- [3] D. L. Brown; R. Cortez; M. L. Minion. Accurate projections methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal Computation Physics.*, 168:464–499, 2001.
- [4] G. C. Buscaglia; R. F. Ausas. Variational formulations for surface tension, capillarity and wetting. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200:3011–3025, 2011.
- [5] M. P. Carmo. *Differential geometry of curves and surfaces*. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1976.
- [6] A. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2:12–26, 1967.
- [7] A. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, 2:745–762, 1968.
- [8] A. J. Chorin; J. E. Marsden. *A mathematical introduction to fluid mechanics*. Springer, 1997.
- [9] S. Dong; G. E. Karniadakis; C. Chrysosostomidis. A robust and accurate outflow boundary condition for incompressible flow simulations on severely-truncated unbounded domains. *Journal of Computational Physics*, 261:83–105, 2014.
- [10] G. Dziuk; C. Elliott. Finite elements on evolving surfaces. *Journal of Numerical Analysis*, 27:262–292, 2006.
- [11] A. O. Fortuna. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. São Paulo: Edusp, 2000.
- [12] P. G. Gennes; F. B. Wyart; D. Quéré. *Capillarity and wetting phenomena: drops, bubbles, pearls, waves*. Springer, 2004.
- [13] J. L. Guermond; P. Mineev; J. Shen. An overview of projection methods for incompressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:6011–6045, 2006.
- [14] M. Gurtin. *An introduction to continuum mechanics*. Academic Press, 1981.

- [15] M. E. Gurtin; E. Fried; L. Anand. *The Mechanics and Thermodynamics of Continua*. Cambridge University Press, 2010.
- [16] F. H. Harlow; J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Physics of Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- [17] X. Hou; J. Rigola; O. Lehmkuhl; A. Oliva. Simulation of the two-fluid model on incompressible flow with fractional step method for both resolved and unresolved scale interfaces. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 52:15–27, 2015.
- [18] E. L. Lima. *Um curso de análise*, volume 2. Rio de Janeiro, Instituto de Matemática Pura e Aplicada, CNPq, 1981.
- [19] N. Mangiavacchi; A. Castelo; M. F. Tomé; J. A. Cuminato; M. L. B. Oliveira; S. McKee. An effective implementation of surface tension using the Marker And Cell method for axisymmetric and planar flows. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(4):1340–1368, 2005.
- [20] F. P. Martins. Desenvolvimento de um método numérico implícito para a simulação de escoamentos viscoelásticos com superfícies livres. Master's thesis, ICMC-USP, São Carlos, 2009.
- [21] F. P. Martins; C. M. Oishi; F. S. Sousa; J. A. Cuminato. Numerical assessment of mass conservation on a MAC-type method for viscoelastic free surface flows. *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering*, pages 6545–6562, 2012.
- [22] E. Mitsoulis. Fountain flow revisited: The effect of various fluids mechanics parameters. *American Institute of Chemical Engineers*, 56(5), 2010.
- [23] F. Montefuscolo. Métodos numéricos para escoamentos com linhas de contato dinâmicas. Master's thesis, ICMC-USP, São Carlos, 2012.
- [24] F. Montefuscolo; F. S. Sousa; G. C. Buscaglia. High-order ale schemes for incompressible capillary flows. *29th Computational Fluid Dynamics (Von Karman Institute for Fluid Dynamics)*, 278:133–147, 2014.
- [25] C. M. Oishi; G. C. Buscaglia; J. A. Cuminato. Pressure boundary conditions at free surface for low reynolds number flows. *Proceedings of XXIX Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering CILAMCE*, 2008:1–18, 2008.
- [26] C. M. Oishi; J. Cuminato; V. Ferreira; M. Tomé; A. Castelo; N. Mangiavacchi; S. McKee. A stable semi-implicit method for free surface flows. *Transaction of the ASME - Journal of Applied Mechanics*, 73:940–947, 2006b.
- [27] C. M. Oishi; M. F. Tomé; J. Cuminato; S. McKee. An implicit technique for solving 3D low reynolds number moving free surface flows. *Journal of Computational Physics*, 227:7446–7468, 2008.
- [28] J. Picado. *Apontamentos de Geometria Diferencial*. Departamento do matemática, Universidade de Coimbra, 2006.
- [29] A. Poux; S. Glockner; M. Azaiez. Improvements on open and traction boundary conditions for navier-stokes time-splitting methods. *Journal of Computational Physics*, 230:4011–4027.

- [30] A. Prosperetti; G. Tryggvason. *Computational methods for multiphase flow*. Cambridge University Press, 2006.
- [31] J. H. Pyo; J. Shen. Gauge-Uzawa methods for incompressible flows with variable density. *Journal of Computational Physics*, 221:181–197, 2007.
- [32] D. S. Rodrigues. Tratamento numérico da mecânica de interfaces lipídicas: modelagem e simulação, 2015.
- [33] S. J. Ruuth; B. Merriman. A simple embedding method for solving partial differential equations on surfaces. *Journal of Computational Physics*, 227:1943–1961, 2008.
- [34] F. S. Sousa; C. M. Oishi; G. C. Buscaglia. Spurious transients of projection methods in microflow simulations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 285:659–693, 2015.
- [35] L. Strubelj; I. Tiselj ; B. Mavko. Simulations of free surface flows with implementation of surface tension and interface sharpening in the two-fluid model. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 30:741–750, 2009.
- [36] M. Sussman; K. M. Smith; M. Y. Hussaini; M. Ohta; R. Zhi-Wei. A sharp interface method for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 221:469–505, 2007.
- [37] R. Temam. Sur l’ approximation de la solution des equations de navierstokes par la methode de pas fractionnaires (ii). *Archives of Rational Mechanics and Analysis*, 33:377–385, 1969.
- [38] K. Tenenblat. *Introdução a Geometria Diferencial*. UNB, 1988.
- [39] M. F. Tomé. *GENSMAC a multiple free surface fluid flow solver*. PhD thesis, University of Strathclyde, Glasgow, Scotland, 1993.
- [40] M. Tomé; N. Mangiavacchi; J.A. Cuminato; A. Castelo; S. McKee. A finite difference technique for simulating unsteady viscoelastic free surface flows. *Journal Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 106:61–106, 2002.
- [41] G. Tryggvason; B. Bunner; O. Ebrat; W. Tauber. Computations of multiphase flows by a finite difference/front tracking method. I. Multi-fluid flows. *Lecture series - Von Karman Institute for Fluid Dynamics*, 03, 1998.
- [42] G. Tryggvason; R. Scardovelli; S. Zaleski. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, 2011.
- [43] S. O. Unverdi; G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of computational physics*, 100:25–37, 1992.
- [44] M. M. Villar. Análise numérica detalhada de escoamentos multifásicos bidimensionais, 2007.
- [45] T. Watanabe. Numerical simulation of oscillations and rotations of a free liquid droplet using the level set method. *Computers & Fluids*, 37:91–98, 2007.
- [46] T. Watanabe. Nonlinear oscillations and rotations of a free liquid droplet. *International Journal of Geology*, 4, 2010.

-
- [47] B. Yang; A. Prosperetti. A second-order boundary-fitted projection method for free-surface flow computations. *Journal of Computational Physics*, 213:574–590, 2006.

Formulação variacional para escoamentos com tensão superficial

Ao longo deste texto é a descrição das equações de Navier-Stokes junto as condições de contorno com tensão superficial, para garantir uma boa representação das forças que agem sobre a interface e fazendo um estudo do trabalho de Buscaglia e Ausas [4], são apresentadas breves discussões sobre a interpretação física das forças de tensão superficial.

Considerando escoamentos incompressíveis de fluidos newtonianos imiscíveis, pretende-se apresentar o problema via formulação variacional que descreva a atuação das forças de tensão superficial e também apresentar o problema com suas correspondentes equações diferenciais.

A.1 Descrição do Problema

Considere uma configuração geométrica em $2D$ como na Figura 1.1 e um escoamento incompressível de um fluido newtoniano de densidade ρ e viscosidade μ constantes ao longo do domínio $\Omega \in \mathbb{R}^2$, onde o fluido está confinado, a equação de conservação da quantidade de movimento e a equação de conservação da massa são:

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right] = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (\text{A.2})$$

Em que $\mathbf{u} = (u(x, y), v(x, y))$ é o campo de velocidade, $p = p(x, y)$ é o campo de pressão e $\boldsymbol{\sigma}$ o tensor tensão total (ou tensor de tensões de Cauchy) dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}^N, \quad (\text{A.3})$$

em que o tensor taxa de deformação é descrito por $\boldsymbol{\tau}^N = 2\mu\mathbf{D}$, com $\mathbf{D} = \frac{1}{2}[\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T]$ e $\mathbf{g}$ as forças de campo, como gravidade por exemplo. Assumindo uma interface Γ sem escorregamento e definindo o campo de velocidade $\mathbf{u} \in H^1(\Omega)$ e $p \in L^2(\Omega)$, espaços de Banach segundo as **Definições 14 -16**.

Definição 14 *Um espaço de Banach é um espaço normado e completo, isto é, onde toda sequência de Cauchy converge no espaço vetorial dado.*

Como exemplo de um espaço de Banach, temos os espaços L^p e H^1 .

Definição 15 Para cada $p \in [1, \infty)$, definimos o espaço L^p ao conjunto

$$L^p = \{ \mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \int_{\Omega} \|\mathbf{u}(\mathbf{x})\|^p d\mathbf{x} < \infty \}, \quad (\text{A.4})$$

com a norma dada por:

$$\|\mathbf{u}\|_p = \left(\int_{\Omega} \|\mathbf{u}(\mathbf{x})\|^p d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{p}}. \quad (\text{A.5})$$

Definição 16 O conjunto L^p , para $p = 2$ com a norma dada por

$$\|\mathbf{u}\|_2 = \left(\int_{\Omega} \|\mathbf{u}(\mathbf{x})\|^2 d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.6})$$

é dito um espaço de Hilbert com produto interno:

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle_2 = \int_{\Omega} \mathbf{u} \mathbf{v} d\mathbf{x}. \quad (\text{A.7})$$

Para as condições de contorno, particiona-se a fronteira como no trabalho de Montefusco [23] e a teoria apresentada em Prosperetti e Tryggvason [30], na qual Γ_D a região onde a velocidade é especificada completamente, Γ_N onde se tem especificada a tração, força aplicada sobre um corpo numa direção perpendicular à superfície e com sentido externo ao domínio, e Γ_M onde a velocidade normal e a tração tangencial são especificadas

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{u}_0, & \mathbf{x} &\in \Gamma_D, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= \sigma_n, & \mathbf{x} &\in \Gamma_N \\ (I - \mathbf{n}\mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} &= \sigma_t, & \mathbf{x} &\in \Gamma_M, \\ \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} &= u_n, & \mathbf{x} &\in \Gamma_M. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

em que $\mathbf{n}$ é o versor normal a interface apontando para fora do fluido de referência, σ_n é a componente normal da tensão que o meio externo exerce sobre o fluido, σ_t é a componente tangencial da tensão, u_n a componente normal da velocidade e I o tensor identidade.

Para formulação variacional correspondente ao problema, introduzimos os espaços

$$H^1(\Omega) = \{ \mathbf{u} \in L^2(\Omega) : \int_{\Omega} |\nabla \mathbf{u}|^2 d\mathbf{x} < \infty \}, \quad (\text{A.9})$$

$$W = \{ \mathbf{w} \in H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) : \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ em } \partial\Omega \}, \quad (\text{A.10})$$

$$Q = L^2(\Omega)/\mathbb{R}, \quad (\text{A.11})$$

em que $H^1(\Omega)$ é um espaço de Hilbert e Q representa o conjunto das funções que pertencem as classes de equivalência L^2 , uma vez que numa vinhança da superfície livre há um grande salto de pressão, e esta precisa estar bem definida. Então, via formulação variacional e considerando a inércia do fluido e da interface, procura-se determinar um campo vetorial $\mathbf{u} \in W$ e um campo escalar $p \in Q$, tais que

$$\int_{\Omega} 2\mu \mathbf{D} \mathbf{u} : \mathbf{D} \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Omega} b \cdot \mathbf{w} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \sigma_n \cdot \mathbf{w} d\partial\Omega + \int_{\Gamma} \sigma_t \cdot \mathbf{w} d\partial\Omega, \quad (\text{A.12})$$

$$\int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} d\Omega = 0. \quad (\text{A.13})$$

equações satisfeitas para todo $\mathbf{w} \in W$ e $q \in Q$, em que $\mathbf{b} \in (L^2(\Omega))^2$ representa um campo de força introduzido que, por exemplo, pode representar a força gravitacional influente no sistema ou surgir por um efeito *electrophoretic*, método de separação de constituintes das soluções coloidais (certas misturas químicas) por meio de um campo elétrico sobre as partículas carregadas eletricamente. O tensor $\mathbf{D}$ representa o tensor simétrico $\mathbf{D} = [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t]$ e produto definido por dois pontos $(:)$, chama-se dupla contração e pode ser encontrado no trabalho de Rodrigues [32].

Os últimos termos da equação (A.12) expressam o trabalho virtual da fronteira $\partial\Omega$ e a interface Γ , respectivamente, e considerando

$$\mathcal{P}_{\partial\Omega}(\mathbf{w}) = \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \mathbf{w} d\partial\Omega \quad \text{e} \quad \mathcal{P}_{\Gamma}(\mathbf{w}) = \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma}_t \cdot \mathbf{w} d\partial\Omega$$

e a equação (A.12) pode ser reescrita como

$$\int_{\Omega} 2\mu \mathbf{D} \mathbf{u} : \mathbf{D} \mathbf{w} d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{w} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{b} \cdot \mathbf{w} d\Omega + \mathcal{P}_{\partial\Omega}(\mathbf{w}) + \mathcal{P}_{\Gamma}(\mathbf{w}) \quad (\text{A.14})$$

Observe que há a intenção de tratar os efeitos de tensão superficial, forças que atuam entre os fluidos, ou seja, ao longo da interface entre os fluidos deve se ter $\mathcal{P}_{\Gamma} \neq 0$.

A.2 Princípio das potências virtuais na superfície

Seja $\beta(\mathbf{x})$ uma função de densidade de energia superficial, um campo escalar que pode ser interpretado como a energia que seria necessária oferecer às superfícies dos diferentes fluidos, para que estas superfícies aumentassem sua área em uma unidade [12]. Tais superfícies possuem uma espessura muito fina (na casa de Angstrom) e se comportam como uma membrana elástica.

Considere que não há pontos ou linhas de contato (entre fluido e a fronteira rígida) sobre a interface, como nos casos de um problema com superfície livre, ou superfície fechada no caso tridimensional, por exemplo. Suponha que essa interface possui uma heterogeneidade na sua composição que leva a uma energia correspondente denominada por $\mathcal{E}(\Gamma)$, definida por:

$$\mathcal{E}(\Gamma) =: \int_{\Gamma} \beta(\mathbf{x}) d\Gamma, \quad (\text{A.15})$$

em que $\beta(\mathbf{x})$ pode depender de algumas variáveis como a posição $\mathbf{x}$, a deformação que a interface sofre e curvatura local. Para determinar a potência virtual sobre a interface $\mathcal{P}_{\Gamma}$, parte-se de que $(-\mathcal{P}_{\Gamma})$ é igual a derivada de forma de $\mathcal{E}(\Gamma)$ quando a interface Γ se desloca na direção de um campo vetorial $\mathbf{v}$.

Para definir a derivada de forma é necessário tomar um campo vetorial $\mathbf{v}$ definido em Γ e definir a seguinte família de transformações:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{v}} : \Gamma \times (-\epsilon_0, \epsilon_0) &\longrightarrow \Omega \\ (\mathbf{x}, \epsilon) &\longmapsto \mathbf{x} + \epsilon \mathbf{v}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

que transforma Γ em uma família de interfaces perturbadas $\Gamma_{\mathbf{v},\epsilon}$. Para cada ϵ e $\mathbf{v}$ fixos, a inversa da transformação $\boldsymbol{\varphi}_{\mathbf{v}}$ é denotada por $\psi_{\mathbf{v}}(\cdot, \epsilon)$ e a energia da superfície perturbada será denotada por

$$\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}, \epsilon) = \int_{\Gamma_{\mathbf{v},\epsilon}} \beta(\mathbf{y}) d\Gamma_{\mathbf{v},\epsilon} = \int_{\Gamma_{\mathbf{v},\epsilon}} \beta(\psi(\mathbf{x}, \epsilon)) d\Gamma_{\mathbf{v},\epsilon}, \quad (\text{A.16})$$

com $\mathbf{y} \in \Gamma_{\mathbf{v},\epsilon}$. Fazendo uma mudança de variável, pelos resultados calculo diferencial e integral, a última equação (A.16) pode ser reescrita como:

$$\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}, \epsilon) = \int_{\Gamma} \beta(\mathbf{x}) J_{\Gamma}(\mathbf{x}, \epsilon) d\Gamma \quad (\text{A.17})$$

em que se estabelece a relação $J_{\Gamma}(\mathbf{x}, \epsilon) = \frac{d\Gamma_{\mathbf{v},\epsilon}}{d\Gamma}$, para $J_{\Gamma}(\mathbf{x}, \epsilon)$ a matriz jacobiana superficial da transformação $\varphi_{\mathbf{v}}$ no ponto $\mathbf{x}$. Tendo o suficiente para definir a derivada de forma de $\mathcal{E}(\Gamma)$.

Definição 17 *Uma derivada de forma da energia $\mathcal{E}(\Gamma)$, é a taxa de sua variação na direção de um campo vetorial $\mathbf{v}$, e é representado por:*

$$\left. \frac{d}{d\mathcal{E}} \right|_{\epsilon=0} \mathcal{E}(\Gamma_{\mathbf{v},\epsilon}) = d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) =: \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}, h) - \mathcal{E}(\Gamma)}{h}. \quad (\text{A.18})$$

Para os resultados que serão apresentados a seguir, todas as definições da Seção 2.1 serão utilizadas.

Para um dado campo vetorial $\mathbf{v}(\mathbf{x})$, a sua projeção é dada pelo campo vetorial $\hat{\mathbf{v}}$ que pode ser decomposto em suas componentes normal e tangencial

$$\hat{\mathbf{v}} = \hat{v}_n \hat{\mathbf{n}} + \hat{\mathbf{v}}_{\tau}, \quad (\text{A.19})$$

com $\hat{v}_n = \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \mathbf{v}(\Pi_{\Gamma}(\mathbf{x})) \cdot \mathbf{n}(\Pi_{\Gamma}(\mathbf{x}))$, que é produto escalar entre dois vetores, portanto é um escalar e o vetor tangente é descrito por $\hat{\mathbf{v}}_{\tau} = \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{v}}$, em que $\mathbf{P}$ é uma matriz de projeção definida como $P_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j$, sua construção pode ser encontrada em [23]. Especificando o vetor tangente:

$$\hat{\mathbf{v}}_{\tau} = \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{v}} = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v}(\Pi_{\Gamma}(\mathbf{x})), \quad (\text{A.20})$$

o produto definido pelo operador $\otimes$ é dito produto diádico, equivalente a multiplicação matricial $\mathbf{u} \otimes \mathbf{v} = \mathbf{u}\mathbf{v}^T$, para $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$. Em notação matricial, a equação (A.20) é equivalente à

$$\left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} n_1 n_1 & n_1 n_2 \\ n_2 n_1 & n_2 n_2 \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1 - n_1 n_1)v_1 - n_1 n_2 v_2 \\ -n_2 n_1 v_1 + (1 - n_2 n_2)v_2 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.21})$$

Manipulando a matriz obtém-se

$$\hat{\mathbf{v}}_{\tau} = \mathbf{v}(\Pi_{\Gamma}(\mathbf{x})) - [\mathbf{v}(\Pi_{\Gamma}(\mathbf{x}))\mathbf{n}]\mathbf{n}. \quad (\text{A.22})$$

A partir destas extensões obtidas para um vetor e suas componentes normal e tangencial, verifica-se como será dada a extensão para a transformação φ da equação (2.2), quando esta é estendida para D , e como tratar o gradiente aplicado a esta extensão.

Pela **Definição 6** de extensão de funções, a transformação φ estendida ao conjunto D é expressa da seguinte forma

$$\hat{\varphi}(\mathbf{x}, s) = \mathbf{x} + s\hat{\mathbf{v}}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in D, s \in (-s_0, s_0), \quad (\text{A.23})$$

tomando $\hat{\mathbf{v}}$ e s fixos, e omitindo o parâmetro s e $\mathbf{x}$ para não carregar a notação, vamos calcular o gradiente desta transformação. Seja F uma transformação tal que $F = \nabla \hat{\varphi}$,

dessa forma

$$\begin{aligned}
F &= \nabla \hat{\varphi} \\
&= \nabla \varphi(\Pi_\Gamma(\mathbf{x})) \\
&= \nabla(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}) + s\mathbf{v}(\Pi_\Gamma(\mathbf{x}))) \\
&= \nabla \Pi_\Gamma(\mathbf{x}) + s\nabla \hat{\mathbf{v}} \\
&= \mathbf{I} + s\nabla(\hat{v}_n \hat{\mathbf{n}} + \hat{\mathbf{v}}_\tau) \\
&= \mathbf{I} + s\nabla \hat{v}_n \hat{\mathbf{n}} + s\hat{v}_n \nabla \hat{\mathbf{n}} + s\nabla \hat{\mathbf{v}}_\tau \\
&= \mathbf{I} + s(\hat{\mathbf{n}} \otimes \nabla \hat{v}_n + \hat{v}_n \nabla \hat{\mathbf{n}} + \nabla \hat{\mathbf{v}}_\tau).
\end{aligned}$$

Portanto, $F = \mathbf{I} + s(\hat{\mathbf{n}} \otimes \nabla \hat{v}_n + \hat{v}_n \nabla \hat{\mathbf{n}} + \nabla \hat{\mathbf{v}}_\tau)$, a partir de propriedades presentes no livro de Gurtin [14]. Tomando a transformação inversa como $\hat{\varphi}^{-1} = \mathbf{y} - s\hat{\mathbf{v}}$, com $\hat{\mathbf{v}}$ fixo, temos que o gradiente desta será dado por:

$$\nabla \hat{\varphi}^{-1} = \mathbf{I} - s\nabla \hat{\mathbf{v}}, \quad (\text{A.24})$$

se aplicarmos os mesmos passos quando definimos F ao lado direito da equação (A.24), obtemos:

$$\nabla \hat{\varphi}^{-1} = \mathbf{I} - s(\hat{\mathbf{n}} \otimes \nabla \hat{v}_n + \hat{v}_n \nabla \hat{\mathbf{n}} + \nabla \hat{\mathbf{v}}_\tau). \quad (\text{A.25})$$

Agora definindo o escalar J em função de $\nabla \hat{\varphi}$, dessa forma

$$J = \det(\nabla \hat{\varphi}) = \det(\mathbf{I} + s\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}), \quad (\text{A.26})$$

e fazendo algumas manipulações algébricas

$$J = 1 + s(\hat{v}_n \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} + \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}_\tau). \quad (\text{A.27})$$

Assumindo a relação apresentada em [4]

$$\mathbf{d}\mathbf{a} = J(\nabla \varphi^{-1})^T \mathbf{d}\mathbf{A} \quad (\text{A.28})$$

para reescrever a equação (A.28), substituindo $\nabla \varphi^{-1}$ pela expressão obtida em (A.25) e J pelo obtido em (A.27), escrevendo

$$\mathbf{d}\mathbf{a} = [1 + s(\hat{v}_n \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} + \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}_\tau)]\mathbf{d}\mathbf{A} - s[\nabla \hat{v}_n \otimes \hat{\mathbf{n}} + (\nabla \hat{\mathbf{v}}_\tau)^T]\mathbf{d}\mathbf{A}. \quad (\text{A.29})$$

Considerando os resultados de análise, sabemos que o gradiente de uma função que descreve uma curva de nível, em um dado ponto $\mathbf{x}$, é sempre normal a curva neste ponto, e normal ao vetor tangente a função.

Recordando que foi tomado $J_\Gamma(\mathbf{x}, s) = \frac{d\Gamma_{\mathbf{w},s}}{d\Gamma}$ na Seção A.2, temos a equação (A.29) reescrita como

$$d\Gamma_{\mathbf{v},s} = (1 + s\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}})d\Gamma = [1 + s(\hat{v}_n \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} + \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}_\tau)]d\Gamma \quad (\text{A.30})$$

utilizando a equação de energia de perturbação superficial (A.16) e a definição de derivada de forma (**Definição 17**), escrevemos primeiramente

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}, s) &= \int_{\Gamma_{\mathbf{v},s}} \beta(\psi(\mathbf{x}, s)) d\Gamma_{\mathbf{v},s} \\
&= \int_{\Gamma} \beta(\mathbf{x}) J_\Gamma(\mathbf{x}, s) d\Gamma \\
&= \int_{\Gamma} \beta(1 + s\nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}) d\Gamma.
\end{aligned}$$

Aplicando a definição da derivada de forma

$$\begin{aligned}
 d\mathcal{E}(\Gamma, \mathbf{v}) &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{\int_{\Gamma} \beta(1 + s \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}) d\Gamma - \int_{\Gamma} \beta d\Gamma}{s} \\
 &= \int_{\Gamma} \left(\lim_{s \rightarrow 0} \frac{s \beta \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}}{s} \right) d\Gamma \\
 &= \int_{\Gamma} \beta \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} d\Gamma \\
 &= \int_{\Gamma} \beta (\hat{v}_n \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} + \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}_\tau) d\Gamma.
 \end{aligned} \tag{A.31}$$

A expressão final de (A.31) representa a derivada de forma da energia $\mathcal{E}(\Gamma)$, uma força oposta a potência virtual $\mathcal{P}_\Gamma(\mathbf{v})$. Procurando ter bem definido os operadores sobre a interface e para tentar chegar em uma expressão para a descrição do problema que envolvam quantidades já conhecidas como a curvatura, vamos apresentar um breve estudo sobre os operadores que são definidos na superfície.

Lema 2 *Seja f uma função escalar definida e diferenciável em uma região Γ , então*

$$\int_{\Gamma} \nabla_\Gamma f d\Gamma = \int_{\Gamma} f \kappa \mathbf{n} d\Gamma + \int_{\partial\Gamma} f \mathbf{v} d\Gamma \tag{A.32}$$

e para um campo vetorial $\mathbf{q}$ diferenciável

$$\int_{\Gamma} \nabla_\Gamma \cdot \mathbf{q} d\Gamma = \int_{\Gamma} \kappa \mathbf{n} \cdot \mathbf{q} d\Gamma + \int_{\partial\Gamma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{q} d\partial\Gamma \tag{A.33}$$

A demonstração do **Lema 2** pode ser encontrado em Buscaglia e Ausas [4].

Observação 2 *Tomando a derivada de forma da energia (A.31), com $\mathbf{q} = \gamma \mathbf{v}$:*

$$d\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} \gamma \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} d\Gamma, \tag{A.34}$$

para γ uma constante de tensão superficial. Pela definição do gradiente superficial (**Definição 7**), escreve-se $\gamma \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} = \nabla_\Gamma \cdot (\gamma \mathbf{v}) - \nabla_\Gamma \gamma \cdot \mathbf{v}$. A igualdade da equação (A.34) se torna

$$d\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} \nabla_\Gamma \cdot (\gamma \mathbf{v}) d\Gamma - \int_{\Gamma} \nabla_\Gamma \gamma \cdot \mathbf{v} d\Gamma \tag{A.35}$$

e aplicando o **Lema 2** no primeiro termo da equação anterior

$$\int_{\Gamma} \nabla_\Gamma \cdot (\gamma \mathbf{v}) d\Gamma = \int_{\Gamma} \kappa \mathbf{n} \cdot (\gamma \mathbf{v}) + \int_{\partial\Gamma} \mathbf{w} \cdot (\gamma \mathbf{v}) d\partial\Gamma. \tag{A.36}$$

Substituindo (A.36) em (A.35)

$$d\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} \kappa \mathbf{n} \cdot (\gamma \mathbf{v}) d\Gamma + \int_{\partial\Gamma} \mathbf{w} \cdot (\gamma \mathbf{v}) d\partial\Gamma - \int_{\Gamma} \nabla_\Gamma \gamma \cdot \mathbf{v} d\Gamma. \tag{A.37}$$

Se γ é uma constante então conseguimos determinar a forma final para a derivada de forma da energia

$$d\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v}) = \int_{\Gamma} (\gamma \kappa \mathbf{n} - \nabla_\Gamma \gamma) \cdot \mathbf{v} d\Gamma + \int_{\partial\Gamma} \gamma \mathbf{w} \cdot \mathbf{v} d\partial\Gamma. \tag{A.38}$$

A energia potencial $d\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{v})$ corresponde a uma distribuição de forças $\mathbf{A} = -\gamma \kappa \mathbf{n} + \nabla_\Gamma \gamma$ em Γ . A força de tensão superficial $\gamma \kappa \mathbf{n}$, que está presente sobre a interface será a única força a ser considerada quando γ constante e a interface ou superfície é fechada e a força de *Marangoni* é considerada quando γ varia ao longo da interface. Para o caso em que há linhas de contato na geometria (veja Figura 1.1 (b)) há uma força sobre a linha de contato determinada por $T = \gamma \mathbf{w}$.

A.3 Conclusão

Pelas definições apresentadas concluimos que a equação (A.14) pode ser reescrita tendo os dois últimos termos representado apenas por $\mathcal{P}_\Gamma(\mathbf{w})$ que expressa as variações de energia sobre a interface e linhas de contato da seguinte forma:

$$\mathcal{P}_\Gamma(\mathbf{w}) = -d\mathcal{E}(\Gamma; \mathbf{w}) = - \int_\Gamma (\gamma \kappa \hat{\mathbf{n}} - \nabla_\Gamma \gamma) \cdot \mathbf{w} \, d\Gamma - \int_{\partial\Gamma} \gamma \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} \, d\partial\Gamma \quad (\text{A.39})$$

Considerando apenas problemas sem linhas de contato e que possuem a tensão superficial γ constante, podemos desprezar a atuação da força de Marangoni e o termo que envolve a integral sobre a linha de contato. Dessa forma, a equação (A.39) se resume a:

$$\mathcal{P}_\Gamma(\mathbf{w}) = - \int_\Gamma -\gamma \kappa \hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{w} \, d\Gamma. \quad (\text{A.40})$$

Ainda podemos aplicar a relação obtida em (2.24), reescrevendo novamente a expressão (A.39):

$$\mathcal{P}_\Gamma(\mathbf{w}) = - \int_\Gamma \gamma \nabla^2 \mathbf{I}_d \cdot \mathbf{w} \, d\Gamma \quad (\text{A.41})$$

Observe que utilizar a expressão via Laplaciano superficial (A.41) permite, por exemplo, não ter de calcular a curvatura explicitamente, calculando apenas o vetor normal, o que também pode ser usado quando consideramos as forças sobre a linha de contato e a força de Marangoni, técnica utilizada por alguns autores que trabalham com o contexto de elementos finitos. A equação variacional final, considerando apenas a tensão superficial γ constante é escrita como:

$$\int_\Omega 2\mu D\mathbf{u} : D\mathbf{w} \, d\Omega - \int_\Omega p \nabla \cdot \mathbf{w} \, d\Omega = - \int_\Gamma \gamma \nabla^2 \mathbf{I}_d \cdot \mathbf{w} \, d\Gamma \quad (\text{A.42})$$

$$\int_\Omega q \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = 0 \quad (\text{A.43})$$

Finalmente, as equações diferenciais correspondentes a um escoamento incompressível de um fluido newtoniano com efeitos de tensão superficial

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right] = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (\text{A.44})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (\text{A.45})$$

$$\mathbf{n}^t \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \gamma \kappa, \quad \mathbf{x} \in \Gamma, \quad (\text{A.46})$$

em que as demais condições de contorno e condição inicial se mantêm as mesmas.

Movimentação da superfície livre

Para fazer a movimentação da superfície livre, atualiza-se a posição das partículas marcadoras como visto na Seção 1.3, e segundo Mangiavacchi et al. [19], para altos números de Reynolds ($Re > 50$) esta movimentação pode gerar algumas ondulações como mostra a Figura B.1, então é estudado um algoritmo já desenvolvido no *Sistema FreeFlow 2D* [20], um código implementado em C no sistema operacional LINUX, com a colaboração de alunos e professores do ICMC-USP e UNESP-Presidente Prudente. O algoritmo elimina as pequenas ondulações que surgem e que, segundo Mangiavacchi et al. [19], não são causa de um efeito físico, pois em experimentos as tensões superficiais e os efeitos viscosos não geram essas ondulações, sendo apenas causa das aproximações numéricas.

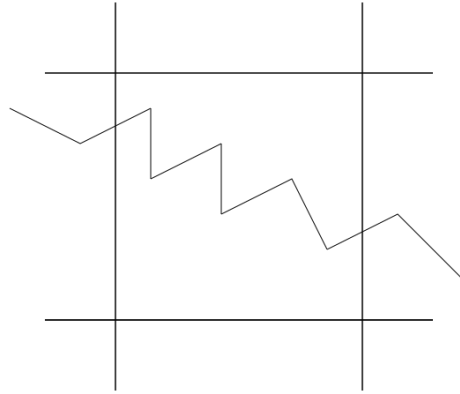


Figura B.1: Pertubações na interface causadas por aproximações numéricas em uma célula da malha euleriana.

Para eliminar essas ondulações percorre-se todas as partículas que descrevem a interface entre os fluidos e a cada partícula considera-se quatro partículas consecutivas na superfície livre: $\mathbf{x}_i$, $\mathbf{x}_{i+1}$, $\mathbf{x}_{i+2}$ e $\mathbf{x}_{i+3}$, fixando as partículas dos extremos, reposiciona-se as partículas intermediárias procurando manter a área formada pelo quadrilátero delimitado por estes pontos como ilustrado na Figura B.2.

As novas partículas $\mathbf{x}_{i+1}^*$ e $\mathbf{x}_{i+2}^*$ são reposicionadas formando um trapézio isósceles e de tal forma que a área do quadrilátero seja mantida. Para tal, é necessário dividir o quadrilátero que será modificado em dois triângulos como é possível observar na Figura B.2 e para calcular a área total, calcula-se a área de cada triângulo utilizando um resultado de geometria analítica, em que a área de um triângulo de vértices com coordenadas $\mathbf{x}_1 =$

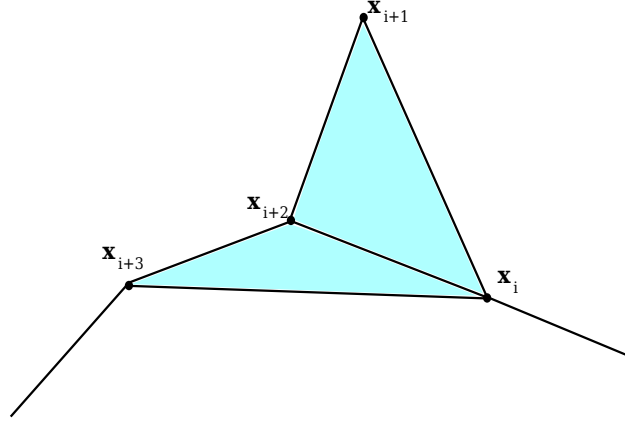


Figura B.2: Exemplo de ondulação sobre a superfície livre.

(x_1, y_1) , $\mathbf{x}_2 = (x_2, y_2)$ e $\mathbf{x}_3 = (x_3, y_3)$ é dado por

$$A_{123} = \frac{1}{2} \cdot \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

ou seja,

$$A_{123} = \frac{1}{2}((x_1 - x_2)(y_2 - y_3) + (x_3 - x_2)(y_1 - y_2)). \quad (\text{B.2})$$

Como as coordenadas dos vértices dos triângulos são conhecidas, podemos facilmente calcular sua área. Dessa forma, o trapézio tem a sua base dividida em três segmentos iguais, $L_1 = L_2 = L_3 = L$, e uma altura h , como na Figura B.3.

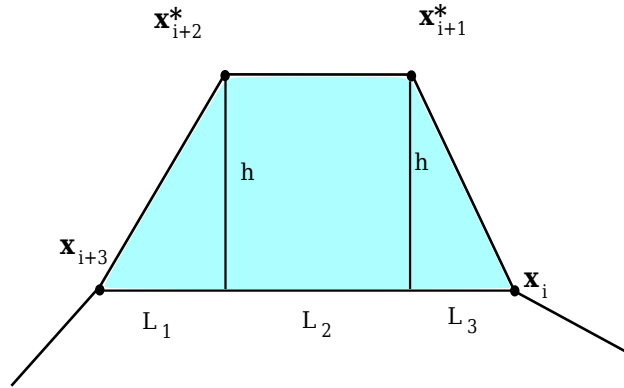


Figura B.3: Ondulação suavizada.

A medida L pode ser facilmente obtida calculando a distância entre os vértices $\mathbf{x}_i$ e $\mathbf{x}_{i+3}$ que não foram modificados, e dessa forma, sabendo que a área deve ser mantida e como esta já foi determinada, pode-se obter a medida h , para isso, considere a área dos triângulos formados na Figura B.3 por A_{Δ} e a área do retângulo como $A_{\square}$. Uma vez que a área total do trapézio $A = 2A_{\Delta} + A_{\square}$ e isolando o parâmetro h na usual fórmula da área total determinamos $h = \frac{A}{2L}$.

Para determinar as coordenadas dos novos pontos é construído um vetor unitário tangente ao segmento $\mathbf{x}_i\mathbf{x}_{i+3}$

$$\mathbf{m} = (m_x, m_y) = \frac{\mathbf{x}_{i+3} - \mathbf{x}_i}{\|\mathbf{x}_{i+3} - \mathbf{x}_i\|}, \quad (\text{B.3})$$

e a partir deste, o versor normal

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y) = (-m_y, m_x), \quad (\text{B.4})$$

então as novas partículas podem ser escritas como $\mathbf{x}_{i+1}^* = \mathbf{x}_i + L\mathbf{m} + h\mathbf{n}$ e $\mathbf{x}_{i+2}^* = \mathbf{x}_i + 2L\mathbf{m} + h\mathbf{n}$, finalizando a sequência de passos para a suavização desta região da superfície livre. Segundo Mangiavacchi et al. [19], este procedimento deve ser realizado reposicionando todos os pares de vértices adjacentes e deve ser repetido entre um intervalo de 5 a 50 passos de tempo na programação.