**Simulações de escoamentos
tridimensionais bifásicos
empregando métodos adaptativos
e modelos de campo de fase**

Rudimar Luiz Nós

TESE APRESENTADA AO
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Área de concentração: MATEMÁTICA APLICADA

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma

Co-orientador: Prof. Dr. Hector Daniel Ceniceros

*Durante a elaboração deste trabalho
o autor recebeu apoio financeiro do CNPq*

São Paulo, março de 2007

Simulações de escoamentos tridimensionais bifásicos empregando métodos adaptativos e modelos de campo de fase

*Este exemplar corresponde à redação final devidamente
corrigida e defendida por Rudimar Luiz Nós
e aprovada pela comissão julgadora.*

São Paulo, 20 de Março de 2007.

Comissão julgadora

Prof. Dr. Alexandre Megiorin Roma (Presidente)	IME-USP
Prof. Dr. Hector Daniel Ceniceros	UCSB
Prof. Dr. Julio Romano Meneghini	EP-USP
Prof. Dr. Leandro Franco de Souza	ICMC-USP
Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco	UTFPR

Limitadores do Espírito

Cada vez que se liberta o espírito humano
de uma hipótese que o limitava de modo desnecessário,
que o forçava a ver errada ou parcialmente,
a efetuar combinações errôneas,
a enveredar por sofismas em vez de articular juízos rigorosos,
presta-se-lhe já um importante serviço.
Porque o espírito humano passa então a ver
os fenômenos com maior liberdade,
passa a encará-los noutras combinações,
em diferentes relações,
ordena-os a seu modo,
e recupera a possibilidade de errar por si próprio e à sua maneira.
Coisa que é inestimável,
porque não tardará que,
na seqüência,
o espírito humano consiga descobrir os seus próprios erros.

Johann Wolfgang von Goethe [1749-1832], em “Máximas e Reflexões”

A tudo que liberta o espírito.

E à vida.

E conseqüentemente,

à Eduarda,

porque nada como uma nova vida
para dar alento e inspiração a outra.

Agradecimentos

Para o Alexandre e para o Hector,
pela paciência e orientação;

para os integrantes da comissão julgadora,
pelas valiosas contribuições;

à Olga e à Millena,
pela cooperação e amizade;

para os colegas, amigos e familiares,
pelo apoio e incentivo constantes;

para o IME/USP,
pela oportunidade de qualificação e crescimento;

à Escola Politécnica/USP,
pelo aprendizado em Mecânica dos Fluidos;

para o Laboratório de Computação Científica Avançada (LCCA)
do Centro de Computação Eletrônica (CCE) da Universidade de São Paulo,
pelo suporte computacional;

para o Departamento Acadêmico de Matemática da
UTFPR - Universidade Tecnológica Federal do Paraná,
pela liberação das atividades acadêmicas durante quatro anos;

para o Departamento de Matemática da
UCSB - University of California at Santa Barbara,
pela acolhida durante três meses e pelo suporte computacional;

à NSF - National Science Foundation,
pelo financiamento do estágio na UCSB;

à FAPESP,
pelo financiamento de parte deste trabalho (projeto 04/13781-1);

para o CNPq,
pelo financiamento de parte deste trabalho.

RESUMO

Este é o primeiro trabalho que apresenta simulações tridimensionais completamente adaptativas de um modelo de campo de fase para um fluido incompressível com densidade de massa constante e viscosidade variável, conhecido como Modelo H. Solucionando numericamente as equações desse modelo em malhas refinadas localmente com a técnica AMR, simulamos computacionalmente escoamentos bifásicos tridimensionais.

Os modelos de campo de fase oferecem uma aproximação física sistemática para investigar fenômenos que envolvem sistemas multifásicos complexos, tais como fluidos com camadas de mistura, a separação de fases sob forças de cisalhamento e a evolução de micro-estruturas durante processos de solidificação. Como as interfaces são substituídas por delgadas regiões de transição (interfaces difusivas), as simulações de campo de fase requerem muita resolução nessas regiões para capturar corretamente a física do problema em estudo. Porém essa não é uma tarefa fácil de ser executada numericamente. As equações que caracterizam o modelo de campo de fase contêm derivadas de ordem elevada e intrincados termos não lineares, o que exige uma estratégia numérica eficiente capaz de fornecer precisão tanto no tempo quanto no espaço, especialmente em três dimensões.

Para obter a resolução exigida no tempo, usamos uma discretização semi-implícita de segunda ordem para solucionar as equações acopladas de Cahn-Hilliard e Navier-Stokes (Modelo H). Para resolver adequadamente as escalas físicas relevantes no espaço, utilizamos malhas refinadas localmente que se adaptam dinamicamente para recobrir as regiões de interesse do escoamento, como por exemplo, as vizinhanças das interfaces do fluido.

Demonstramos a eficiência e a robustez de nossa metodologia com simulações que incluem a separação dos componentes de uma mistura bifásica, a deformação de gotas sob cisalhamento e as instabilidades de Kelvin-Helmholtz.

ABSTRACT

This is the first work that introduces 3D fully adaptive simulations for a phase field model of an incompressible fluid with matched densities and variable viscosity, known as Model H. Solving numerically the equations of this model in meshes locally refined with AMR technique, we simulate computationally tridimensional two-phase flows.

Phase field models offer a systematic physical approach to investigate complex multiphase systems phenomena such as fluid mixing layers, phase separation under shear and microstructure evolution during solidification processes. As interfaces are replaced by thin transition regions (diffuse interfaces), phase field simulations need great resolution in these regions to capture correctly the physics of the studied problem. However, this is not an easy task to do numerically. Phase field model equations have high order derivatives and intricate nonlinear terms, which require an efficient numerical strategy that can achieve accuracy both in time and in space, especially in three dimensions.

To obtain the required resolution in time, we employ a semi-implicit second order discretization scheme to solve the coupled Cahn-Hilliard/Navier-Stokes equations (Model H). To resolve adequately the relevant physical scales in space, we use locally refined meshes which adapt dynamically to cover special flow regions, e.g., the vicinity of the fluid interfaces.

We demonstrate the efficiency and robustness of our methodology with simulations that include spinodal decomposition, the deformation of drops under shear and Kelvin-Helmholtz instabilities.

Índice

Lista de Algoritmos	xix
Lista de Figuras	xxi
Lista de Tabelas	xxvii
Lista de Símbolos	xxxix
Introdução	1
1 Modelo matemático	9
1.1 Modelo de campo de fase	9
1.1.1 Propriedades da interface	11
1.2 Equação de Cahn-Hilliard	13
1.3 Equações de Navier-Stokes	14
1.4 Modelo H	16
1.4.1 Adimensionalização das equações	16
1.5 Sumário das equações do Modelo H	22
2 Metodologia numérica	23
2.1 A estratégia semi-implícita	23
2.2 Discretização temporal	24

2.2.1	Equação de Cahn-Hilliard	24
2.2.2	Equações de Navier-Stokes	28
2.2.3	Método de Projeção	30
2.2.4	Modelo H dimensional	34
2.2.5	Modelo H adimensional	36
2.3	Algoritmo para o Modelo H	38
2.4	Discretização espacial	38
2.4.1	Domínio	38
2.4.2	Variáveis	41
2.5	Estabilidade	43
2.6	Sumário das equações discretas do Modelo H	46
3	Malha composta adaptativa	47
3.1	Malhas refinadas localmente	47
3.2	Técnicas <i>multinível-multigrid</i>	51
3.2.1	Restrição	56
3.2.2	Prolongamento	57
3.2.3	<i>Multigrid</i> para a equação de Cahn-Hilliard	60
3.3	Células fantasmas	64
3.4	Estratégia para o refinamento adaptativo	65
4	Verificação do esquema numérico: soluções manufaturadas	67
4.1	Análise da convergência numérica	69
4.2	Laplaciano de quarta ordem	71
4.3	Equação de Cahn-Hilliard	72
4.4	Equações de Navier-Stokes	73
4.4.1	Propriedades físicas constantes	74
4.4.2	Propriedades físicas variáveis	78
4.5	Modelo H	83
5	Verificação do esquema numérico: comparações com a literatura	87

5.1	Equação de Cahn-Hilliard	87
5.1.1	Separação dos componentes de uma mistura bifásica	87
5.2	Modelo H	95
5.2.1	Deformação da gota esférica sob cisalhamento	95
5.2.2	Instabilidades de Kelvin-Helmholtz	107
Conclusão		115
A Interface de transição		119
B Alguns exemplos da estratégia semi-implícita		123
C Máquinas usadas na execução do código computacional		125
D Estimativas para a memória RAM		127
E Estrutura de dados		129
Referências Bibliográficas		142
Índice Remissivo		143

Lista de Algoritmos

1	Passos para a solução numérica das equações dimensionais do Modelo H. .	38
2	Seleção do passo temporal de integração para a equação de Cahn-Hilliard. .	44
3	Ciclo V para malha uniforme.	54
4	Ciclo V para malha composta.	55

Lista de Figuras

1	Gel composto por gotas de água em óleo [103].	1
2	Representação da interface entre dois fluidos: (a) modelo de interface difusiva; (b) modelo de interface de espessura nula (<i>sharp interface model</i>). . .	2
3	(a) Coalescência de gotas; (b) ruptura de gotas [107].	3
4	Simulação bidimensional da separação dos componentes de uma mistura bifásica com a equação de Cahn-Hilliard nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t = 0.01$, (c) $t = 0.04$, (d) $t = 0.045$, (e) $t = 0.09$, (f) $t \approx 0.23$, (g) $t \approx 0.66$, (h) $t \approx 1.1$, (i) $t \approx 1.83$, (j) $t \approx 3.78$, (l) $t \approx 5.73$ e (m) $t = 10$ - I [29].	4
5	Simulação bidimensional da separação dos componentes de uma mistura bifásica com a equação de Cahn-Hilliard nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t = 0.005$, (c) $t = 0.01$, (d) $t = 0.02$, (e) $t = 0.04$, (f) $t = 0.075$, (g) $t \approx 0.13$, (h) $t \approx 0.39$, (i) $t \approx 0.66$, (j) $t \approx 1.83$, (l) $t \approx 6.71$ e (m) $t = 10$ - II [29].	5
1.1	Componentes de uma mistura bifásica.	9
1.2	(a) $f(\phi) = \frac{1}{4}(\phi - 1)^2(\phi + 1)^2$, $\alpha = \beta = 1$; (b) $f(\phi)$ para $-1 \leq \phi \leq 1$	11
2.1	$\tanh\{50[z - (0.1 \sin(2\pi x) + 0.5)]\}$ com três níveis de refinamento local: (a) isosuperfície, (b) malhas do nível mais fino, (c)-(d) refinamento local. O nível mais grosso corresponde a uma malha $32 \times 32 \times 32$	39
2.2	$\tanh\{50[z - (0.1 \sin(2\pi x) + 0.5)]\}$ com três níveis de refinamento local: (a)-(b) corte em $y = 0.5$. O nível mais grosso corresponde a uma malha $32 \times 32 \times 32$	40

2.3	Local da célula computacional onde as variáveis discretas são calculadas: variáveis escalares como a pressão, a densidade de massa, a viscosidade, a mobilidade e o parâmetro de ordem são calculados no centro da célula computacional (A); a componente da velocidade na direção x é calculada no centro da face yz (B); a componente da velocidade na direção y é calculada no centro da face xz (C); a componente da velocidade na direção z é calculada no centro da face xy (D)	41
2.4	Célula da malha deslocada indicando a posição espacial da variável escalar ψ e das componentes da variável vetorial $\mathbf{u} = (u, v, w)$	42
3.1	(a) Malha composta em um domínio computacional $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, com cortes em (b) $x = 0.5$, (c) $y = 0.3$ e (d) $z = 0.5$	48
3.2	(d) Malhas apropriadamente aninhadas; (a)-(c) malhas não apropriadamente aninhadas.	50
3.3	<i>Multigrid</i> para três níveis: R representa a restrição, S representa a solução na malha mais grossa e P representa o prolongamento.	52
3.4	Ciclo V, ciclo W e <i>full multigrid</i> para 4 níveis na malha uniforme.	53
3.5	<i>Multigrid</i> para 5 níveis na malha composta: ciclos V e W adaptado. NPL representa os níveis físicos e NVL os níveis virtuais.	53
3.6	Restrição no <i>multigrid</i> para variável calculada no centro da célula computacional: os resíduos y_f nos oito centros na malha fina determinam o resíduo y_g no centro na malha grossa.	57
3.7	Restrição no <i>multigrid</i> para variável calculada no centro das faces (a) yz , (b) xz e (c) xy : os resíduos y_f nos quatro centros na malha fina determinam o resíduo y_g no centro na malha grossa.	57
3.8	Interpolação trilinear no <i>multigrid</i> para variável calculada no centro da célula computacional: as correções y_g nos oito centros na malha grossa determinam a correção y_f no centro na malha fina.	58
3.9	Interpolação bilinear no <i>multigrid</i> para variável calculada no centro das faces (a) yz , (b) xz e (c) xy : as correções y_g nos quatro centros na malha grossa determinam a correção y_f no centro na malha fina.	59
3.10	Células computacionais marcadas para o refinamento localizado.	66
4.1	(a) Malha composta por dois níveis físicos, com cortes em (b) $x = 0.1$, (c) $x = 0.3$, (d) $y = 0.2$, (e) $z = 0.3$ e (f) $z = 0.375$. O nível físico mais grosso corresponde a uma malha $32 \times 32 \times 32$	68

5.1	Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: (a) energia livre do sistema; (b) valor médio ϕ_m do campo de fase ϕ	89
5.2	Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: (a) tempo de CPU; (b) número de células computacionais.	89
5.3	Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t \approx 7.6 \times 10^{-3}$, (c) $t \approx 3.8 \times 10^{-2}$ e (d) $t \approx 5.3 \times 10^{-2}$	90
5.4	Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 7.6 \times 10^{-2}$, (b) $t \approx 9.1 \times 10^{-2}$, (c) $t \approx 0.11$ e (d) $t \approx 0.16$	91
5.5	Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 0.21$, (b) $t \approx 0.25$, (c) $t \approx 0.33$ e (d) $t \approx 0.46$	92
5.6	Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 0.77$, (b) $t \approx 1.39$, (c) $t \approx 1.89$ e (d) $t \approx 2.58$	93
5.7	Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 5.58$, (b) $t \approx 8.21$, (c) $t \approx 10.65$ e (d) $t \approx 23.00$	94
5.8	Gráfico da função $f(x) = \tanh(x)$	96
5.9	Configuração inicial da gota: (a) isosuperfície, (b) malhas do último nível físico, (c) corte transversal e oblíquo, (d)-(f) corte em $y = 0.5$ mostrando a região de transição e o refinamento localizado.	97
5.10	Eixos ℓ e s e ângulo de inclinação φ da gota deformada em $y = 0.5$	98
5.11	Deformação da gota esférica em função do número de capilaridade para cinco valores tabelados.	99
5.12	Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) isosuperfície da configuração inicial; isosuperfície do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$	100

- 5.13 Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) configuração inicial em $y = 0.5$; configuração do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$ em $y = 0.5$ 101
- 5.14 Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) níveis de refinamento da configuração inicial em $y = 0.5$; níveis de refinamento do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$ em $y = 0.5$ 102
- 5.15 Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) malha composta da configuração inicial em $y = 0.5$; malha composta do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$ em $y = 0.5$ 103
- 5.16 Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$, $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$: corte em $y = 0.5$ para (a) pressão, (b) componente u da velocidade, (c) componente v da velocidade e (d) componente w da velocidade. 104
- 5.17 Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$, $Ca = 5.0 \times 10^{-3}$: (a) isosuperfície; (b) configuração em $y = 0.5$, (c) níveis de refinamento em $y = 0.5$ e (d) malha composta em $y = 0.5$ 105
- 5.18 Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$, $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$: (a)-(c) viscosidade constante ($\theta_{max} = 1 \rightarrow \theta = 1$); (d)-(f) viscosidade variável ($\theta_{max} = 2 \rightarrow \theta = 0.5\phi + 1.5$). 106
- 5.19 Instabilidades de Kelvin-Helmholtz visíveis em nuvens sobre o monte Duval na Austrália [105]. 107
- 5.20 Instabilidades de Kelvin-Helmholtz formadas pela interação de duas camadas da atmosfera do planeta Saturno [105]. 107
- 5.21 Condição inicial para as componentes da velocidade na simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz. 108
- 5.22 Instabilidades de Kelvin-Helmholtz definidas por ϕ , $Pe = 200$, $Re = 5000$, $Ca = 200$: simulação nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t \approx 0.53$, (c) $t \approx 0.65$, (d) $t \approx 0.70$, (e) $t \approx 0.79$ e (f) $t \approx 0.87$ 110
- 5.23 Instabilidades de Kelvin-Helmholtz definidas por ϕ , $Pe = 200$, $Re = 5000$, $Ca = 200$: simulação nos tempos (a) $t \approx 0.97$, (b) $t \approx 1.08$, (c) $t \approx 1.22$, (d) $t \approx 1.31$, (e) $t \approx 1.34$ e (f) $t \approx 1.44$ 111

5.24	Instabilidades de Kelvin-Helmholtz definidas por ϕ , $Pe = 200$, $Re = 5000$, $Ca = 200$: simulação nos tempos (a) $t \approx 1.48$, (b) $t \approx 1.52$, (c) $t \approx 1.63$, (d) $t \approx 1.69$, (e) $t \approx 1.77$ e (f) $t \approx 1.83$	112
5.25	Isosuperfície (esquerda) e malha composta $32 \times 32 \times 32$ L4 em $y = 0.5$ (direita) na simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz nos tempos (a) $t \approx 1.52$, (b) $t \approx 1.63$ e (c) $t \approx 1.69$	113
5.26	Simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz no tempo $t \approx 1.69$: (a) campo de pressão, (b) componente u da velocidade, (c) componente v da velocidade e (d) componente w da velocidade.	114
E.1	Esquema da estrutura de dados empregada no código computacional: NVL é o número de níveis empregados apenas pelo <i>multigrid</i> e NPL é o número de níveis físicos.	130

Lista de Tabelas

2.1	Método semi-implícito para o Modelo H	34
4.1	Ordem do operador Laplaciano.	71
4.2	Razão de convergência para a equação de Cahn-Hilliard em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e mobilidade constante.	73
4.3	Razão de convergência para a equação de Cahn-Hilliard em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e mobilidade constante.	73
4.4	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade constantes.	75
4.5	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade constantes.	76
4.6	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade constantes.	77
4.7	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade constantes.	78

4.8	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade variáveis.	79
4.9	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis.	80
4.10	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade variáveis.	81
4.11	Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis.	82
4.12	Razão de convergência para as equações do Modelo H em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e mobilidade e viscosidade constantes.	85
4.13	Razão de convergência para as equações do Modelo H em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no <i>multigrid</i> , condições de contorno periódicas e mobilidade e viscosidade constantes.	86
5.1	Deformação D e ângulo φ aproximados obtidos para a gota esférica em um escoamento cisalhante com cinco diferentes números de capilaridade Ca e viscosidade constante.	98
5.2	Deformação D e ângulo φ aproximados para um número de capilaridade fixo e viscosidade constante e variável.	99
B.1	Equação difusiva solucionada com o Método de Euler Implícito e $a = 0.5$ em uma malha uniforme bidimensional com condições de contorno periódicas, número de ciclos V (MV) no <i>multigrid</i> e TS passos no tempo.	124
B.2	Equação difusiva solucionada com o Método de Euler Implícito e $a = 1.0$ em uma malha uniforme bidimensional com condições de contorno periódicas, número de ciclos V (MV) no <i>multigrid</i> e TS passos no tempo.	124
B.3	Equação difusiva solucionada com o Método de Gear e $a = 1.0$ em uma malha uniforme bidimensional com condições de contorno periódicas, número de ciclos V (MV) no <i>multigrid</i> e TS passos no tempo.	124

D.1	Estimativa de memória RAM necessária à alocação das NV variáveis do modelo matemático: Cahn-Hilliard, Navier-Stokes e Modelo H.	128
-----	--	-----

Lista de Símbolos

Constantes/Variáveis

ϕ : parâmetro de ordem ou campo de fase

ϕ_m : valor médio do campo de fase ϕ

ϕ_{max} : valor máximo do campo de fase ϕ

$F[\phi]$: energia livre do sistema

$f(\phi)$: densidade de energia típica

$f'(\phi)$: taxa de variação da densidade de energia típica

α, β : constantes positivas associadas à densidade de energia típica

$\mu(\phi)$: potencial químico

$\phi_{\pm}, \phi_0(z)$: raízes de $\mu(\phi) = 0$

δ_{int} : espessura da interface de transição

ϵ, ξ : constantes positivas relacionadas à espessura da interface de transição

σ : tensão superficial

M : mobilidade

M_c : constante positiva (mobilidade característica) associada à mobilidade

$\mathbf{u}$: campo de velocidade

u, v, w : componentes da velocidade $\mathbf{u}$

$\mathbf{u}^*$: campo de velocidade auxiliar associado ao Método de Projeção

u^*, v^*, w^* : componentes da velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$

p : pressão

q : correção de pressão

$\mathbf{n}$: vetor unitário normal à fronteira do domínio

ρ : densidade de massa ou massa específica

η : viscosidade dinâmica ou molecular

θ : viscosidade adimensional

λ : mobilidade adimensional

γ : constante relacionada à mobilidade adimensional

K : número de Cahn

Pe : número de Péclet

Re : número de Reynolds

Ca : número de capilaridade

τ : constante positiva associada à majoração da taxa de variação da densidade de energia típica

$\alpha_2, \alpha_1, \alpha_0, \beta_1, \beta_0$: constantes associadas ao Método de Gear

ϕ_1, ϕ_2 : variáveis auxiliares relacionadas ao campo de fase ϕ

$\tilde{M}$: constante positiva empregada na estratégia semi-implícita para a equação de Cahn-Hilliard dimensional

$\tilde{\lambda}$: constante positiva usada na estratégia semi-implícita para a equação de Cahn-Hilliard adimensional

$\tilde{\eta}$: constante positiva utilizada na estratégia semi-implícita para as equações de conservação de quantidade de movimento dimensionais

θ_{max} : constante positiva (razão de viscosidade) empregada na estratégia semi-implícita para as equações de conservação de quantidade de movimento adimensionais

Discretização espacial e temporal/*Multigrid*

$\Omega = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2] \times [A_3, B_3]$: domínio computacional

$\Delta x, \Delta y, \Delta z$: passo espacial nas direções x, y e z

Nx, Ny, Nz : número de células computacionais nas direções x, y e z

NGC : número de células fantasmas necessárias ao prolongamento, à relaxação e ao cálculo do resíduo e da correção

NBC : número de células fantasmas que compreende NGC e as células usadas para armazenar as condições de contorno

NCELL : número de células computacionais

NPL : número de níveis físicos

NVL : número de níveis virtuais

LBOT : nível físico formado pela união das malhas mais grossas

LTOP : nível físico formado pela união das malhas mais finas

Δt : passo temporal

R : razão de convergência

Operadores

G, ∇ : gradiente

$D, \nabla \cdot$: divergente

L, ∇^2 : Laplaciano

∇^4 : biarmônico

Introdução

Gotas e bolhas são delimitadas por interfaces entre dois fluidos. Essas interfaces estão presentes em emulsões, espumas e polímeros, como ilustra a Figura 1.

Figura 1: Gel composto por gotas de água em óleo [103].

Os fluidos citados anteriormente são usados em uma grande variedade de aplicações industriais. Logo, a compreensão da dinâmica dos mesmos é de interesse científico e tecnológico. Simulações numéricas podem contribuir nesse aspecto prevendo o comportamento desses fluidos em diversas situações. Entretanto, é um desafio considerável capturar numericamente todas as escalas de tempo e de comprimento envolvidas nesses fenômenos.

O desafio é ainda amplificado pela necessidade de cálculos fisicamente realísticos em três dimensões.

(a)

(b)

Figura 2: Representação da interface entre dois fluidos: (a) modelo de interface difusiva; (b) modelo de interface de espessura nula (*sharp interface model*).

Os modelos empregados para simular escoamentos multifásicos, entre estes os escoamentos de fluidos como os mencionados inicialmente, podem ser classificados em dois grupos: modelos de interface difusiva e modelos de interface de espessura nula (*sharp interface models*). Em um modelo de interface difusiva, a fronteira ou a interface entre os fluidos é representada com uma espessura finita não nula (Figura 2 - (a)) e as propriedades materiais do fluido, como densidade de massa e viscosidade, variam suavemente através da região de transição caracterizada por essa interface. O uso de uma interface difusiva [42, 65, 71, 79, 91] é compatível com a existência física de uma transição rápida, porém suave, das propriedades materiais do fluido através da interface. Em contraste a um modelo de interface difusiva, em um *sharp interface model* [51, 54, 75, 95] a fronteira livre entre os fluidos é representada com espessura nula (Figura 2 - (b)) e as propriedades materiais do fluido são descontínuas através dela. Essa forma de representar a interface tem sido empregada com sucesso na simulação de uma grande variedade de escoamentos incompressíveis. Contudo, o modelo é inapropriado do ponto de vista físico quando a espessura da interface é comparável à escala de comprimento do fenômeno que está sendo analisado [3], o que ocorre

quando a interface é submetida a mudanças topológicas, como na coalescência e ruptura de gotas (Figura 3), ou quando a interface intercepta a si mesma.

Nos últimos anos, os modelos de campo de fase conservativos têm se mostrado ferramentas viáveis para a simulação numérica de escoamentos multifásicos [4, 5, 17, 32, 52, 56, 57, 96, 97, 98, 99]. Esses modelos constituem uma classe particular dos modelos de interface difusiva e caracterizam-se como métodos do tipo *capturing* [3, 4, 16, 18, 31, 32,

Figura 3: (a) Coalescência de gotas; (b) ruptura de gotas [107].

52, 56, 88, 96], ou seja, neles a interface entre os fluidos é definida implicitamente por intermédio de uma função escalar que atua como um indicador da presença do fluido. Métodos desse tipo capturam o movimento da interface em uma malha Euleriana e preservam automaticamente as transformações na topologia da interface. Em oposição aos métodos do tipo *capturing*, os métodos do tipo *front-tracking* [43, 44, 45, 74, 90] utilizam uma malha separada para perseguir explicitamente o movimento da interface e determinar dessa forma uma representação precisa da topologia interfacial.

Em um modelo de campo de fase as transições abruptas nas interfaces entre os diferentes fluidos são substituídas por camadas delgadas nas quais as forças interfaciais são distribuídas suavemente. A idéia básica é introduzir um *parâmetro de ordem* ou *campo de fase* ϕ que descreve em cada instante o estado do fluido. Esse parâmetro de ordem varia continuamente sobre as finas camadas interfaciais, tornando-se mais uniforme no interior das fases. Talvez o exemplo mais conhecido de modelo de campo de fase seja o descrito pela equação de Cahn-Hilliard [24, 25], empregada para simular a separação dos componentes de uma mistura bifásica, como mostram as Figuras 4 e 5 para diferentes condições iniciais.

Os modelos de campo de fase têm uma formulação variacional que facilita a inclusão de

Figura 4: Simulação bidimensional da separação dos componentes de uma mistura bifásica com a equação de Cahn-Hilliard nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t = 0.01$, (c) $t = 0.04$, (d) $t = 0.045$, (e) $t = 0.09$, (f) $t \approx 0.23$, (g) $t \approx 0.66$, (h) $t \approx 1.1$, (i) $t \approx 1.83$, (j) $t \approx 3.78$, (l) $t \approx 5.73$ e (m) $t = 10$ - I [29].

Figura 5: Simulação bidimensional da separação dos componentes de uma mistura bifásica com a equação de Cahn-Hilliard nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t = 0.005$, (c) $t = 0.01$, (d) $t = 0.02$, (e) $t = 0.04$, (f) $t = 0.075$, (g) $t \approx 0.13$, (h) $t \approx 0.39$, (i) $t \approx 0.66$, (j) $t \approx 1.83$, (l) $t \approx 6.71$ e (m) $t = 10$ - II [29].

diferentes efeitos físicos. Assim, escolhendo-se um modelo de campo de fase apropriado, podemos estudar de maneira natural as transições em escoamentos tais como a coalescência e a ruptura da interface, bem como a camada de mistura entre diferentes tipos de fluido. Nos modelos conservativos, a evolução do parâmetro de ordem é governada por uma equação de quarta ordem do tipo Cahn-Hilliard e, devido ao tênue equilíbrio entre os termos não lineares e os termos difusivos, as finas camadas interfaciais não se deterioram dinamicamente. Contudo, a solução numérica desses modelos é uma tarefa árdua porque, além de sua complexa estrutura matemática, precisamos resolver simultaneamente, com precisão, o escoamento macroscópico e as camadas interfaciais extremamente delgadas, assim como diversas escalas temporais.

Há avanços recentes na simulação numérica dos modelos de campo de fase, dentre os quais destacamos o uso de métodos espectrais [101], de métodos *multigrid* não lineares [56, 57], de métodos lineares semi-implícitos [4] e de métodos adaptativos em duas dimensões [29, 38, 99].

Fundamentados nas pesquisas recentes de Badalassi, Cenicerós e Banerjee [4] e de Cenicerós e Roma [29], apresentamos neste trabalho uma metodologia nova para efetuar simulações tridimensionais completamente adaptativas de um modelo de campo de fase para um fluido incompressível de densidade de massa constante e viscosidade variável, conhecido como Modelo H. Neste modelo, as equações de Navier-Stokes são acopladas à equação de Cahn-Hilliard pela adoção de uma força de superfície dependente do campo de fase.

A metodologia numérica aplicada à resolução das equações que constituem o Modelo H consiste no uso de uma discretização temporal linear semi-implícita de segunda ordem [4] combinada a um Método de Projeção [8, 22, 33, 58, 70, 92, 93] e de uma acurada discretização espacial em malhas refinadas localmente que se adaptam dinamicamente às características importantes do escoamento [29], como vorticidade ou a interface de transição entre dois fluidos. Isto nos garante precisão tanto no tempo quanto no espaço.

A utilização de um esquema temporal semi-implícito mostra-se vantajosa uma vez que um tratamento totalmente implícito produz esquemas numéricos computacionalmente caros, enquanto que discretizações explícitas conduzem a instabilidades numéricas ou impõem restrições impraticáveis no passo temporal. Já o emprego do refinamento local evita a discretização e solução das equações do Modelo H em malhas uniformes, o

que em três dimensões pode conduzir a problemas proibitivamente grandes à capacidade computacional disponível atualmente. No Apêndice D, mostramos algumas estimativas de memória RAM necessária ao armazenamento de variáveis em dupla precisão em aritmética de 64 bits quando se emprega malhas uniformes na discretização do domínio espacial.

Na discretização temporal das equações do Modelo H aplicamos o Método de Gear [39, 40, 41] com coeficientes variáveis no tempo e os sistemas lineares provenientes da discretização são solucionados com técnicas *multinível-multigrid* [1, 2, 21, 26, 56, 66, 94]. A equação de Cahn-Hilliard é reescrita na forma de um sistema de equações diferenciais parciais para evitar a discretização direta do termo biarmônico e possibilitar o emprego de um *multigrid* linear. Quanto à discretização do domínio, utilizamos o refinamento local adaptativo introduzido por Berger [7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] na solução numérica de equações diferenciais parciais hiperbólicas. Optamos por essa técnica devido à sua eficiência e baixo custo computacional na remalhagem.

Finalizando, podemos afirmar que somos os primeiros a apresentar simulações tridimensionais completamente adaptativas do Modelo H. Organizamos o trabalho descrevendo o modelo matemático no Capítulo 1, a metodologia numérica no Capítulo 2, a estrutura de uma malha composta e as técnicas *multinível-multigrid* no Capítulo 3, testes suaves para verificação do esquema numérico no Capítulo 4 e algumas simulações com a equação de Cahn-Hilliard e com as equações do Modelo H no Capítulo 5. Na conclusão, sugerimos formas de aperfeiçoar o trabalho e de dar continuidade ao mesmo e nos apêndices, apresentamos informações complementares.

Modelo matemático

Iniciamos este capítulo mencionando as características de um modelo de campo de fase para em seguida descrever as equações de Cahn-Hilliard, de Navier-Stokes e do Modelo H. As equações que integram o Modelo H são adimensionalizadas e os grupos adimensionais - números de Péclet, de Reynolds, de capilaridade e de Cahn - provenientes da mesma são apresentados.

1.1 Modelo de campo de fase

Figura 1.1: Componentes de uma mistura bifásica.

Nos modelos de campo de fase, o estado do sistema (ou do fluido) é descrito em cada instante de tempo por um *parâmetro de ordem* ou *campo de fase* ϕ . Em fluidos bifásicos isotérmicos, ϕ é uma medida da concentração relativa de dois componentes. Na Figura 1.1, o parâmetro de ordem ϕ varia de -1 a 1 . Os valores -1 e 1 representam os dois componentes da mistura ou as duas fases estáveis do fluido. A região de transição e a interface de equilíbrio são identificadas pela variação dos valores de ϕ de -1 a 1 .

A separação das fases de uma mistura nada mais é do que o resultado de uma reação química. O

termo *afinidade* - empregado pela primeira vez por Albertus Magnus em 1250 - ou a expressão *energia livre* do sistema - criada em 1870 pelo Físico-Matemático americano Willard Gibbs - é usada pelos químicos para descrever a “força” que causa uma reação química. Assim, uma reação química pode ser avaliada pelos valores da energia livre do sistema, uma vez que toda reação química conduz o sistema para um estado de equilíbrio no qual a energia livre das reações tende a um valor mínimo.

No modelo de campo de fase adotado neste trabalho, a energia livre é definida como um funcional de ϕ [4, 19, 29, 64], ou seja,

$$F[\phi] = \int_{\Omega} \left(f(\phi(\mathbf{x})) + \frac{1}{2}\epsilon^2 |\nabla\phi(\mathbf{x})|^2 \right) d\mathbf{x}, \quad (1.1)$$

onde Ω é a região do espaço ocupada pelo sistema, $\frac{1}{2}\epsilon^2 |\nabla\phi|^2$ é o termo que representa a energia interfacial, $\epsilon > 0$ é uma constante associada à espessura da interface de transição e $f(\phi)$ é a densidade de energia típica, a qual tem dois mínimos que correspondem as duas fases estáveis do fluido.

A energia livre (1.1) está sujeita à restrição de conservação de massa

$$\int_{\Omega} \phi(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x} = \phi_m |\Omega|, \quad (1.2)$$

sendo ϕ_m o valor médio do parâmetro de ordem ϕ e $|\Omega|$ o volume do domínio Ω .

O *potencial químico* é a primeira derivada funcional da energia livre (1.1)

$$\mu(\phi) = \frac{\delta F[\phi]}{\delta\phi(\mathbf{x})} = f'(\phi(\mathbf{x})) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi(\mathbf{x}). \quad (1.3)$$

O termo “potencial químico” foi introduzido por Willard Gibbs em 1876 para medir a tendência das partículas à difusão. Em uma reação química, as partículas se difundem de regiões de maior potencial químico para regiões de menor potencial químico. Quando o potencial químico é constante, temos a minimização do funcional $F[\phi]$ com respeito às variações da função ϕ sujeita à restrição (1.2). Essa minimização fornece o perfil de equilíbrio na interface.

1.1.1 Propriedades da interface

Usamos a função *double well potential* (“poço duplo”) [4, 29, 64]

$$\begin{aligned} f(\phi) &= \frac{\alpha}{4} \left(\phi - \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \right)^2 \left(\phi + \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \right)^2 \\ &= \frac{\alpha}{4} \left(\frac{\beta}{\alpha} - \phi^2 \right)^2 = \frac{\alpha}{4} \phi^4 - \frac{\beta}{2} \phi^2 + \frac{\beta^2}{4\alpha} \end{aligned} \quad (1.4)$$

para a densidade de energia típica, sendo α e β constantes positivas.

Adotando-se $\alpha = \beta = 1$, a função (1.4) tem um máximo local em $\left(0, \frac{1}{4}\right)$ e dois mínimos locais em $(-1, 0)$ e $(1, 0)$, como mostra a Figura 1.2. Os mínimos locais são raízes de multiplicidade dois da função.

Figura 1.2: (a) $f(\phi) = \frac{1}{4} (\phi - 1)^2 (\phi + 1)^2$, $\alpha = \beta = 1$; (b) $f(\phi)$ para $-1 \leq \phi \leq 1$.

O perfil de equilíbrio em $\mathbb{R}^n$ é dado pelas soluções da equação

$$\mu(\phi) = \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} = f'(\phi) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi = \alpha \phi^3 - \beta \phi - \epsilon^2 \nabla^2 \phi = 0. \quad (1.5)$$

As soluções

$$\phi_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} = \pm 1 \quad (1.6)$$

são estáveis, uniformes e representam as fases coexistentes. A terceira solução

$$\phi_0(z) = \phi_+ \tanh\left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi}z\right) \quad (1.7)$$

é não uniforme, unidimensional na direção z e satisfaz as condições de fronteira

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \phi_0(z) = \pm\phi_+ = \pm 1. \quad (1.8)$$

A solução (1.7), calculada no Apêndice A, foi encontrada inicialmente por van der Waals [91] para descrever o perfil de equilíbrio de uma interface plana normal à direção z , de espessura proporcional a

$$\xi = \sqrt{\frac{\epsilon^2}{\beta}}, \quad (1.9)$$

a qual separa as duas fases.

A espessura da interface de equilíbrio δ_{int} é definida como sendo a distância de $\phi_0(z_1) = 0.9\phi_-$ a $\phi_0(z_2) = 0.9\phi_+$. Dessa forma temos que

$$\begin{aligned} \phi_0(z_1) &= \phi_+ \tanh\left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi}z_1\right) = 0.9\phi_- \\ z_1 &= -\sqrt{2}\xi \tanh^{-1}(0.9) \\ \phi_0(z_2) &= \phi_+ \tanh\left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi}z_2\right) = 0.9\phi_+ \\ z_2 &= \sqrt{2}\xi \tanh^{-1}(0.9) \\ \delta_{int} &= |z_2 - z_1| = 2\sqrt{2}\xi \tanh^{-1}(0.9) \approx 4.164\xi. \end{aligned} \quad (1.10)$$

A espessura dada pela expressão (1.10) contém 98.5% da força de tensão superficial [52].

Em equilíbrio, a tensão superficial σ de uma interface é igual à integral da densidade de energia livre ao longo da interface. Segundo Bray [19], a tensão superficial para uma interface plana é dada por

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \epsilon^2 \left(\frac{d\phi_0}{dz}\right)^2 dz. \quad (1.11)$$

Utilizando as relações

$$\epsilon^2 \left(\frac{d\phi_0}{dz}\right)^2 = 2f(\phi_0) \quad (1.12)$$

e

$$dz = \frac{\epsilon d\phi_0}{\sqrt{2f(\phi_0)}}, \quad (1.13)$$

provenientes da manipulação da equação (1.5), os limites em (1.8) (Apêndice A) e a função (1.4), podemos determinar o valor da integral (1.11). Assim sendo,

$$\begin{aligned} \sigma &= \int_{-\infty}^{+\infty} 2f(\phi_0) dz \\ &= 2 \int_{-\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}}^{+\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}} f(\phi_0) \frac{\epsilon}{\sqrt{2f(\phi_0)}} d\phi_0 = \sqrt{2}\epsilon \int_{-\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}}^{+\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}} \sqrt{f(\phi_0)} d\phi_0 \\ &= \frac{\sqrt{\alpha}}{2} \sqrt{2}\epsilon \int_{-\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}}^{+\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}} \left(\frac{\beta}{\alpha} - \phi_0^2 \right) d\phi_0 = \frac{\sqrt{2}\sqrt{\alpha}}{2} \epsilon \left[\frac{\beta}{\alpha} \phi_0 - \frac{\phi_0^3}{3} \right]_{-\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}}^{+\sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}} \\ &= \frac{\sqrt{2}\sqrt{\alpha}}{2} \epsilon \frac{4}{3} \left(\frac{\beta}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \epsilon \frac{\beta^{\frac{3}{2}}}{\alpha}. \end{aligned}$$

Usando a expressão (1.9) modificada na integral anterior, a tensão superficial passa a ser dada por

$$\sigma = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\beta^{\frac{3}{2}} \xi}{\alpha}. \quad (1.14)$$

A partir das igualdades (1.7) e (1.14) podemos controlar a espessura da interface e a tensão superficial através dos parâmetros ϵ , α e β .

1.2 Equação de Cahn-Hilliard

A equação de Cahn-Hilliard é usada para modelar a separação dos componentes de uma mistura bifásica.

Cahn e Hilliard [24, 25] generalizaram o problema de dependência temporal aproximando os fluxos difusivos interfaciais proporcionalmente aos gradientes do potencial químico e forçando a conservação do campo, ou seja

$$\frac{\partial \phi(t, x, y, z)}{\partial t} = -\nabla \cdot J, \quad (1.15)$$

com $J = -M(\phi) \nabla \mu$.

Empregando a definição de J em (1.15) obtemos o sistema

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot [M(\phi) \nabla \mu(\phi)] \quad (1.16)$$

$$\mu(\phi) = f'(\phi) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi. \quad (1.17)$$

Nas equações (1.16)-(1.17), $\phi = \phi(t, x, y, z)$, com $-1 \leq \phi(t, x, y, z) \leq 1$, é o parâmetro de ordem, $\mu(\phi)$ é o potencial químico e $M(\phi) > 0$ é a *mobilidade* ou *coeficiente Onsager*. Para esta última usamos, assim como Badalassi et al [4], a forma

$$M(\phi) = M_c (1 - \gamma \phi^2), \quad (1.18)$$

onde M_c e γ são constantes.

Na equação (1.17), ϵ é a mesma constante de (1.1) relacionada à espessura da interface e $f'(\phi)$ é a taxa de variação da densidade de energia típica. Assumindo para a densidade de energia típica a função (1.4), temos que

$$f'(\phi) = \alpha \phi^3 - \beta \phi. \quad (1.19)$$

1.3 Equações de Navier-Stokes

As equações de Navier-Stokes permitem simular o escoamento de fluidos viscosos compressíveis ou incompressíveis em regime laminar ou turbulento. Essas equações estão fundamentadas na Mecânica Clássica e na Termodinâmica e satisfazem os princípios físicos de conservação de quantidade de movimento, de massa e de energia.

A conservação de quantidade de movimento é expressa pelas equações [4]

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + F, \quad (1.20)$$

onde $\mathbf{u} = (u, v, w)$ representa o campo de velocidade, p a pressão, ρ a densidade de massa (massa específica) do fluido, η a viscosidade dinâmica ou molecular do fluido e F um termo forçante a ser definido posteriormente.

Para um fluido Newtoniano, o termo

$$\nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)], \quad (1.21)$$

no qual T denota o operador transposição, agrega à equação (1.20) a tensão devido às forças viscosas. Em três dimensões, a notação matricial desse termo corresponde a

$$\begin{bmatrix} \eta \nabla^2 u + \eta \frac{\partial}{\partial x} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial z} \\ \eta \nabla^2 v + \eta \frac{\partial}{\partial y} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta}{\partial z} \\ \eta \nabla^2 w + \eta \frac{\partial}{\partial z} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial \eta}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (1.22)$$

Em (1.22), ∇^2 é o operador Laplaciano e $\nabla \cdot \mathbf{u}$ é o divergente do campo de velocidade.

Assumindo que o escoamento é incompressível, isto é, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, podemos reescrever (1.21) como

$$\nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] = \begin{bmatrix} \eta \nabla^2 u + 2 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial z} \\ \eta \nabla^2 v + \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta}{\partial z} \\ \eta \nabla^2 w + \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} + 2 \frac{\partial w}{\partial z} \frac{\partial \eta}{\partial z} \end{bmatrix}. \quad (1.23)$$

Se além da incompressibilidade do escoamento, assumirmos também que a viscosidade η do fluido é constante, o termo (1.23) se reduz a

$$\nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] = \begin{bmatrix} \eta \nabla^2 u \\ \eta \nabla^2 v \\ \eta \nabla^2 w \end{bmatrix} \quad (1.24)$$

e a equação (1.20) a

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{u} + F. \quad (1.25)$$

1.4 Modelo H

O *Modelo H*, segundo a classificação estabelecida por Hohenberg e Halperin [50], é um sistema que acopla as equações de Navier-Stokes à equação de Cahn-Hilliard, constituindo um modelo de campo de fase para fluidos bifásicos de mesma densidade de massa com mobilidade e viscosidade variáveis.

O acoplamento da equação de Cahn-Hilliard com as equações de Navier-Stokes ocorre pelo acréscimo do termo convectivo $\mathbf{u} \cdot \nabla \phi$ à equação (1.16) e pela adoção de um termo forçante F em (1.20) que contém uma força de superfície dependente do campo de fase [4]. Na ausência de outras forças externas

$$F = \mu(\phi) \nabla \phi. \quad (1.26)$$

Dessa maneira, o Modelo H é caracterizado pelas equações

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot [M(\phi) \nabla \mu(\phi)], \quad (1.27)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mu(\phi) \nabla \phi, \quad (1.28)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.29)$$

nas quais $\mathbf{u}$ é o campo de velocidade, p é a pressão, ρ é a densidade de massa, η é a viscosidade dinâmica ou molecular, ϕ é o parâmetro de ordem, μ é o potencial químico e M é a mobilidade.

A equação (1.27) modela a criação, a evolução e a dissolução de interfaces controladas pelo campo de fase.

1.4.1 Adimensionalização das equações

Adimensionalizamos as equações que compõem o Modelo H utilizando as variáveis

$$\bar{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{U_c}, \quad \bar{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{L_c}, \quad \bar{t} = \frac{t}{T_c}, \quad \bar{p} = \frac{p L_c}{\eta_c U_c}, \quad \bar{\eta} = \frac{\eta}{\eta_c}, \quad \bar{M} = \frac{M}{M_c} \quad e \quad \bar{\phi} = \frac{\phi}{\phi_+}, \quad (1.30)$$

nas quais $\bar{\mathbf{u}} = (\bar{u}, \bar{v}, \bar{w})$ e $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$, L_c é o comprimento característico dado pelo comprimento do domínio, isto é, $L_c = L$, U_c é a velocidade característica, cujo valor depende do problema em estudo, T_c é o tempo característico requerido para o fluido ser transportado a uma distância da ordem do comprimento do domínio (na ausência de capilaridade), ou seja, $T_c = \frac{L}{U_c}$, η_c é a viscosidade característica, M_c é a mobilidade característica e ϕ_+ é um dos valores de equilíbrio do campo médio do parâmetro de ordem ϕ dado por

$$\phi_+ = \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}. \quad (1.31)$$

Para definir algumas das variáveis (1.30) adotamos como comprimento característico L_c o comprimento L do domínio, diferentemente do que fazem Badalassi et al [4] e Chella e Viñals [32], que consideram o comprimento característico dado pela espessura do campo médio da interface, isto é, $L_c = \xi$. Suprimindo a barra das variáveis, reescrevemos as equações (1.27)-(1.29) na forma adimensional como sendo

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \nabla \cdot [\lambda(\phi) \nabla \mu(\phi)], \quad (1.32)$$

$$Re \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\theta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \frac{1}{Ca} \mu(\phi) \nabla \phi, \quad (1.33)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.34)$$

onde Pe é o número de Péclet, Re é o número de Reynolds, Ca é o número de capilaridade, $\theta = \bar{\eta}$ é a viscosidade adimensional, $\lambda = \bar{M}$ é a mobilidade adimensional e

$$\mu = \phi^3 - \phi - K^2 \nabla^2 \phi \quad (1.35)$$

é o potencial químico adimensional. Em (1.35),

$$K = \frac{\xi}{L} \quad (1.36)$$

é a razão entre a espessura da interface e o tamanho do domínio, conhecida como número de Cahn.

Na dedução de (1.32)-(1.34), mostraremos inicialmente a adimensionalização dos operadores gradiente e Laplaciano e do potencial químico. Para tal, utilizaremos as variáveis

(1.30), a igualdade (1.31), a relação decorrente de (1.9)

$$\epsilon^2 = \beta \xi^2 \quad (1.37)$$

e a notação $\nabla' = \left(\frac{\partial}{\partial \bar{x}}, \frac{\partial}{\partial \bar{y}}, \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \right)$.

1. Gradiente adimensional:

$$\begin{aligned} \nabla \phi &= \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y}, \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \\ \nabla \phi &= \left(\frac{\partial (\phi_+ \bar{\phi})}{\partial (L\bar{x})}, \frac{\partial (\phi_+ \bar{\phi})}{\partial (L\bar{y})}, \frac{\partial (\phi_+ \bar{\phi})}{\partial (L\bar{z})} \right) \\ \nabla \phi &= \frac{\phi_+}{L} \nabla' \bar{\phi}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

2. Laplaciano adimensional:

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi &= \nabla \cdot (\nabla \phi) = \nabla \cdot \left(\frac{\phi_+}{L} \nabla' \bar{\phi} \right) \\ \nabla^2 \phi &= \frac{\phi_+}{L^2} \nabla'^2 \bar{\phi}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

3. Potencial químico adimensional:

$$\begin{aligned} \mu &= \alpha \phi^3 - \beta \phi - \epsilon^2 \nabla^2 \phi \\ &= \alpha (\phi_+ \bar{\phi})^3 - \beta (\phi_+ \bar{\phi}) - \frac{\epsilon^2 \phi_+}{L^2} \nabla'^2 \bar{\phi} \\ &= \alpha \phi_+^3 \bar{\phi}^3 - \beta \phi_+ \bar{\phi} - \frac{\beta \xi^2 \phi_+}{L^2} \nabla'^2 \bar{\phi} \\ &= \beta \phi_+ \left[\frac{\alpha \phi_+^2}{\beta} \bar{\phi}^3 - \bar{\phi} - \left(\frac{\xi}{L} \right)^2 \nabla'^2 \bar{\phi} \right] \\ &= \beta \phi_+ \left(\bar{\phi}^3 - \bar{\phi} - K^2 \nabla'^2 \bar{\phi} \right), \quad K = \frac{\xi}{L} \\ \mu &= \beta \phi_+ \bar{\mu}, \quad \text{com} \quad \bar{\mu} = \bar{\phi}^3 - \bar{\phi} - K^2 \nabla'^2 \bar{\phi}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Com as expressões adimensionais (1.38)-(1.40), podemos agora adimensionalizar as equações do Modelo H (1.27)-(1.29). Iniciemos pela equação de Cahn-Hilliard (1.27).

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi &= \nabla \cdot [M(\phi) \nabla \mu(\phi)] \\
\frac{\partial (\phi_+ \bar{\phi})}{\partial \left(\frac{L}{U_c} \bar{t}\right)} + (U_c \bar{\mathbf{u}}) \cdot \left(\frac{\phi_+}{L} \nabla' \bar{\phi}\right) &= \nabla \cdot \left[M_c \bar{M} \left(\frac{\partial (\beta \phi_+ \bar{\mu})}{\partial (L \bar{x})}, \frac{\partial (\beta \phi_+ \bar{\mu})}{\partial (L \bar{y})}, \frac{\partial (\beta \phi_+ \bar{\mu})}{\partial (L \bar{z})} \right) \right] \\
\frac{U_c \phi_+}{L} \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\phi} \right) &= \nabla \cdot \left[M_c \bar{M} \frac{\phi_+ \beta}{L} \left(\frac{\partial \bar{\mu}}{\partial \bar{x}}, \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial \bar{y}}, \frac{\partial \bar{\mu}}{\partial \bar{z}} \right) \right] \\
\frac{U_c \phi_+}{L} \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\phi} \right) &= \nabla \cdot \left(M_c \bar{M} \frac{\phi_+ \beta}{L} \nabla' \bar{\mu} \right) \\
\frac{U_c \phi_+}{L} \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\phi} \right) &= \frac{M_c \phi_+ \beta}{L^2} \nabla' \cdot (\bar{M} \nabla' \bar{\mu}) \\
\frac{U_c \phi_+}{L} \frac{L^2}{M_c \phi_+ \beta} \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\phi} \right) &= \nabla' \cdot (\bar{M} \nabla' \bar{\mu}) \\
\frac{LU_c}{\beta M_c} \left(\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\phi} \right) &= \nabla' \cdot (\lambda \nabla' \bar{\mu}) \tag{1.41}
\end{aligned}$$

Em (1.41), o número adimensional de Péclet

$$Pe = \frac{LU_c}{\beta M_c} \tag{1.42}$$

fornece a razão entre a escala de tempo difusiva $\frac{L^2}{\beta M_c}$ e a escala de tempo convectiva $\frac{L}{U_c}$.

Dessa forma, a expressão

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\phi} = \frac{1}{Pe} \nabla' \cdot (\lambda \nabla' \bar{\mu})$$

corresponde à equação de Cahn-Hilliard adimensional (1.32) se desprezarmos $'$ e $\bar{\cdot}$. Consideramos nessa equação um perfil para a mobilidade adimensional λ dado por

$$\lambda = 1 - \gamma \phi^2, \tag{1.43}$$

com $0 \leq \gamma \leq 1$. Se $\gamma \rightarrow 0$, a dinâmica da separação de fase é controlada pela difusão típica; se $\gamma \rightarrow 1$, a dinâmica é controlada pela difusão interfacial.

Vejamos agora como ficam as equações de conservação de quantidade de movimento (1.28) adimensionalizadas.

$$\begin{aligned}
\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) &= -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mu(\phi) \nabla \phi \\
\rho \left[\frac{\partial (U_c \bar{\mathbf{u}})}{\partial \left(\frac{L}{U_c} \bar{t} \right)} + (U_c \bar{\mathbf{u}}) \cdot \left(\frac{U_c}{L} \nabla' \bar{\mathbf{u}} \right) \right] &= -\nabla \left(\frac{\eta_c U_c}{L} \bar{p} \right) + \nabla \cdot \left[\eta_c \bar{\eta} \frac{U_c}{L} (\nabla' \bar{\mathbf{u}} + \nabla' \bar{\mathbf{u}}^T) \right] + \frac{\beta \phi_+^2}{L} \bar{\mu} \nabla' \bar{\phi} \\
\frac{\rho U_c^2}{L} \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\mathbf{u}} \right) &= -\frac{\eta_c U_c}{L^2} \nabla' \bar{p} + \frac{\eta_c U_c}{L^2} \nabla' \cdot [\bar{\eta} (\nabla' \bar{\mathbf{u}} + \nabla' \bar{\mathbf{u}}^T)] + \frac{\beta \phi_+^2 L \eta_c U_c}{L^2 \eta_c U_c} \bar{\mu} \nabla' \bar{\phi} \\
\frac{\rho U_c^2}{L} \frac{L^2}{\eta_c U_c} \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\mathbf{u}} \right) &= -\nabla' \bar{p} + \nabla' \cdot [\bar{\eta} (\nabla' \bar{\mathbf{u}} + \nabla' \bar{\mathbf{u}}^T)] + \frac{\beta \phi_+^2 L}{\eta_c U_c} \bar{\mu} \nabla' \bar{\phi} \\
\frac{\rho U_c L}{\eta_c} \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\mathbf{u}} \right) &= -\nabla' \bar{p} + \nabla' \cdot [\theta (\nabla' \bar{\mathbf{u}} + \nabla' \bar{\mathbf{u}}^T)] + \frac{\beta^2 L}{\alpha \eta_c U_c} \bar{\mu} \nabla' \bar{\phi} \quad (1.44)
\end{aligned}$$

Temos dois números adimensionais na igualdade (1.44). O número de Reynolds

$$Re = \frac{\rho U_c L}{\eta_c} \quad (1.45)$$

representa a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas. Quando $Re > 1$, as forças inerciais superam as forças viscosas; quando $Re < 1$, as forças viscosas se sobrepõem às forças inerciais. O número de capilaridade

$$Ca = \frac{\alpha \eta_c U_c}{\beta^2 L} \quad (1.46)$$

é a razão entre as forças viscosas e as forças de tensão superficial (ou capilaridade), sendo expresso de forma geral pela igualdade

$$Ca = \frac{\eta U}{g_c \sigma}, \quad (1.47)$$

onde η é a viscosidade, U é a velocidade, σ é a tensão superficial e g_c é uma constante dimensional. Se $Ca > 1$, prevalecem as forças viscosas; se $Ca < 1$, os efeitos da tensão superficial sobrepujam as forças viscosas.

Empregando para a tensão superficial σ o valor dado pela equação (1.14), obtemos

$$g_c = \frac{3\sqrt{2}L}{4\xi} \quad (1.48)$$

quando comparamos as expressões (1.46) e (1.47). Com (1.48), reescrevemos (1.47) como

$$\begin{aligned} Ca &= \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\xi}{L} \frac{\eta_c U_c}{\sigma} \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{3} K \frac{\eta_c U_c}{\sigma}. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Podemos agora então afirmar que a expressão

$$Re \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{t}} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla' \bar{\mathbf{u}} \right) = -\nabla' \bar{p} + \nabla' \cdot [\theta (\nabla' \bar{\mathbf{u}} + \nabla' \bar{\mathbf{u}}^T)] + \frac{1}{Ca} \bar{\mu} \nabla' \bar{\phi}$$

corresponde às equações de conservação de quantidade de movimento adimensionais (1.33) se novamente suprimirmos ' e $\bar{\cdot}$. Para estas equações, consideramos a viscosidade η como uma função linear do parâmetro de ordem ϕ . Assim, se $\eta_- \leq \eta \leq \eta_+$, sendo η_- e η_+ respectivamente os valores mínimo e máximo da viscosidade, e $\eta_c = \eta_-$, adotamos

$$\theta = \frac{\theta_{max} - 1}{2} \phi + \frac{\theta_{max} + 1}{2}, \quad (1.50)$$

onde $\theta_{max} = \frac{\eta_+}{\eta_-}$ é a razão de viscosidade. Dessa forma, η muda automaticamente através da interface com um perfil similar à função tanh [4].

Finalmente, a adimensionalização da equação de conservação de massa (1.29).

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{1}{L} \nabla' \cdot (U_c \bar{\mathbf{u}}) &= 0 \\ \nabla' \cdot \bar{\mathbf{u}} &= 0 \end{aligned}$$

Desprezando ' e $\bar{\cdot}$ em

$$\nabla' \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0,$$

esta corresponde à equação de conservação de massa na forma adimensional (1.34).

1.5 Sumário das equações do Modelo H

- Modelo H dimensional

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot [M(\phi) \nabla \mu(\phi)]$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mu(\phi) \nabla \phi$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

- Modelo H adimensional

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \nabla \cdot [\lambda(\phi) \nabla \mu(\phi)]$$

$$Re \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\theta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \frac{1}{Ca} \mu(\phi) \nabla \phi$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Metodologia numérica

O enfoque deste capítulo é a estruturação de um esquema numérico robusto para o Modelo H, necessário devido à presença de termos não lineares e/ou de alta ordem. Apresentamos a discretização temporal semi-implícita das equações de Cahn-Hilliard, Navier-Stokes e do modelo H, assim como as discretizações espacial e do domínio. Na discretização temporal da equação de Cahn-Hilliard, introduzimos uma forma alternativa para reescrever essa equação. Na discretização temporal das equações de conservação de quantidade de movimento, discutimos o Método de Projeção utilizado para determinar o campo de velocidade auxiliar u^* que corrige posteriormente a pressão e o campo de velocidade. Por fim, citamos os critérios que garantem a estabilidade do esquema numérico na evolução temporal.

2.1 A estratégia semi-implícita

A estratégia semi-implícita [4, 35, 46] usa uma idéia simples que funciona bem para equações predominantemente difusivas, tais como

$$u_t = \nabla \cdot (\chi \nabla u), \quad \chi > 0, \quad (2.1)$$

porém é menos eficiente para problemas predominantemente dispersivos [30].

A equação (2.1) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \nabla^2 u + f(u), \quad (2.2)$$

onde a é uma constante e

$$f(u) = \nabla \cdot (\chi \nabla u) - a \nabla^2 u. \quad (2.3)$$

Quando tratamos na equação (2.2) os termos $a \nabla^2 u$ e $f(u)$ implicitamente e explicitamente, respectivamente, obtemos uma discretização semi-implícita que pode ser facilmente solucionada. Com estimativas de energia pode-se mostrar que uma discretização de Euler de primeira ordem é incondicionalmente estável se

$$a \geq \frac{1}{2} \max\{\chi\}. \quad (2.4)$$

Desde que o erro de truncamento é dissipativo e proporcional a a , considera-se

$$a = \frac{1}{2} \max\{\chi\} \quad (2.5)$$

como um valor ótimo. Apresentamos no Apêndice B um exemplo que corrobora essas estimativas.

2.2 Discretização temporal

Antes de descrever a discretização das equações, reescrevemos as mesmas aplicando a estratégia mencionada na seção anterior.

2.2.1 Equação de Cahn-Hilliard

Para tratar a não linearidade proveniente do potencial químico $\mu(\phi)$ na equação (1.16) seguimos a estratégia de Badalassi et al [4]. Substituindo a equação (1.17) na equação (1.16), temos que

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot \{M(\phi) \nabla [f'(\phi) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi]\}. \quad (2.6)$$

Lembrando que

$$\nabla f'(\phi) = f''(\phi) \nabla \phi,$$

podemos reescrever (2.6) como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \tilde{M} \nabla^2 (\tau \phi - \epsilon^2 \nabla^2 \phi) + g(\phi), \quad (2.7)$$

na qual

$$g(\phi) = \nabla \cdot [M(\phi) \nabla \mu(\phi)] - \tilde{M} \nabla^2 (\tau \phi - \epsilon^2 \nabla^2 \phi), \quad (2.8)$$

$$\tau \geq c_1 \max_{-1 \leq \phi \leq 1} \{f''(\phi)\} = c_1 \max_{-1 \leq \phi \leq 1} \{3\alpha\phi^2 - \beta\}, \quad c_1 \in \mathbb{R}_+^*, \quad (2.9)$$

$$\tilde{M} = c_2 \max_{-1 \leq \phi \leq 1} \{M(\phi)\}, \quad c_2 \in \mathbb{R}_+^*. \quad (2.10)$$

Obtemos a equação (2.7) somando e subtraindo o termo

$$\tilde{M} \nabla \cdot [\nabla (\tau \phi - \epsilon^2 \nabla^2 \phi)] \quad (2.11)$$

à equação (1.16). No termo (2.11), $f'(\phi)$ é linearizado por $\tau \phi$ e a mobilidade M é majorada por $\tilde{M}$.

Na equação (2.7), o termo (2.11) será implicitado e o termo (2.8) explicitado, caracterizando assim o método semi-implícito.

A equação (2.7) contém o termo biarmônico $\nabla^4 \phi$. Para evitar a discretização direta desse termo, consideramos as igualdades

$$\phi_1 = \phi \quad (2.12)$$

e

$$\phi_2 = \tau \phi_1 - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_1, \quad (2.13)$$

as quais permitem reescrever a equação (2.7) na forma do sistema de equações

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = \tilde{M} \nabla^2 \phi_2 + g_1(\phi_1, \phi_2), \quad (2.14)$$

$$\phi_2 = \tau \phi_1 - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_1, \quad (2.15)$$

sendo

$$g_1(\phi_1, \phi_2) = \nabla \cdot [M(\phi_1) \nabla \mu(\phi_1)] - \tilde{M} \nabla^2 \phi_2. \quad (2.16)$$

Como a mobilidade M e o potencial químico μ são funções não lineares e a equação (2.16) envolve taxas de variação dessas quantidades, vamos reescrever (2.16).

Iniciemos atribuindo para o potencial químico

$$\mu(\phi_1) = \phi_2 + f'(\phi_1) - \tau \phi_1, \quad (2.17)$$

expressão equivalente à equação (1.17).

Assim

$$\begin{aligned} g_1(\phi_1, \phi_2) &= \nabla \cdot \{M(\phi_1) \nabla [\phi_2 + f'(\phi_1) - \tau \phi_1]\} - \tilde{M} \nabla^2 \phi_2 \\ &= \nabla \cdot [M(\phi_1) \nabla \phi_2] + \nabla \cdot \{M(\phi_1) \nabla [f'(\phi_1) - \tau \phi_1]\} - \tilde{M} \nabla^2 \phi_2 \\ &= M(\phi_1) \nabla^2 \phi_2 + \nabla M(\phi_1) \cdot \nabla \phi_2 + \nabla \cdot \{M(\phi_1) \nabla [f'(\phi_1) - \tau \phi_1]\} - \tilde{M} \nabla^2 \phi_2. \end{aligned}$$

Na identidade anterior, o termo $-\tilde{M} \nabla^2 \phi_2$ é “balanceado” pelo termo $M(\phi_1) \nabla^2 \phi_2$. Utilizando nessa identidade as equivalências

$$\nabla M(\phi_1) = M'(\phi_1) \nabla \phi_1 \quad \text{e} \quad \nabla f'(\phi_1) = f''(\phi_1) \nabla \phi_1,$$

temos que

$$\begin{aligned} g_1(\phi_1, \phi_2) &= \left[M(\phi_1) - \tilde{M} \right] \nabla^2 \phi_2 + M'(\phi_1) \nabla \phi_1 \cdot \nabla \phi_2 + \\ &+ \nabla \cdot \{M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla \phi_1\}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Desenvolvendo o divergente presente em (2.18), encontramos

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \{M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla \phi_1\} &= \\ M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla^2 \phi_1 + \nabla \{M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau]\} \cdot \nabla \phi_1 &= \\ M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla^2 \phi_1 + \{[f''(\phi_1) - \tau] \nabla M(\phi_1) + M(\phi_1) \nabla [f''(\phi_1) - \tau]\} \cdot \nabla \phi_1 &= \\ M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla^2 \phi_1 + \{[f''(\phi_1) - \tau] M'(\phi_1) \nabla \phi_1 + M(\phi_1) f'''(\phi_1) \nabla \phi_1\} \cdot \nabla \phi_1 &= \\ M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla^2 \phi_1 + \{M'(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] + f'''(\phi_1) M(\phi_1)\} \nabla \phi_1 \cdot \nabla \phi_1 &= \\ M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla^2 \phi_1 + \{M'(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] + f'''(\phi_1) M(\phi_1)\} \|\nabla \phi_1\|_2^2. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Substituindo (2.19) em (2.18), chegamos a

$$\begin{aligned} g_1(\phi_1, \phi_2) &= \left[M(\phi_1) - \tilde{M} \right] \nabla^2 \phi_2 + M'(\phi_1) \nabla \phi_1 \cdot \nabla \phi_2 + \\ &+ M(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] \nabla^2 \phi_1 + \\ &+ \{M'(\phi_1) [f''(\phi_1) - \tau] + f'''(\phi_1) M(\phi_1)\} \|\nabla \phi_1\|_2^2. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Lembrando que

$$M(\phi_1) = M_c (1 - \gamma \phi_1^2) \quad \text{e} \quad f'(\phi_1) = \alpha \phi_1^3 - \beta \phi_1,$$

temos

$$M'(\phi_1) = -2M_c\gamma\phi_1, \quad f''(\phi_1) = 3\alpha\phi_1^2 - \beta \quad \text{e} \quad f'''(\phi_1) = 6\alpha\phi_1.$$

Dessa maneira, a equação (2.20) não exige condições de contorno para o potencial químico $\mu(\phi)$ e o cálculo numérico das derivadas da mobilidade M .

Na solução das equações (2.14)-(2.15) são adotadas condições de contorno periódicas ou de fluxo nulo

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi_1 = 0 \quad \text{e} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_2 = 0, \quad (2.21)$$

onde $\mathbf{n}$ é o vetor unitário normal à fronteira do domínio de resolução.

Na discretização temporal das equações (2.14)-(2.15), utilizamos o Método de Gear, um método de segunda ordem. Logo

$$\frac{\alpha_2\phi_1^{n+1} + \alpha_1\phi_1^n + \alpha_0\phi_1^{n-1}}{\Delta t} = \tilde{M}\nabla^2\phi_2^{n+1} + \beta_1g_1(\phi_1^n, \phi_2^n) + \beta_0g_1(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}), \quad (2.22)$$

$$\phi_2^{n+1} = \tau\phi_1^{n+1} - \epsilon^2\nabla^2\phi_1^{n+1}, \quad (2.23)$$

com

$$\begin{aligned} g_1(\phi_1^m, \phi_2^m) &= \left[M(\phi_1^m) - \tilde{M} \right] \nabla^2\phi_2^m + (-2M_c\gamma\phi_1^m) \nabla\phi_1^m \cdot \nabla\phi_2^m + \\ &+ M(\phi_1^m) [3\alpha(\phi_1^m)^2 - \beta - \tau] \nabla^2\phi_1^m + \\ &+ \{-2M_c\gamma\phi_1^m [3\alpha(\phi_1^m)^2 - \beta - \tau] + 6\alpha\phi_1^m M(\phi_1^m)\} \|\nabla\phi_1^m\|_2^2. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Isolando nas equações (2.22)-(2.23) as variáveis ϕ_1 e ϕ_2 no instante de tempo $n+1$, temos que

$$\frac{\alpha_2}{\Delta t}\phi_1^{n+1} - \tilde{M}\nabla^2\phi_2^{n+1} = -\frac{\alpha_1}{\Delta t}\phi_1^n - \frac{\alpha_0}{\Delta t}\phi_1^{n-1} + \beta_1g_1(\phi_1^n, \phi_2^n) + \beta_0g_1(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}), \quad (2.25)$$

$$\phi_2^{n+1} - \tau\phi_1^{n+1} + \epsilon^2\nabla^2\phi_1^{n+1} = 0. \quad (2.26)$$

Sendo o Método de Gear um método de dois passos no tempo, precisamos de ϕ_1 e ϕ_2 no instante de tempo t^1 . Determinamos ϕ_1^1 e ϕ_2^1 por intermédio do Método de Euler Implícito, o qual pode ser obtido das equações (2.22)-(2.23) considerando-se $\alpha_2 = 1$, $\alpha_1 = -1$, $\alpha_0 = 0$, $\beta_1 = 1$ e $\beta_0 = 0$. Nesse caso, as equações (2.25)-(2.26) são reescritas

como

$$\frac{\alpha_2}{\Delta t} \phi_1^{n+1} - \tilde{M} \nabla^2 \phi_2^{n+1} = -\frac{\alpha_1}{\Delta t} \phi_1^n + \beta_1 g_1(\phi_1^n, \phi_2^n), \quad (2.27)$$

$$\phi_2^{n+1} - \tau \phi_1^{n+1} + \epsilon^2 \nabla^2 \phi_1^{n+1} = 0. \quad (2.28)$$

Na implementação do método de Gear, os coeficientes α_2 , α_1 , α_0 , β_1 e β_0 dependem dinamicamente do passo de integração no tempo Δt , sendo obtidos por

$$\alpha_2 = \frac{\Delta t_0^2 + 2\Delta t_0 \Delta t}{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t)} = \frac{\Delta t_0 + 2\Delta t}{\Delta t_0 + \Delta t}, \quad (2.29)$$

$$\alpha_1 = -\frac{\Delta t_0^2 + 2\Delta t_0 \Delta t + \Delta t^2}{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t)} = -\frac{\Delta t_0 + \Delta t}{\Delta t_0}, \quad (2.30)$$

$$\alpha_0 = \frac{\Delta t^2}{\Delta t_0 (\Delta t_0 + \Delta t)}, \quad (2.31)$$

$$\beta_1 = \frac{\Delta t_0 + \Delta t}{\Delta t_0}, \quad (2.32)$$

$$\beta_0 = -\frac{\Delta t}{\Delta t_0}, \quad (2.33)$$

onde $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ e $\Delta t_0 = t^n - t^{n-1}$.

Quando o passo temporal é constante, temos

$$\alpha_2 = \frac{3}{2}, \quad \alpha_1 = -2, \quad \alpha_0 = \frac{1}{2}, \quad \beta_1 = 2 \quad \text{e} \quad \beta_0 = -1,$$

que são os coeficientes usuais do Método de Gear [39, 40, 41].

2.2.2 Equações de Navier-Stokes

Na solução de (1.20), utilizamos novamente a técnica de discretização semi-implícita. Majorando a viscosidade η por

$$\tilde{\eta} = c_3 \max_{\Omega} \{\eta\}, \quad c_3 \in \mathbb{R}_+^*, \quad (2.34)$$

somamos e subtraímos o termo $\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}$ às equações (1.20), obtendo

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u} + F, \quad (2.35)$$

ou

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}}{\rho} + \frac{\nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}}{\rho} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{F}{\rho} - \frac{\nabla p}{\rho}. \quad (2.36)$$

Podemos escrever (2.36) em uma notação mais simples como

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}}{\rho} + g_2(\mathbf{u}, \rho, \eta) + \frac{F}{\rho} - \frac{\nabla p}{\rho}, \quad (2.37)$$

sendo

$$g_2(\mathbf{u}, \rho, \eta) = \frac{\nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}}{\rho} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (2.38)$$

Como veremos, no lado direito de (2.37) os termos $\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}$, $\frac{F}{\rho}$ e $\frac{\nabla p}{\rho}$ serão tratados de forma implícita no tempo, enquanto que o termo $g_2(\mathbf{u}, \rho, \eta)$ será tratado de forma explícita.

Na solução de (2.37), adotamos condições de contorno periódicas ou do tipo Dirichlet para o campo de velocidade $\mathbf{u}$; para a correção do campo de pressão, condições de contorno periódicas ou homogêneas de Neumann.

Também empregamos o Método de Gear na discretização temporal de (2.37). Dessa forma

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}}{\rho^{n+1}} + \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \rho^{n+1}, \eta^n) + \\ &+ \beta_0 g_2(\mathbf{u}^{n-1}, \rho^{n+1}, \eta^{n-1}) + \frac{F^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{n+1}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

com

$$g_2(\mathbf{u}^m, \rho^w, \eta^m) = \frac{\nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)]^m - \tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^m}{\rho^w} - \mathbf{u}^m \cdot \nabla \mathbf{u}^m \quad (2.40)$$

e

$$m = n, n-1, \quad w = n+1.$$

Na discretização (2.39), os coeficientes α_2 , α_1 , α_0 , β_1 e β_0 variam temporalmente e são dados pelas expressões (2.29)-(2.33).

Usamos o Método de Euler Implícito para determinar as componentes da velocidade no instante de tempo t^1 . Para tanto, reescrevemos (2.39) como

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n}{\Delta t} &= \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}}{\rho^{n+1}} + \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \rho^{n+1}, \eta^n) \\ &+ \frac{F^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{n+1}}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

sendo $\alpha_2 = 1$, $\alpha_1 = -1$, $\alpha_0 = 0$, $\beta_1 = 1$ e $\beta_0 = 0$.

2.2.3 Método de Projeção

Solucionamos (2.39)-(2.40) através de um Método de Projeção, cuja finalidade é desacoplar os cálculos da velocidade e da pressão. Os métodos de projeção, ou métodos de passo fracionário, tiveram origem nas observações de Chorin [33] sobre o papel da pressão em escoamentos incompressíveis. Chorin constatou que a pressão não desempenha papel termodinâmico, mas força a condição de incompressibilidade, o que motivou uma discretização baseada na separação dos operadores. Nessa estratégia, velocidade e pressão são determinadas em dois passos. No primeiro, um campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ é calculado com as equações de conservação da quantidade de movimento, desprezando-se a condição de incompressibilidade. No segundo, o campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ é projetado no espaço dos campos vetoriais com divergente nulo para calcular a pressão ou a correção de pressão. Esta possibilita a atualização do campo de velocidade. A projeção que define o segundo passo é fundamentada no teorema mencionado a seguir.

Teorema 1 (Teorema de Decomposição de Hodge). *Seja D uma região do espaço (ou de um plano) com uma fronteira suave ∂D . Qualquer campo vetorial $\mathbf{w}$ em D pode ser decomposto de forma única em*

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \nabla q,$$

onde $\mathbf{u}$ tem divergente nulo e é paralelo à ∂D , isto é, $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ em ∂D .

A demonstração do Teorema 1 pode ser encontrada em Chorin [34].

Há várias discretizações para o Método de Projeção [8, 22, 33, 58, 70, 92, 93], as quais diferem na forma de calcular o campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ e o passo de projeção. Adotamos uma estratégia semi-implícita proposta por Bell, Collela e Glaz [8].

Consideremos um campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^* = (u^*, v^*, w^*)$ dado por

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^{n+1}}, \quad (2.42)$$

onde q representa a correção de pressão, e (2.39) reescrita com esse campo auxiliar $\mathbf{u}^*$ e a pressão no instante n , ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^*}{\rho^{n+1}} + \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \rho^{n+1}, \eta^n) + \\ &+ \beta_0 g_2(\mathbf{u}^{n-1}, \rho^{n+1}, \eta^{n-1}) + \frac{F^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^n}{\rho^{n+1}}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Substituindo (2.42) em (2.43), encontramos

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} &= -\frac{\nabla q^{n+1}}{\rho^{n+1}} + \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}}{\rho^{n+1}} + \frac{\tilde{\eta} \Delta t \nabla^2 \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right)}{\alpha_2 \rho^{n+1}} + \\ &+ \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \rho^{n+1}, \eta^n) + \beta_0 g_2(\mathbf{u}^{n-1}, \rho^{n+1}, \eta^{n-1}) + \\ &+ \frac{F^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^n}{\rho^{n+1}}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Subtraindo (2.44) de (2.39), obtemos

$$\nabla p^{n+1} = \nabla p^n + \nabla q^{n+1} - \frac{\tilde{\eta} \Delta t}{\alpha_2} \nabla^2 \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right). \quad (2.45)$$

A equação (2.45) garante uma aproximação de segunda ordem no tempo e no espaço para a pressão [22]. Quando a densidade de massa ρ do fluido é constante, a equação (2.45) se reduz a

$$p^{n+1} = p^n + q^{n+1} - \frac{\tilde{\eta} \Delta t \nabla^2 q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^{n+1}}. \quad (2.46)$$

Se desprezarmos o termo $\frac{\tilde{\eta} \Delta t}{\alpha_2} \nabla^2 \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right)$ em (2.45) e atualizarmos a pressão simplesmente por

$$p^{n+1} = p^n + q^{n+1}, \quad (2.47)$$

então a ordem de aproximação passa a ser pelo menos um [22]. Usamos em nossa estratégia computacional a expressão (2.47) para corrigir a pressão

Podemos assim resumir o Método de Projeção para (2.39) em cinco etapas:

- **Passo 1** Calcular o campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ empregando (2.43)

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^*}{\rho^{n+1}} + \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \rho^{n+1}, \eta^n) + \\ &+ \beta_0 g_2(\mathbf{u}^{n-1}, \rho^{n+1}, \eta^{n-1}) + \frac{F^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^n}{\rho^{n+1}}; \end{aligned}$$

- **Passo 2** Projetar o campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ com $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$ e determinar a correção de pressão q por intermédio da equação

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*; \quad (2.48)$$

- **Passo 3** Corrigir o campo de velocidade utilizando (2.42) modificada

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^{n+1}}; \quad (2.49)$$

- **Passo 4** Corrigir a pressão com (2.45)

$$\nabla p^{n+1} = \nabla p^n + \nabla q^{n+1} - \frac{\tilde{\eta} \Delta t}{\alpha_2} \nabla^2 \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right)$$

ou com (2.47)

$$p^{n+1} = p^n + q^{n+1};$$

- **Passo 5** Verificar se a condição de incompressibilidade

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0,$$

empregada na dedução de (2.48), é satisfeita.

No Passo 1, as condições de contorno para $\mathbf{u}^*$ são periódicas ou as empregadas em Brown et al [22], isto é,

$$\mathbf{u}^*|_{\partial\Omega} = \mathbf{u}^{n+1}|_{\partial\Omega}. \quad (2.50)$$

A equação de Poisson (2.48) do Passo 2 é obtida a partir de (2.42) impondo-se a incompressibilidade do escoamento. Substituindo

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (2.51)$$

em

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\alpha_2} \nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right],$$

obtemos a equação elíptica

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla q^{n+1} \right] = \frac{\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*.$$

O emprego de condições de contorno de Dirichlet (2.50) para $\mathbf{u}^*$ implica em se usar condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão q . Isto decorre do fato que a relação

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^{n+1}}$$

deve ser válida em todo domínio Ω . Logo

$$\mathbf{u}^*|_{\partial\Omega} = \mathbf{u}^{n+1}|_{\partial\Omega} + \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 \rho^{n+1}}|_{\partial\Omega}.$$

Como $\mathbf{u}^*|_{\partial\Omega} = \mathbf{u}^{n+1}|_{\partial\Omega}$, temos

$$\begin{aligned} \nabla q^{n+1}|_{\partial\Omega} &= 0 \\ \mathbf{n} \cdot \nabla q^{n+1}|_{\partial\Omega} &= \mathbf{n} \cdot 0 \\ \frac{\partial q^{n+1}}{\partial \mathbf{n}}|_{\partial\Omega} &= 0, \end{aligned}$$

onde $\mathbf{n}$ é o vetor unitário normal à fronteira do domínio.

Devemos observar que na solução da equação diferencial parcial elíptica (2.48) com condições de contorno homogêneas de Neumann, a condição de integrabilidade

$$\int_{\Omega} \frac{\alpha_2}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{u}^*) d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial q^{n+1}}{\partial \mathbf{n}} dA = 0 \quad (2.52)$$

deve ser respeitada [87].

2.2.4 Modelo H dimensional

Para as equações (1.27)-(1.28) utilizamos as mesmas estratégias já descritas para as equações (1.16)-(1.20). Dessa forma, o Modelo H é reescrito como

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = \tilde{M} \nabla^2 \phi_2 + g_1(\phi_1, \phi_2, \mathbf{u}), \quad (2.53)$$

$$\phi_2 = \tau \phi_1 - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_1, \quad (2.54)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}}{\rho} + g_2(\mathbf{u}, \rho, \eta) + \frac{\mu(\phi_1) \nabla \phi_1}{\rho} - \frac{\nabla p}{\rho}, \quad (2.55)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.56)$$

sendo

$$\begin{aligned} g_1(\phi_1, \phi_2, \mathbf{u}) = & \left[M(\phi_1) - \tilde{M} \right] \nabla^2 \phi_2 + (-2M_c \gamma \phi_1) \nabla \phi_1 \cdot \nabla \phi_2 + \\ & + M(\phi_1) (3\alpha \phi_1^2 - \beta - \tau) \nabla^2 \phi_1 + \\ & + [-2M_c \gamma \phi_1 (3\alpha \phi_1^2 - \beta - \tau) + 6\alpha \phi_1 M(\phi_1)] \|\nabla \phi_1\|_2^2 - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_1 \end{aligned} \quad (2.57)$$

e

$$g_2(\mathbf{u}, \rho, \eta) = \frac{\nabla \cdot [\eta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}}{\rho} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}. \quad (2.58)$$

Continuamos adotando o método semi-implícito para discretizar (2.53)-(2.55). A Tabela 2.1 relaciona os termos do lado direito dessas equações, identificando quais serão implicitados e quais serão explicitados.

Equações	Termos implícitos	Termos explícitos
(2.53)	$\tilde{M} \nabla^2 \phi_2$	$g_1(\phi_1, \phi_2, \mathbf{u})$
(2.54)	$\tau \phi_1 - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_1$	
(2.55)	$\frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}}{\rho} + \frac{\mu(\phi_1) \nabla \phi_1}{\rho} - \frac{\nabla p}{\rho}$	$g_2(\mathbf{u}, \rho, \eta)$

Tabela 2.1: Método semi-implícito para o Modelo H .

Quanto às condições de contorno, usamos para as equações (2.53)-(2.54) as mesmas condições das equações (2.14)-(2.15); para (2.55), as condições de (2.37).

Empregamos o Método de Gear na discretização temporal das equações (2.53)-(2.55). Em resumo, podemos escrever a discretização das equações do Modelo H como

$$\frac{\alpha_2 \phi_1^{n+1} + \alpha_1 \phi_1^n + \alpha_0 \phi_1^{n-1}}{\Delta t} = \tilde{M} \nabla^2 \phi_2^{n+1} + \beta_1 g_1(\phi_1^n, \phi_2^n, \mathbf{u}^n) + \beta_0 g_1(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}, \mathbf{u}^{n-1}), \quad (2.59)$$

$$\phi_2^{n+1} = \tau \phi_1^{n+1} - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_1^{n+1}, \quad (2.60)$$

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} = \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}}{\rho^{n+1}} + G(g_2) + \frac{\mu(\phi_1^{n+1}) \nabla \phi_1^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{n+1}}, \quad (2.61)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (2.62)$$

onde

$$\begin{aligned} g_1(\phi_1^m, \phi_2^m, \mathbf{u}^m) &= \left[M(\phi_1^m) - \tilde{M} \right] \nabla^2 \phi_2^m + (-2M_c \gamma \phi_1^m) \nabla \phi_1^m \cdot \nabla \phi_2^m + \\ &+ M(\phi_1^m) [3\alpha(\phi_1^m)^2 - \beta - \tau] \nabla^2 \phi_1^m + \\ &+ \{ -2M_c \gamma \phi_1^m [3\alpha(\phi_1^m)^2 - \beta - \tau] + 6\alpha \phi_1^m M(\phi_1^m) \} \|\nabla \phi_1^m\|_2^2 + \\ &- \mathbf{u}^m \cdot \nabla \phi_1^m \end{aligned} \quad (2.63)$$

e

$$G(g_2) = \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \rho^{n+1}, \eta^n) + \beta_0 g_2(\mathbf{u}^{n-1}, \rho^{n+1}, \eta^{n-1}), \quad (2.64)$$

$$g_2(\mathbf{u}^m, \rho^w, \eta^m) = \frac{\nabla \cdot [\eta(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)]^m - \tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^m}{\rho^w} - \mathbf{u}^m \cdot \nabla \mathbf{u}^m. \quad (2.65)$$

Na solução de (2.61), usamos o Método de Projeção descrito para as equações (2.39). A única modificação aparece no campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$, que agora é reescrito como

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^* + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^*}{\rho^{n+1}} + \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \rho^{n+1}, \eta^n) + \\ &+ \beta_0 g_2(\mathbf{u}^{n-1}, \rho^{n+1}, \eta^{n-1}) + \frac{\mu(\phi_1^{n+1}) \nabla \phi_1^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^n}{\rho^{n+1}}. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Em relação à (2.43), substituímos o termo forçante F pela força de superfície dependente do campo de fase (1.26).

2.2.5 Modelo H adimensional

O Modelo H adimensionalizado é definido pelas equações

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \tilde{\lambda} \nabla^2 \phi_2 + g_1(\phi_1, \phi_2, \mathbf{u}), \quad (2.67)$$

$$\phi_2 = \tau \phi_1 - K^2 \nabla^2 \phi_1, \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\theta_{max} \nabla^2 \mathbf{u}}{Re} + g_2(\mathbf{u}, \theta) + \frac{\mu(\phi_1) \nabla \phi_1}{ReCa} - \frac{\nabla p}{Re}, \quad (2.69)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.70)$$

com

$$K = \frac{\xi}{L}, \quad (2.71)$$

$$\begin{aligned} g_1(\phi_1, \phi_2, \mathbf{u}) &= \frac{1}{Pe} \left[\lambda(\phi_1) - \tilde{\lambda} \right] \nabla^2 \phi_2 + \frac{1}{Pe} \lambda'(\phi_1) \nabla \phi_1 \cdot \nabla \phi_2 + \\ &+ \frac{1}{Pe} \lambda(\phi_1) (3\alpha \phi_1^2 - \beta - \tau) \nabla^2 \phi_1 + \\ &+ \frac{1}{Pe} \left[\lambda'(\phi_1) (3\alpha \phi_1^2 - \beta - \tau) + 6\alpha \phi_1 \lambda(\phi_1) \right] \|\nabla \phi_1\|_2^2 - \mathbf{u} \cdot \nabla \phi_1 \end{aligned} \quad (2.72)$$

e

$$g_2(\mathbf{u}, \theta) = \frac{\nabla \cdot [\theta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \theta_{max} \nabla^2 \mathbf{u}}{Re} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad (2.73)$$

nos quais

$$\lambda'(\phi_1) = -2\gamma \phi_1, \quad (2.74)$$

$$\tilde{\lambda} = c_4 \max_{-1 \leq \phi_1 \leq 1} \{\lambda(\phi_1)\}, \quad c_4 \in \mathbb{R}_+, \quad (2.75)$$

e

$$\theta = \frac{\theta_{max} - 1}{2} \phi_1 + \frac{\theta_{max} + 1}{2}. \quad (2.76)$$

As equações discretizadas do Modelo H adimensional são

$$\frac{\alpha_2 \phi_1^{n+1} + \alpha_1 \phi_1^n + \alpha_0 \phi_1^{n-1}}{\Delta t} = \frac{1}{Pe} \tilde{\lambda} \nabla^2 \phi_2^{n+1} + \beta_1 g_1(\phi_1^n, \phi_2^n, \mathbf{u}^n) + \beta_0 g_1(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}, \mathbf{u}^{n-1}), \quad (2.77)$$

$$\phi_2^{n+1} = \tau \phi_1^{n+1} - K^2 \nabla^2 \phi_1^{n+1}, \quad (2.78)$$

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} = \frac{\theta_{max} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}}{Re} + G(g_2) + \frac{\mu(\phi_1^{n+1}) \nabla \phi_1^{n+1}}{ReCa} - \frac{\nabla p^{n+1}}{Re}, \quad (2.79)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (2.80)$$

com

$$K = \frac{\xi}{L}, \quad (2.81)$$

$$\begin{aligned} g(\phi_1^m, \phi_2^m, \mathbf{u}^m) &= \frac{1}{Pe} \left[\lambda(\phi_1^m) - \tilde{\lambda} \right] \nabla^2 \phi_2^m - \frac{2\gamma\phi_1^m}{Pe} \nabla \phi_1^m \cdot \nabla \phi_2^m + \\ &+ \frac{1}{Pe} \lambda(\phi_1^m) \left[3\alpha(\phi_1^m)^2 - \beta - \tau \right] \nabla^2 \phi_1^m + \\ &+ \frac{1}{Pe} \left\{ (-2\gamma\phi_1^m) \left[3\alpha(\phi_1^m)^2 - \beta - \tau \right] + 6\alpha\phi_1^m \lambda(\phi_1^m) \right\} \|\nabla \phi_1^m\|_2^2 + \\ &- \mathbf{u}^m \cdot \nabla \phi_1^m \end{aligned} \quad (2.82)$$

e

$$G(g_2) = \beta_1 g_2(\mathbf{u}^n, \theta^n) + \beta_0 g_2(\mathbf{u}^{n-1}, \theta^{n-1}), \quad (2.83)$$

$$g_2(\mathbf{u}^m, \theta^m) = \frac{\nabla \cdot [\theta (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)]^m - \theta_{max} \nabla^2 \mathbf{u}^m}{Re} - \mathbf{u}^m \cdot \nabla \mathbf{u}^m. \quad (2.84)$$

A adimensionalização acarreta algumas mudanças nas equações presentes nos quatro primeiros passos que definem o Método de Projeção usado para solucionar (2.61) e que usaremos para solucionar (2.79). Lista-se a seguir essas alterações.

- **Passo 1** Campo de velocidade auxiliar:

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 Re}. \quad (2.85)$$

- **Passo 2** Equação para a correção de pressão:

$$\nabla^2 q^{n+1} = \frac{Re\alpha_2}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^*. \quad (2.86)$$

- **Passo 3** Correção do campo de velocidade:

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t \nabla q^{n+1}}{\alpha_2 Re}. \quad (2.87)$$

- **Passo 4** Correção da pressão:

$$p^{n+1} = p^n + q^{n+1} - \frac{\theta_{max} \Delta t}{\alpha_2 Re} \nabla^2 q^{n+1}. \quad (2.88)$$

2.3 Algoritmo para o Modelo H

Apresentada a discretização temporal das equações que compõem o modelo H, podemos sintetizar os passos da resolução numérica do modelo dimensional no Algoritmo 1.

Algoritmo 1 Passos para a solução numérica das equações dimensionais do Modelo H.

para $n = 1$ **faça**

1. Dados ϕ_1^{n-1} e ϕ_2^{n-1} , determinar ϕ_1^n e ϕ_2^n .
2. Dado $\mathbf{u}_1^{n-1}$, determinar o campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$.
3. Calcular a correção de pressão q^n .
4. Determinar o campo de velocidade $\mathbf{u}^n$.
5. Calcular a pressão p^n .

fim para

para $n + 1 \geq 2$ **faça**

1. Determinar ϕ_1^{n+1} e ϕ_2^{n+1} com as equações (2.22)-(2.23).
2. Determinar o campo de velocidade auxiliar $\mathbf{u}^*$ com (2.43).
3. Calcular a correção de pressão q^{n+1} com a equação (2.48).
4. Determinar o campo de velocidade $\mathbf{u}^{n+1}$ com (2.49)
5. Calcular a pressão p^{n+1} com (2.45) ou (2.47).
6. Verificar a condição de incompressibilidade (2.51).

fim para

Para $n = 1$ no Algoritmo 1, usamos as equações dos demais instantes de tempo com adaptações. O Algoritmo 1 também pode ser empregado para solucionar o Modelo H adimensional. O que muda nesse caso são as equações empregadas em cada um dos passos.

2.4 Discretização espacial

2.4.1 Domínio

As equações discretas de Cahn-Hilliard, Navier-Stokes e do Modelo H são solucionadas em um domínio computacional $\Omega = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2] \times [A_3, B_3]$ refinado localmente, ou

seja, apenas as regiões de interesse, como por exemplo a transição na separação dos componentes de uma mistura bifásica, são recobertas por malhas espaciais com resolução mais elevada. As Figuras (2.1) e (2.2) mostram um exemplo com três níveis de refinamento.

Figura 2.1: $\tanh \{50 [z - (0.1 \sin(2\pi x) + 0.5)]\}$ com três níveis de refinamento local: (a) isosuperfície, (b) malhas do nível mais fino, (c)-(d) refinamento local. O nível mais grosso corresponde a uma malha $32 \times 32 \times 32$.

Figura 2.2: $\tanh \{50 [z - (0.1 \sin (2\pi x) + 0.5)]\}$ com três níveis de refinamento local: (a)-(b) corte em $y = 0.5$. O nível mais grosso corresponde a uma malha $32 \times 32 \times 32$.

Uma célula computacional do domínio Ω corresponde a um paralelepípedo de lados Δx , Δy e Δz . Estas medidas equivalem ao quociente entre as dimensões do domínio e o número de partições NX, NY e NZ em cada uma das direções. Toda célula do domínio é identificada por um conjunto de índices (i, j, k) referente à posição do seu centro, o qual é determinado em

$$(x_i, y_j, z_k) = \left(A_1 + \left(i - \frac{1}{2} \right) \Delta x, A_2 + \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta y, A_3 + \left(k - \frac{1}{2} \right) \Delta z \right), \quad (2.89)$$

para $1 \leq i \leq NX$, $1 \leq j \leq NY$ e $1 \leq k \leq NZ$.

Utilizamos na discretização do domínio a malha deslocada introduzida por Harlow e Welch [48]. Assim, variáveis escalares como pressão, correção de pressão, densidade de massa, viscosidade, mobilidade e parâmetro de ordem são calculadas no centro (2.89) da célula computacional; as componentes da velocidade, no centro das faces dessa célula. Adotamos a malha deslocada porque usamos um Método de Projeção para desacoplar a pressão e a velocidade na solução das equações de conservação de quantidade de movimento (2.79). A malha deslocada facilita a implementação de uma técnica *multigrid* para

solucionar a equação de Poisson (2.48) para a correção de pressão e, nessa malha, podemos definir convenientemente aproximações de segunda ordem para os operadores gradiente e divergente. A Figura 2.3 destaca as partes da célula computacional onde as variáveis discretas são calculadas.

Figura 2.3: Local da célula computacional onde as variáveis discretas são calculadas: variáveis escalares como a pressão, a densidade de massa, a viscosidade, a mobilidade e o parâmetro de ordem são calculados no centro da célula computacional (A); a componente da velocidade na direção x é calculada no centro da face yz (B); a componente da velocidade na direção y é calculada no centro da face xz (C); a componente da velocidade na direção z é calculada no centro da face xy (D)

2.4.2 Variáveis

A discretização espacial das equações de Cahn-Hilliard e de Navier-Stokes requer a discretização dos operadores gradiente, divergente e Laplaciano. Discretizamos esses operadores empregando diferenças finitas [23, 37, 86] em uma malha deslocada. Assim, uma variável escalar ψ , que poderia ser o parâmetro de ordem ou a pressão, é denotada na célula de índices (i, j, k) simplesmente por $\psi_{i,j,k}$, enquanto que a velocidade $\mathbf{u} = (u, v, w)$

é definida na mesma célula como sendo

$$\mathbf{u}_{i,j,k} = \left(u_{i-\frac{1}{2},j,k}, v_{i,j-\frac{1}{2},k}, w_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right).$$

A Figura 2.4 mostra o posicionamento de uma variável escalar e das componentes da velocidade em uma célula computacional de índices (i, j, k) .

Figura 2.4: Célula da malha deslocada indicando a posição espacial da variável escalar ψ e das componentes da variável vetorial $\mathbf{u} = (u, v, w)$.

Com as convenções estabelecidas anteriormente é possível então definir aproximações de segunda ordem para os operadores gradiente (G) e divergente (D), dadas respectivamente por

$$(G\psi)_{i,j,k} = \left(D_x\psi_{i-\frac{1}{2},j,k}, D_y\psi_{i,j-\frac{1}{2},k}, D_z\psi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) \quad (2.90)$$

e

$$(D \cdot \mathbf{u})_{i,j,k} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k} - v_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\Delta y} + \frac{w_{i,j,k+\frac{1}{2}} - w_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z}, \quad (2.91)$$

sendo

$$D_x\psi_{i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{\Delta x}, \quad (2.92)$$

$$D_y \psi_{i,j-\frac{1}{2},k} = \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{\Delta y}, \quad (2.93)$$

$$D_z \psi_{i,j,k-\frac{1}{2}} = \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{\Delta z}. \quad (2.94)$$

Para o operador Laplaciano (L), como aquele presente na equação (2.48) que calcula a correção de pressão, adotamos discretizações de segunda e quarta ordens, mencionadas a seguir.

1. Discretização de segunda ordem

$$\begin{aligned} (L\psi)_{i,j,k} = (D \cdot G\psi)_{i,j,k} &= \frac{\psi_{i+1,j,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i-1,j,k}}{(\Delta x)^2} + \\ &+ \frac{\psi_{i,j+1,k} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j-1,k}}{(\Delta y)^2} + \\ &+ \frac{\psi_{i,j,k+1} - 2\psi_{i,j,k} + \psi_{i,j,k-1}}{(\Delta z)^2} \end{aligned} \quad (2.95)$$

2. Discretização de quarta ordem [84]

$$\begin{aligned} (L\psi)_{i,j,k} &= \frac{-\psi_{i+2,j,k} + 16\psi_{i+1,j,k} - 30\psi_{i,j,k} + 16\psi_{i-1,j,k} - \psi_{i-2,j,k}}{12(\Delta x)^2} + \\ &+ \frac{-\psi_{i,j+2,k} + 16\psi_{i,j+1,k} - 30\psi_{i,j,k} + 16\psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j-2,k}}{12(\Delta y)^2} + \\ &+ \frac{-\psi_{i,j,k+2} + 16\psi_{i,j,k+1} - 30\psi_{i,j,k} + 16\psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k-2}}{12(\Delta z)^2} \end{aligned} \quad (2.96)$$

A discretização de segunda ordem (2.95) é o conhecido *esquema dos sete pontos*. A ordem da discretização (2.96) será comprovada no Capítulo 4.

2.5 Estabilidade

É muito difícil estabelecer uma análise de estabilidade rigorosa do esquema numérico semi-implícito para o Modelo H [4], porém podemos obter informações valiosas sobre a

robustez e a estabilidade do método através dos testes numéricos.

A discretização semi-implícita para a equação de Cahn-Hilliard ($\mathbf{u} \equiv 0$) tem um comportamento incondicionalmente estável nos testes numéricos. Nesse caso, para condições iniciais suaves e para garantir a precisão no espaço, empregamos o passo temporal dado por

$$\begin{aligned}\Delta t_1 &= t_{final} - t, \\ \Delta t_2 &= \min \{ \Delta x, \Delta y, \Delta z \}, \\ \Delta t &= \min \{ \Delta t_1, \Delta t_2 \},\end{aligned}\tag{2.97}$$

onde Δx , Δy e Δz são os passos espaciais em cada uma das direções no nível que contém as malhas mais finas. No passo temporal (2.97) temos que Δt é da ordem de Δx (ou Δy ou Δz), o que torna os erros no tempo e no espaço proporcionais. Alteramos o passo temporal (2.97) quando queremos capturar a separação de fases a partir de uma condição inicial estabelecida por uma perturbação randômica (*spinodal decomposition*). Neste caso, usamos a estratégia adaptativa para o passo temporal descrita no Algoritmo 2, a qual possibilita capturar com precisão também a parte inicial e rápida da separação.

Algoritmo 2 Seleção do passo temporal de integração para a equação de Cahn-Hilliard.

se $0 \leq t \leq c\epsilon$, $c \in \mathbb{R}_+^*$ **então**

$$\Delta t_1 = t_{final} - t$$

$$\Delta t_2 = \epsilon^2$$

$$\Delta t = \min \{ \Delta t_1, \Delta t_2 \}$$

senão

$$\Delta t_1 = t_{final} - t$$

$$\Delta t_2 = \min \{ \Delta x, \Delta y, \Delta z \}$$

$$\Delta t = \min \{ \Delta t_1, \Delta t_2 \}$$

fim se

Quanto ao Modelo H, constatamos nos testes numéricos que a discretização semi-implícita (2.77)-(2.80) remove as restrições de alta ordem para o passo temporal verificadas

em métodos explícitos, permanecendo somente uma restrição de estabilidade suave dada por

$$\Delta t \leq \Delta t_{CFL}, \quad (2.98)$$

onde

$$\Delta t_{CFL} = C_{CFL} \left(\frac{|u|_{max}}{\Delta x} + \frac{|v|_{max}}{\Delta y} + \frac{|w|_{max}}{\Delta z} \right)^{-1}, \quad C_{CFL} \in \mathbb{R}_+^* \quad (2.99)$$

é a condição CFL (Courant, Friedrichs e Lewy), u , v e w são as componentes do campo de velocidade $\mathbf{u}$ e Δx , Δy e Δz são os passos espaciais em cada uma das direções no nível que contém as malhas mais finas.

Em um esquema de integração explícito para as equações do Modelo H, temos que considerar restrições no passo temporal devido à tensão superficial e à viscosidade. As restrições de estabilidade para o passo no tempo induzidas pela tensão superficial e pelas forças viscosas têm, respectivamente, a forma

$$\Delta t \leq C_1 \sqrt{ReCa} \min \{ \Delta x, \Delta y, \Delta z \}, \quad C_1 \in \mathbb{R}_+^* \quad (2.100)$$

e

$$\Delta t \leq C_2 Re \min \{ (\Delta x)^2, (\Delta y)^2, (\Delta z)^2 \}, \quad C_2 \in \mathbb{R}_+^*. \quad (2.101)$$

Estimamos a restrição (2.100) considerando as alterações introduzidas por

$$\frac{1}{ReCa} \mu(\phi) \nabla \phi \Delta t \quad (2.102)$$

na velocidade e provocadas pela força interfacial. A restrição (2.100) é severa para baixos números de Reynolds e de capilaridade, enquanto que a restrição (2.101) é ainda mais severa para baixos números de Reynolds.

Em todos os testes efetuados com o Modelo H usamos apenas a restrição (2.99). Assim, a discretização semi-implícita remove efetivamente as restrições de estabilidade de alta ordem e torna o método de campo de fase computacionalmente robusto e eficiente.

2.6 Sumário das equações discretas do Modelo H

• Modelo H dimensional

$$\begin{aligned}\frac{\alpha_2 \phi_1^{n+1} + \alpha_1 \phi_1^n + \alpha_0 \phi_1^{n-1}}{\Delta t} &= \tilde{M} \nabla^2 \phi_2^{n+1} + \beta_1 g_1(\phi_1^n, \phi_2^n, \mathbf{u}^n) + \beta_0 g_1(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}, \mathbf{u}^{n-1}) \\ \phi_2^{n+1} &= \tau \phi_1^{n+1} - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_1^{n+1} \\ \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{\tilde{\eta} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}}{\rho^{n+1}} + G(g_2) + \frac{\mu(\phi_1^{n+1}) \nabla \phi_1^{n+1}}{\rho^{n+1}} - \frac{\nabla p^{n+1}}{\rho^{n+1}} \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= 0\end{aligned}$$

• Modelo H adimensional

$$\begin{aligned}\frac{\alpha_2 \phi_1^{n+1} + \alpha_1 \phi_1^n + \alpha_0 \phi_1^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{1}{Pe} \tilde{\lambda} \nabla^2 \phi_2^{n+1} + \beta_1 g_1(\phi_1^n, \phi_2^n, \mathbf{u}^n) + \beta_0 g_1(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}, \mathbf{u}^{n-1}) \\ \phi_2^{n+1} &= \tau \phi_1^{n+1} - K^2 \nabla^2 \phi_1^{n+1} \\ \frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{\theta_{max} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1}}{Re} + G(g_2) + \frac{\mu(\phi_1^{n+1}) \nabla \phi_1^{n+1}}{ReCa} - \frac{\nabla p^{n+1}}{Re} \\ \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} &= 0\end{aligned}$$

Malha composta adaptativa

Neste capítulo, caracterizamos malha composta e apresentamos a estratégia adotada para selecionar os pontos que definem as regiões que serão refinadas localmente por intermédio do algoritmo de refinamento adaptativo desenvolvido por Berger e Rigoutsos [14]. Além disso, introduzimos as técnicas *multinível-multigrid* empregadas para solucionar em malhas uniformes e compostas os sistemas de equações lineares oriundos da discretização das equações que compõem o modelo matemático.

3.1 Malhas refinadas localmente

A Figura 3.1 mostra uma malha composta tridimensional. Essa malha discretiza o domínio físico $\Omega = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2] \times [A_3, B_3]$, sendo formada por malhas que discretizam paralelepípedos em três diferentes *níveis físicos*. Denominamos o primeiro nível físico de LBOT e o último de LTOP.

Na Figura 3.1, LBOT é representado por um paralelepípedo contido em uma malha $16 \times 16 \times 16$, o segundo nível físico por um paralelepípedo contido em uma malha $32 \times 32 \times 32$ e LTOP por dois paralelepípedos contidos em uma malha $64 \times 64 \times 64$. Dessa forma, a malha composta ilustrada na Figura 3.1 é uma malha com refinamento localizado. Por refinamento entenda-se a divisão do passo espacial do nível anterior por dois, a razão de refinamento que adotamos para criar os níveis físicos.

Doravante, malhas uniformes e malhas compostas serão indicadas simplesmente por

LBOT L NPL,

Figura 3.1: (a) Malha composta em um domínio computacional $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, com cortes em (b) $x = 0.5$, (c) $y = 0.3$ e (d) $z = 0.5$.

onde LBOT tem as dimensões do domínio Ω e NPL é o número de níveis físicos. Assim, as malhas descritas na Figura 3.1 são indicadas por $16 \times 16 \times 16$ L3. Em malhas uniformes temos sempre que $NPL = 1$ e $LBOT = LTOP$, ou seja, não há regiões do domínio Ω refinadas localmente.

Para o refinamento localizado empregamos a técnica AMR (Adaptive Mesh Refinement) introduzida por Berger [7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15] na solução numérica de equações diferenciais parciais hiperbólicas. As regiões refinadas resultantes da aplicação do AMR

correspondem à união de paralelepípedos alinhados aos eixos coordenados. Neste trabalho, esses paralelepípedos são determinados por pontos que satisfazem a uma certa propriedade física do fluido e/ou do escoamento, como vorticidade, elevados gradientes de velocidade ou ainda a transição na separação dos componentes de uma mistura.

Os paralelepípedos gerados pelo AMR obedecem propriedades que devem ser satisfeitas para que a discretização e a solução dos problemas em estudo sejam possíveis. Assim, uma malha composta é definida no AMR como uma sequência hierárquica de níveis ℓ aninhados e progressivamente mais finos

$$\ell = \text{LBOT}, \text{LBOT} + 1, \text{LBOT} + 2, \dots, \text{LTOP}.$$

Se

$$G_{\ell,k}, \quad k = 1, 2, 3, \dots, n_\ell$$

é um conjunto de paralelepípedos alinhados aos eixos coordenados com passo espacial Δx_ℓ , Δy_ℓ e Δz_ℓ , então o nível ℓ é dado por

$$\text{nível } \ell = \bigcup_{k=1}^{n_\ell} G_{\ell,k}, \quad (3.1)$$

sendo que

$$G_{\ell,j} \cap G_{\ell,k} = \emptyset, \quad \forall j \neq k. \quad (3.2)$$

Pela propriedade (3.1) temos que LBOT é formado pela união das malhas mais grossas ($\text{LBOT} = \Omega$) e LTOP pela união das malhas mais finas. A propriedade (3.2) garante que malhas em um mesmo nível, chamadas malhas irmãs, não estejam sobrepostas.

Malhas em diferentes níveis devem estar apropriadamente aninhadas, isto é,

1. Toda malha no nível

$$\ell + 1, \quad \ell = \text{LBOT}, \text{LTOP} - 1,$$

começa e termina no canto de uma célula de uma malha no nível ℓ ;

2. Deve haver pelo menos uma célula de uma malha no nível

$$\ell - 1, \quad \ell = \text{LBOT} + 2, \text{LTOP},$$

ao norte, ao sul, a oeste, a leste, abaixo e acima, separando uma malha do nível ℓ de uma malha do nível $\ell - 2$.

As malhas presentes na Figura 3.1 estão apropriadamente aninhadas. A Figura 3.2 mostra em duas dimensões malhas que estão ou não apropriadamente aninhadas.

Figura 3.2: (d) Malhas apropriadamente aninhadas; (a)-(c) malhas não apropriadamente aninhadas.

Na Figura 3.2, as malhas superiores (a)-(b) não estão apropriadamente aninhadas segundo as propriedades 1 e 2, respectivamente. A primeira malha composta inferior (c) pode ocorrer na prática, apesar da mesma não ser formada por malhas apropriadamente aninhadas. Neste caso, como o bordo das malhas no segundo e terceiro níveis físicos toca a fronteira do domínio Ω , as condições de contorno não periódicas nessas fronteiras devem ser corretamente transferidas. A segunda malha composta inferior (d) é formada por malhas apropriadamente aninhadas.

A descrição de malhas compostas feita aqui segue o que está descrito por Roma [81].

3.2 Técnicas *multinível-multigrid*

A discretização das equações do modelo matemático em malhas compostas com razão de refinamento igual a dois conduz naturalmente ao emprego do *multigrid*, descrito inicialmente por Briggs [21], para solucionar os sistemas de equações lineares provenientes dessa discretização. O termo multinível é acrescentado justamente devido ao fato da malha composta ser caracterizada por dois ou mais níveis de refinamento.

Os métodos *multigrid* foram desenvolvidos originalmente para solucionar problemas de valor de contorno que surgem em aplicações físicas como a distribuição de temperatura em uma placa plana. A discretização de problemas como esse conduz à solução de um sistema linear

$$Ax = b, \quad (3.3)$$

o qual pode ser reescrito em uma forma de correção residual como

$$Ae = r = b - Av, \quad (3.4)$$

onde r é o resíduo, v é uma aproximação da solução exata $\bar{x}$ e e é a correção, ou seja,

$$e = \bar{x} - v \Rightarrow \bar{x} = v + e. \quad (3.5)$$

A solução dos sistemas lineares (3.3)-(3.4) pode ser determinada por vários métodos, entre eles métodos de relaxação como o de Gauss-Seidel. Tais métodos fornecem, a partir de uma aproximação inicial x^0 , uma sequência de aproximações $\{x^k\}_{k=1}^{+\infty}$ que *a priori* convergem para a solução exata $\bar{x}$.

As estratégias *multigrid* visam amortecer as altas frequências da correção na equação (3.4) e caracterizam-se basicamente por três etapas, ilustradas na Figura 3.3:

1. *restrição* Solução da equação residual (3.4) em malhas cada vez mais grossas (o passo espacial em cada direção é multiplicado por dois). O resíduo de um nível é sempre transferido para o nível imediatamente abaixo, passando a compor o lado direito da equação residual nesse nível;

2. *solução* Na malha mais grossa pré-determinada (geralmente uma malha $2 \times 2 \times 2$), a equação residual é resolvida exatamente;
3. *prolongamento* A solução da equação residual é interpolada para malhas cada vez mais finas (o passo espacial em cada direção é dividido por dois), corrigindo a solução pré-existente em cada nível.

Figura 3.3: *Multigrid* para três níveis: R representa a restrição, S representa a solução na malha mais grossa e P representa o prolongamento.

Para aplicar o *multigrid* em malhas uniformes e compostas, precisamos de outros níveis além dos níveis de refinamento (LBOT a LTOP). Denominamos os níveis do *multigrid* abaixo de LBOT de *virtuais* e representamos o número de níveis virtuais por NVL. Assim

$$\text{LBOT} = \text{NVL} + 1,$$

$$\text{LTOP} = \text{NVL} + \text{NPL} = \text{LBOT} + \text{NPL} - 1.$$

Dependendo da forma como os níveis são “visitados” na restrição e no prolongamento, há três diferentes técnicas para o *multigrid*: ciclo V, ciclo W e *full multigrid*. A Figura 3.4 ilustra a ordem em que os níveis são visitados em um ciclo de cada uma das três estratégias.

Usamos em malhas compostas o ciclo V e uma “adaptação” do ciclo W, como mostra a Figura 3.5. Chamamos o ciclo W de adaptado porque essa estratégia é aplicada somente

Figura 3.4: Ciclo V, ciclo W e *full multigrid* para 4 níveis na malha uniforme.

a partir do primeiro nível físico (LBOT), e não desde o último (LTOP). Desta forma, os ciclos V e W são idênticos nos níveis físicos e se diferenciam nos níveis virtuais. Uma análise comparativa da eficiência dessas duas estratégias na solução da equação de Poisson

$$Lu = f,$$

com condições de contorno quaisquer, pode ser encontrada em Nós et al [26].

Figura 3.5: *Multigrid* para 5 níveis na malha composta: ciclos V e W adaptado. NPL representa os níveis físicos e NVL os níveis virtuais.

Para descrever as técnicas *multigrid* na malha uniforme, consideremos

$$\Omega^{mh}, \quad m = 1, 2, 2^2, \dots, 2^{LTOP}, \quad h = \Delta x = \Delta y = \Delta z \quad (3.6)$$

uma série de discretizações do domínio Ω em níveis progressivamente mais grossos,

$$A^{mh}x = b^{mh} \quad (3.7)$$

discretizações do problema em (3.6), $\mathfrak{R}_{2h}^h$ o operador restrição do nível com espaçamento h para o nível com espaçamento $2h$ e $\mathfrak{E}_{2h}^h$ o operador prolongamento do nível com espaçamento $2h$ para o nível com espaçamento h . Com isto, podemos resumir o ciclo V em uma malha uniforme no Algoritmo 3.

Algoritmo 3 Ciclo V para malha uniforme.

DESCIDA

- Relaxar $A^h x = b^h$ n vezes com aproximação inicial v^h
 Restringir $r^h : r^{2h} \leftarrow \mathfrak{R}_{2h}^h(r^h)$
- Relaxar $A^{2h} e = r^{2h}$ n vezes com aproximação inicial $e^{2h} = 0$
 Restringir $r^{2h} : r^{4h} \leftarrow \mathfrak{R}_{4h}^{2h}(r^{2h})$
- Relaxar $A^{4h} e = r^{4h}$ n vezes com aproximação inicial $e^{4h} = 0$
 Restringir $r^{4h} : r^{8h} \leftarrow \mathfrak{R}_{8h}^{4h}(r^{4h})$
- $\vdots$
- Solucionar $A^{2^{LTOP-1}h} e = r^{2^{LTOP-1}h}$

SUBIDA

- $\vdots$
 - Corrigir $e^{4h} : e^{4h} \leftarrow e^{4h} + \mathfrak{E}_{8h}^{4h}(e^{8h})$
 Relaxar $A^{4h} e = r^{4h}$ n vezes com aproximação inicial e^{4h}
 - Corrigir $e^{2h} : e^{2h} \leftarrow e^{2h} + \mathfrak{E}_{4h}^{2h}(e^{4h})$
 Relaxar $A^{2h} e = r^{2h}$ n vezes com aproximação inicial e^{2h}
 - Corrigir $e^h : e^h \leftarrow e^h + \mathfrak{E}_{2h}^h(e^{2h})$
 Relaxar $A^h x = b^h$ n vezes com aproximação inicial $v^h \leftarrow v^h + e^h$
-

Para malhas compostas, o Algoritmo 3 é reescrito na forma apresentada pelo Algoritmo 4.

Algoritmo 4 Ciclo V para malha composta.

DESCIDA

para $L = L_{TOP}, 2, -1$ **faça**

se $L \geq L_{BOT}$ **então**

 Relaxar $A^{2^{L_{TOP}-L}h}x = b^{2^{L_{TOP}-L}h}$ n vezes com aproximação inicial $v^{2^{L_{TOP}-L}h}$

senão

 Relaxar $A^{2^{L_{TOP}-L}h}e = r^{2^{L_{TOP}-L}h}$ n vezes com aproximação inicial $e^{2^{L_{TOP}-L}h} = 0$

fim se

 Restringir $r^{2^{L_{TOP}-L}h} : r^{2^{L_{TOP}-L+1}h} \leftarrow \mathfrak{R}_{2^{L_{TOP}-L+1}h}^{2^{L_{TOP}-L}h} \left(r^{2^{L_{TOP}-L}h} \right)$

fim para

para $L = 1$ **faça**

 Solucionar $A^{2^{L_{TOP}-L}h}e = r^{2^{L_{TOP}-L}h}$

fim para

SUBIDA

para $L = 2, L_{TOP}$ **faça**

 Corrigir $e^{2^{L_{TOP}-L}h} : e^{2^{L_{TOP}-L}h} \leftarrow e^{2^{L_{TOP}-L}h} + \mathfrak{E}_{2^{L_{TOP}-L+1}h}^{2^{L_{TOP}-L}h} \left(e^{2^{L_{TOP}-L+1}h} \right)$

se $L < L_{BOT}$ **então**

 Relaxar $A^{2^{L_{TOP}-L}h}e = r^{2^{L_{TOP}-L}h}$ n vezes com aproximação inicial $e^{2^{L_{TOP}-L}h}$

senão

 Relaxar $A^{2^{L_{TOP}-L}h}x = b^{2^{L_{TOP}-L}h}$ n vezes com aproximação inicial

$v^{2^{L_{TOP}-L}h} \leftarrow v^{2^{L_{TOP}-L}h} + e^{2^{L_{TOP}-L}h}$

fim se

fim para

Como relaxar a equação (3.3), com aproximação inicial v , equivale a relaxar a equação (3.4), com aproximação inicial $e = 0$, adotamos a estratégia de correção inclusive para os níveis físicos. Assim, a relaxação nesses níveis precisa ser modificada nos Algoritmos 3 e 4.

No Algoritmo 4, a restrição nos níveis físicos ocorre para a porção do nível $L - 1$

recoberta pelas malhas do nível L ; já o prolongamento é feito da porção do nível $L - 1$ para as malhas que o recobrem no nível L .

Dos métodos de relaxação, usamos Gauss-Seidel *red-black* para relaxar a correção uma vez na descida e uma vez na subida. Denotamos isto como $V(1, 1)$ e $W(1, 1)$ para os ciclos V e W adaptado, respectivamente. Na malha mais grossa, ao invés de resolvermos exatamente a equação residual, relaxamos a correção algumas vezes.

Em relação ao ciclo W adaptado, podemos estruturar um algoritmo para malhas compostas semelhante ao Algoritmo 4 obedecendo o esquema de visitas dos níveis virtuais ilustrado pela Figura 3.5. O ciclo W adaptado é a técnica padrão do nosso código computacional e sua eficiência em relação ao ciclo V é tanto maior quanto maior for o número de níveis virtuais. Com essa técnica utilizamos uma média simples na restrição e interpolações bilineares e trilineares no prolongamento.

3.2.1 Restrição

Nas operações de descida no *multigrid*, tanto no ciclo V quanto no ciclo W adaptado, utilizamos uma média simples para determinar o resíduo nas malhas grossas.

Assim, para as variáveis calculadas no centro da célula computacional, como ilustra a Figura 3.6, temos que o resíduo y_g na malha grossa é dado por

$$y_g(x, y, z) = \frac{1}{8} (y_{f1} + y_{f2} + y_{f3} + y_{f4} + y_{f5} + y_{f6} + y_{f7} + y_{f8}), \quad (3.8)$$

sendo y_f o resíduo na malha fina.

Para as variáveis calculadas no centro das faces da célula computacional, como mostra a Figura 3.7, o resíduo y_g é determinado por intermédio das relações

$$y_g(x, y, z) = \frac{1}{4} (y_{f1} + y_{f4} + y_{f5} + y_{f8}), \quad (3.9)$$

$$y_g(x, y, z) = \frac{1}{4} (y_{f1} + y_{f2} + y_{f5} + y_{f6}), \quad (3.10)$$

$$y_g(x, y, z) = \frac{1}{4} (y_{f1} + y_{f2} + y_{f3} + y_{f4}), \quad (3.11)$$

para as faces yz , xz e xy , respectivamente.

Figura 3.6: Restrição no *multigrid* para variável calculada no centro da célula computacional: os resíduos y_f nos oito centros na malha fina determinam o resíduo y_g no centro na malha grossa.

Figura 3.7: Restrição no *multigrid* para variável calculada no centro das faces (a) yz , (b) xz e (c) xy : os resíduos y_f nos quatro centros na malha fina determinam o resíduo y_g no centro na malha grossa.

3.2.2 Prolongamento

Nas operações de subida no *multigrid*, seja no ciclo V ou no ciclo W adaptado, empregamos interpolações bilineares ou trilineares para determinar a correção nas malhas

finas.

Para as variáveis escalares, atribuímos a correção com uma interpolação trilinear. Na Figura 3.8, a correção y_f na malha fina é dada pela soma dos pesos das oito correções y_g na malha grossa segundo a expressão

$$\begin{aligned}
 y_f(x, y, z) = & (1 - t_1)(1 - t_2)(1 - t_3)y_{g1} + \\
 & + t_1(1 - t_2)(1 - t_3)y_{g2} + \\
 & + t_1t_2(1 - t_3)y_{g3} + \\
 & + (1 - t_1)t_2(1 - t_3)y_{g4} + \\
 & + (1 - t_1)(1 - t_2)t_3y_{g5} + \\
 & + t_1(1 - t_2)t_3y_{g6} + \\
 & + t_1t_2t_3y_{g7} + \\
 & + (1 - t_1)t_2t_3y_{g8},
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

na qual as variáveis normalizadas t_1 , t_2 e t_3 definem os pesos e podem valer $\frac{1}{4}$ ou $\frac{3}{4}$.

Figura 3.8: Interpolação trilinear no *multigrid* para variável calculada no centro da célula computacional: as correções y_g nos oito centros na malha grossa determinam a correção y_f no centro na malha fina.

A interpolação trilinear fornecida por (3.12) reduz-se a uma interpolação bilinear dada

pelas expressões

$$\begin{aligned}
 y_f(x, y, z) &= (1 - t_1)(1 - t_2)(1 - t_3)y_{g1} + \\
 &+ (1 - t_1)t_2(1 - t_3)y_{g4} + \\
 &+ (1 - t_1)(1 - t_2)t_3y_{g5} + \\
 &+ (1 - t_1)t_2t_3y_{g8},
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned}
 y_f(x, y, z) &= (1 - t_1)(1 - t_2)(1 - t_3)y_{g1} + \\
 &+ t_1(1 - t_2)(1 - t_3)y_{g2} + \\
 &+ (1 - t_1)(1 - t_2)t_3y_{g5} + \\
 &+ t_1(1 - t_2)t_3y_{g6},
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

$$\begin{aligned}
 y_f(x, y, z) &= (1 - t_1)(1 - t_2)(1 - t_3)y_{g1} + \\
 &+ t_1(1 - t_2)(1 - t_3)y_{g2} + \\
 &+ t_1t_2(1 - t_3)y_{g3} + \\
 &+ (1 - t_1)t_2(1 - t_3)y_{g4},
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

para as variáveis calculadas nos centros das faces yz , xz e xy da célula computacional, respectivamente. Nas interpolações dadas por (3.13)-(3.15), as variáveis normalizadas t_1 , t_2 e t_3 podem valer $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$ ou $\frac{3}{4}$. A Figura 3.9 ilustra essas interpolações.

Figura 3.9: Interpolação bilinear no *multigrid* para variável calculada no centro das faces (a) yz , (b) xz e (c) xy : as correções y_g nos quatro centros na malha grossa determinam a correção y_f no centro na malha fina.

3.2.3 *Multigrid* para a equação de Cahn-Hilliard

Usamos o *multigrid* na solução numérica das equações discretas de Cahn-Hilliard (2.25)-(2.26), das equações de Navier-Stokes (2.39) e da equação para a correção da pressão (2.48). Como a equação de Cahn-Hilliard (1.16) foi reescrita na forma do sistema de equações diferenciais parciais (2.14)-(2.15), adaptamos o *multigrid* para determinar simultaneamente as variáveis ϕ_1 e ϕ_2 . Descrevemos a seguir a manipulação algébrica de (2.25)-(2.26) até a obtenção das equações que devem ser relaxadas.

Adotando para o operador Laplaciano ∇^2 a discretização de segunda ordem (2.95), reescrevemos as equações (2.25)-(2.26) na forma do sistema linear

$$\begin{bmatrix} 2\tilde{M}\delta & \frac{\alpha_2}{\Delta t} \\ 1 & -\tau - 2\epsilon^2\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{2i,j,k}^{n+1,l} \\ \phi_{1i,j,k}^{n+1,l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

onde

$$\delta = \frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}, \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} b_1 = & -\frac{\alpha_1}{\Delta t}\phi_1^n - \frac{\alpha_0}{\Delta t}\phi_1^{n-1} + \beta_1 g(\phi_1^n, \phi_2^n) + \beta_0 g(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}) + \\ & + \tilde{M} \left(\frac{\phi_{2i+1,j,k}^{n+1,l} + \phi_{2i-1,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{2i,j+1,k}^{n+1,l} + \phi_{2i,j-1,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} + \frac{\phi_{2i,j,k+1}^{n+1,l} + \phi_{2i,j,k-1}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

e

$$b_2 = -\epsilon^2 \left(\frac{\phi_{1i+1,j,k}^{n+1,l} + \phi_{1i-1,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{1i,j+1,k}^{n+1,l} + \phi_{1i,j-1,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} + \frac{\phi_{1i,j,k+1}^{n+1,l} + \phi_{1i,j,k-1}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right). \quad (3.19)$$

Denominando

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

a matriz inversa à matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2\tilde{M}\delta & \frac{\alpha_2}{\Delta t} \\ 1 & -\tau - 2\epsilon^2\delta \end{bmatrix}, \quad (3.21)$$

temos que

$$a = \frac{\tau + 2\epsilon^2\delta}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2\tilde{M}\delta)(\tau + 2\epsilon^2\delta)}, \quad (3.22)$$

$$b = \frac{\frac{\alpha_2}{\Delta t}}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2\tilde{M}\delta)(\tau + 2\epsilon^2\delta)}, \quad (3.23)$$

$$c = \frac{1}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2\tilde{M}\delta)(\tau + 2\epsilon^2\delta)}, \quad (3.24)$$

$$d = -\frac{2\tilde{M}\delta}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2\tilde{M}\delta)(\tau + 2\epsilon^2\delta)}. \quad (3.25)$$

Dessa maneira, a solução do sistema linear (3.16) é

$$\begin{bmatrix} \phi_{2i,j,k}^{n+1,l} \\ \phi_{1i,j,k}^{n+1,l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad (3.26)$$

ou

$$\phi_{2i,j,k}^{n+1,l} = ab_1 + bb_2, \quad (3.27)$$

$$\phi_{1i,j,k}^{n+1,l} = cb_1 + db_2. \quad (3.28)$$

Ao adotarmos para o operador Laplaciano a discretização de quarta ordem (2.96), escrevemos o sistema (3.16) como

$$\begin{bmatrix} 2.5\tilde{M}\delta & \frac{\alpha_2}{\Delta t} \\ 1 & -\tau - 2.5\epsilon^2\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{2i,j,k}^{n+1,l} \\ \phi_{1i,j,k}^{n+1,l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \quad (3.29)$$

sendo

$$\begin{aligned} b_1 &= -\frac{\alpha_1}{\Delta t}\phi_1^n - \frac{\alpha_0}{\Delta t}\phi_1^{n-1} + \beta_1 g(\phi_1^n, \phi_2^n) + \beta_0 g(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}) + \\ &+ \frac{\tilde{M}}{12} \left(\frac{-\phi_{2i+2,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i+1,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i-1,j,k}^{n+1,l} - \phi_{2i-2,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} \right) + \\ &+ \frac{\tilde{M}}{12} \left(\frac{-\phi_{2i,j+2,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j+1,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j-1,k}^{n+1,l} - \phi_{2i,j-2,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} \right) + \\ &+ \frac{\tilde{M}}{12} \left(\frac{-\phi_{2i,j,k+2}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j,k+1}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j,k-1}^{n+1,l} - \phi_{2i,j,k-2}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right) \end{aligned} \quad (3.30)$$

e

$$\begin{aligned}
b_2 = & -\frac{\epsilon^2}{12} \left(\frac{-\phi_{1,i+2,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{1,i+1,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{1,i-1,j,k}^{n+1,l} - \phi_{1,i-2,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} \right) + \\
& -\frac{\epsilon^2}{12} \left(\frac{-\phi_{1,i,j+2,k}^{n+1,l} + 16\phi_{1,i,j+1,k}^{n+1,l} + 16\phi_{1,i,j-1,k}^{n+1,l} - \phi_{1,i,j-2,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} \right) + \\
& -\frac{\epsilon^2}{12} \left(\frac{-\phi_{1,i,j,k+2}^{n+1,l} + 16\phi_{1,i,j,k+1}^{n+1,l} + 16\phi_{1,i,j,k-1}^{n+1,l} - \phi_{1,i,j,k-2}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right).
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Neste caso, a matriz inversa à matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2.5\tilde{M}\delta & \frac{\alpha_2}{\Delta t} \\ 1 & -\tau - 2.5\epsilon^2\delta \end{bmatrix} \tag{3.32}$$

é a matriz

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\tau + 2.5\epsilon^2\delta}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2.5\tilde{M}\delta)(\tau + 2.5\epsilon^2\delta)} & \frac{\frac{\alpha_2}{\Delta t}}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2.5\tilde{M}\delta)(\tau + 2.5\epsilon^2\delta)} \\ \frac{1}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2.5\tilde{M}\delta)(\tau + 2.5\epsilon^2\delta)} & -\frac{2.5\tilde{M}\delta}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + (2.5\tilde{M}\delta)(\tau + 2.5\epsilon^2\delta)} \end{bmatrix}. \tag{3.33}$$

Quando adimensionalizamos as equações (2.25)-(2.26), passamos a escrever o sistema (3.16) na forma

$$\begin{bmatrix} \frac{2\tilde{\lambda}\delta}{Pe} & \frac{\alpha_2}{\Delta t} \\ 1 & -\tau - 2K^2\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{2,i,j,k}^{n+1,l} \\ \phi_{1,i,j,k}^{n+1,l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \tag{3.34}$$

com

$$\begin{aligned}
b_1 = & -\frac{\alpha_1}{\Delta t}\phi_1^n - \frac{\alpha_0}{\Delta t}\phi_1^{n-1} + \beta_1 g(\phi_1^n, \phi_2^n) + \beta_0 g(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}) + \\
& + \frac{\tilde{\lambda}}{Pe} \left(\frac{\phi_{2,i+1,j,k}^{n+1,l} + \phi_{2,i-1,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{2,i,j+1,k}^{n+1,l} + \phi_{2,i,j-1,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} + \frac{\phi_{2,i,j,k+1}^{n+1,l} + \phi_{2,i,j,k-1}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right)
\end{aligned} \tag{3.35}$$

e

$$b_2 = -K^2 \left(\frac{\phi_{1,i+1,j,k}^{n+1,l} + \phi_{1,i-1,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{1,i,j+1,k}^{n+1,l} + \phi_{1,i,j-1,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} + \frac{\phi_{1,i,j,k+1}^{n+1,l} + \phi_{1,i,j,k-1}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right). \tag{3.36}$$

A solução dos sistema (3.34) é

$$\phi_{2i,j,k}^{n+1,l} = ab_1 + bb_2, \quad (3.37)$$

$$\phi_{1i,j,k}^{n+1,l} = cb_1 + db_2, \quad (3.38)$$

sendo

$$a = \frac{\tau + 2K^2\delta}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2K^2\delta)}, \quad (3.39)$$

$$b = \frac{\frac{\alpha_2}{\Delta t}}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2K^2\delta)}, \quad (3.40)$$

$$c = \frac{1}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2K^2\delta)}, \quad (3.41)$$

$$d = -\frac{\frac{2\tilde{\lambda}\delta}{Pe}}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2K^2\delta)}. \quad (3.42)$$

Para a discretização de quarta ordem do operador Laplaciano , o sistema (3.29) adimensionalizado é dado por

$$\begin{bmatrix} \frac{2.5\tilde{\lambda}\delta}{Pe} & \frac{\alpha_2}{\Delta t} \\ 1 & -\tau - 2.5K^2\delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{2i,j,k}^{n+1,l} \\ \phi_{1i,j,k}^{n+1,l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}, \quad (3.43)$$

no qual

$$\begin{aligned} b_1 = & -\frac{\alpha_1}{\Delta t}\phi_1^n - \frac{\alpha_0}{\Delta t}\phi_1^{n-1} + \beta_1 g(\phi_1^n, \phi_2^n) + \beta_0 g(\phi_1^{n-1}, \phi_2^{n-1}) + \\ & + \frac{\tilde{\lambda}}{12Pe} \left(\frac{-\phi_{2i+2,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i+1,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i-1,j,k}^{n+1,l} - \phi_{2i-2,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} \right) + \\ & + \frac{\tilde{\lambda}}{12Pe} \left(\frac{-\phi_{2i,j+2,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j+1,k}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j-1,k}^{n+1,l} - \phi_{2i,j-2,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} \right) + \\ & + \frac{\tilde{\lambda}}{12Pe} \left(\frac{-\phi_{2i,j,k+2}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j,k+1}^{n+1,l} + 16\phi_{2i,j,k-1}^{n+1,l} - \phi_{2i,j,k-2}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

e

$$\begin{aligned}
b_2 = & -\frac{K^2}{12} \left(\frac{-\phi_{i+2,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{i+1,j,k}^{n+1,l} + 16\phi_{i-1,j,k}^{n+1,l} - \phi_{i-2,j,k}^{n+1,l}}{(\Delta x)^2} \right) + \\
& -\frac{K^2}{12} \left(\frac{-\phi_{i,j+2,k}^{n+1,l} + 16\phi_{i,j+1,k}^{n+1,l} + 16\phi_{i,j-1,k}^{n+1,l} - \phi_{i,j-2,k}^{n+1,l}}{(\Delta y)^2} \right) + \\
& -\frac{K^2}{12} \left(\frac{-\phi_{i,j,k+2}^{n+1,l} + 16\phi_{i,j,k+1}^{n+1,l} + 16\phi_{i,j,k-1}^{n+1,l} - \phi_{i,j,k-2}^{n+1,l}}{(\Delta z)^2} \right).
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Dessa maneira, na solução dos sistema (3.43) teremos que

$$a = \frac{\tau + 2.5K^2\delta}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2.5\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2.5K^2\delta)}, \tag{3.46}$$

$$b = \frac{\frac{\alpha_2}{\Delta t}}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2.5\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2.5K^2\delta)}, \tag{3.47}$$

$$c = \frac{1}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2.5\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2.5K^2\delta)}, \tag{3.48}$$

$$d = -\frac{\frac{2.5\tilde{\lambda}\delta}{Pe}}{\frac{\alpha_2}{\Delta t} + \left(\frac{2.5\tilde{\lambda}\delta}{Pe}\right)(\tau + 2.5K^2\delta)}. \tag{3.49}$$

3.3 Células fantasmas

Percebemos claramente nas operações de subida no *multigrid*, ou seja, no prolongamento, que são necessários os valores da correção em células que não integram o domínio computacional. O mesmo acontece quando aplicamos o operador Laplaciano discreto (2.95) ou (2.96).

Denominamos *fantasmas* as células não pertencentes ao domínio computacional. A atribuição de valores a essas células é essencial para que se possa efetuar o prolongamento, a relaxação e o cálculo do resíduo e da correção.

Anexamos células fantasmas às faces de todas as malhas em todos os níveis, inclusive os níveis virtuais, sendo que também usamos essas células para armazenar as condições de contorno. A atribuição de valores para as células fantasmas nos níveis físicos envolve

a interpolação de valores das malhas grossas e das malhas finas, a “injeção” de valores para malhas do mesmo nível (malhas irmãs) e a transferência de condições de contorno não periódicas. Maiores informações acerca da atribuição de valores às células fantasmas podem ser encontradas em Roma [81].

3.4 Estratégia para o refinamento adaptativo

Sabemos que nos modelos de campo de fase, tais como a equação de Cahn-Hilliard (1.16), a região de transição requer alta resolução. Nosso intuito é portanto refinar localmente essa região.

No modelo de campo de fase que adotamos, as fases estáveis do fluido bifásico são representadas pelos valores -1 e 1 e a transição pelos valores entre eles. Usamos esta propriedade para marcar as células computacionais que serão refinadas. Dessa maneira, uma célula computacional no nível imediatamente abaixo do nível mais fino é marcada se o campo de fase ϕ calculado no seu centro satisfaz a propriedade

$$\phi \in [\phi_{trans} - p \phi_{max}, \phi_{trans} + p \phi_{max}], \quad (3.50)$$

sendo $\phi_{trans} = 0$, $\phi_{max} = 1$ o valor máximo do campo de fase e p um percentual de ϕ_{max} , como por exemplo, $p = 0.99$. Com esta estratégia, refinamos $p\%$ da região de transição.

Os índices globais das células computacionais marcadas segundo a propriedade (3.50) são anexados a uma lista ligada, para em seguida serem convertidos em coordenadas. Estas são submetidas ao AMR, que define os vértices dos paralelepípedos que terão o passo espacial em cada uma das direções dividido por dois, como mostra a Figura 3.10. Para definir os vértices, o AMR emprega técnicas de geometria computacional, como as inflexões da segunda derivada [14].

A lista ligada que contém os índices globais das células computacionais marcadas para o refinamento não pode conter um ponto repetidas vezes porque isso reduz a eficiência do AMR. Para evitar o uso de um algoritmo de ordenação e limpeza da lista e, conseqüentemente, um incremento no custo computacional, efetuamos uma seleção criteriosa que impede a anexação de um conjunto de índices repetidas vezes.

A adaptatividade do refinamento é definida pela verificação da propriedade (3.50) a

Figura 3.10: Células computacionais marcadas para o refinamento localizado.

cada $n \Delta t$ passos no tempo, com $n = 2$ ou $n = 4$. Se pelo menos uma célula computacional do novo conjunto de células marcadas no nível imediatamente abaixo do nível mais fino não pertencer ao conjunto de células marcadas anteriormente, o processo de refinamento é então novamente ativado.

Verificação do esquema numérico: soluções manufaturadas

Neste capítulo, apresentamos testes em malhas uniformes e compostas para comprovar numericamente a ordem de convergência dos esquemas propostos. Para a pressão esperamos ordem igual a pelo menos um e para o campo de fase e as componentes da velocidade, ordem dois.

Os testes foram executados nas máquinas 3 e 4 (Apêndice C) e mantivemos a notação empregada no Capítulo 3 que aborda as técnicas *multinível-multigrid*. O primeiro nível virtual é composto sempre por duas células computacionais em cada uma das três direções, sendo que nestas adotamos o mesmo espaçamento, ou seja, $\Delta x = \Delta y = \Delta z$. Os efeitos da anisotropia introduzida por $\Delta x \neq \Delta y \neq \Delta z$ não são avaliados nesses testes.

Na malha composta, utilizamos dois níveis físicos que permanecem inalterados ao longo do tempo (malha composta estática). Queremos dessa forma verificar se os erros de truncamento introduzidos pela interpolação e pela discretização nas interfaces entre as malhas grossas e finas são controlados corretamente a fim de evitar a degradação da precisão global. Para o refinamento localizado, selecionamos duas malhas em formato de “L” que tocam as faces oeste, sul e inferior do domínio espacial $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, como mostra a Figura 4.1. O formato das malhas e o fato de tocarem a fronteira do domínio computacional permitem verificar o preenchimento das células fantasmas de malhas irmãs bem como a atualização dos valores das células fantasmas usando as condições de contorno definidas para o teste. Essas duas malhas ocupam as seguintes regiões do domínio: $[0, 0.125] \times [0, 0.25] \times [0, 0.5]$ e $[0.125, 0.375] \times [0, 0.25] \times [0.375, 0.5]$.

Figura 4.1: (a) Malha composta por dois níveis físicos, com cortes em (b) $x = 0.1$, (c) $x = 0.3$, (d) $y = 0.2$, (e) $z = 0.3$ e (f) $z = 0.375$. O nível físico mais grosso corresponde a uma malha $32 \times 32 \times 32$.

4.1 Análise da convergência numérica

Antes de apresentarmos alguns testes numéricos, convém descrever as normas e a análise de convergência numérica empregadas na malha deslocada, seja ela uniforme ou composta.

A localização das variáveis escalares e vetoriais implica em quatro diferentes discretizações do domínio Ω :

1. Ω_p^h , onde todas as variáveis escalares - parâmetro de ordem ϕ , mobilidade λ , pressão p , correção de pressão q , densidade de massa ρ , viscosidade η - são definidas, é a união dos centros das células computacionais;
2. Ω_u^h , onde a componente u na direção x da velocidade é definida, é a união dos centros das faces nas direções y e z das células computacionais;
3. Ω_v^h , onde a componente v na direção y da velocidade é definida, é a união dos centros das faces nas direções x e z das células computacionais;
4. Ω_w^h , onde a componente w na direção z da velocidade é definida, é a união dos centros das faces nas direções x e y das células computacionais.

Assim, as normas Euclidiana e do máximo de uma variável escalar ψ definida em Ω_p^h são dadas respectivamente por

$$\|\psi\|_2 = \left(\sum_{k \in \Omega_p^h} |\psi_k|^2 \Delta x \Delta y \Delta z \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1)$$

e

$$\|\psi\|_\infty = \max_{k \in \Omega_p^h} \{|\psi_k|\}, \quad (4.2)$$

onde ψ_k é o valor assumido por ψ no centro da célula computacional k cujas dimensões são Δx , Δy e Δz .

Quanto às componentes de uma variável vetorial, como a componente u da velocidade, definida em Ω_u^h , as normas Euclidiana e do máximo são obtidas respectivamente pelas

expressões

$$\|u\|_2 = \left(\sum_{i \in \Omega_u^h} |u_i|^2 a_i \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.3)$$

e

$$\|u\|_\infty = \max_{i \in \Omega_u^h} \{|u_i|\}, \quad (4.4)$$

onde

$$a_i = \begin{cases} \Delta x \Delta y \Delta z, & \text{nas faces } yz \text{ da malha grossa} \\ \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{r^3}, & \text{nas faces } yz \text{ da malha fina} \\ \frac{(r+1)}{2} \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{r^3}, & \text{nas faces } yz \text{ da interface} \end{cases}, \quad (4.5)$$

sendo $r = 2$ a razão de refinamento entre os níveis ℓ e $\ell + 1$ e Δx , Δy e Δz o espaçamento da malha em cada uma das direções no nível ℓ . As normas Euclidiana e do máximo para as componentes v e w da velocidade são definidas de forma análoga à (4.3) e (4.4).

Para a análise de convergência numérica, assumimos que a solução numérica obtida possui uma expansão assintótica em potências do espaçamento da malha. Em uma malha uniforme, por exemplo, com $h = \Delta x = \Delta y = \Delta z$, a solução numérica $\psi(t, x, y, z, h)$ de uma variável escalar ψ pode ser escrita como

$$\psi(t, x, y, z, h) = \psi_e(t, x, y, z) + E_n(t, x, y, z) h^n + E_{n+1}(t, x, y, z) h^{n+1} + \dots \quad (4.6)$$

$\forall h$ suficientemente pequeno, onde $\psi_e(t, x, y, z)$ é a solução exata e os coeficientes E_i , $i = n, n + 1, \dots$, são independentes de h .

Em todos os testes deste capítulo, a solução exata é conhecida ao longo do tempo. Nesses testes, após encontrarmos $\psi(t, x, y, z, h)$ para um dado h , calculamos $\psi\left(t, x, y, z, \frac{h}{2}\right)$. Assim, as soluções numéricas na malha com espaçamento h e $\frac{h}{2}$ podem ser aproximadas respectivamente por

$$\psi(t, x, y, z, h) \approx \psi_e(t, x, y, z) + E_n(t, x, y, z) h^n \quad (4.7)$$

e

$$\psi\left(t, x, y, z, \frac{h}{2}\right) \approx \psi_e(t, x, y, z) + E_n(t, x, y, z) \frac{h^n}{2^n}, \quad (4.8)$$

o que nos fornece a seguinte estimativa para a razão de convergência:

$$R = \frac{\|\psi(t, x, y, z, h) - \psi_e(t, x, y, z)\|}{\|\psi(t, x, y, z, \frac{h}{2}) - \psi_e(t, x, y, z)\|}$$

$$R \approx \frac{\|E_n(t, x, y, z) h^n\|}{\|E_n(t, x, y, z) \frac{h^n}{2^n}\|}$$

$$R \approx 2^n, \quad (4.9)$$

com $\|\cdot\|$ representando a norma (4.1) ou (4.2).

Para obter a ordem de convergência n na expressão (4.9) basta considerarmos

$$\log_2 R \rightarrow n. \quad (4.10)$$

Usaremos a estimativa (4.10) para determinar a ordem de convergência em malhas uniformes e em malhas compostas das variáveis discretas que compõem o modelo matemático.

4.2 Laplaciano de quarta ordem

Para comprovar a ordem da discretização (2.96), consideramos a função

$$f(x, y, z) = \sin^3(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z), \quad (x, y, z) \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1], \quad (4.11)$$

cujo Laplaciano é igual a

$$\begin{aligned} \nabla_e^2 f(x, y, z) &= 72\pi^2 \sin(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z) \cos^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z) + \\ &- 36\pi^2 \sin^3(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z). \end{aligned} \quad (4.12)$$

A Tabela 4.1 apresenta as razões de convergência obtidas em malhas uniformes.

Malha	$\ L - \nabla_e^2\ _\infty$	R ($\ \cdot\ _\infty$)	$\ L - \nabla_e^2\ _2$	R ($\ \cdot\ _2$)
$32 \times 32 \times 32$	3.432522×10^{-1}		2.443822×10^{-1}	
$64 \times 64 \times 64$	2.203392×10^{-2}	15.56	1.563260×10^{-2}	15.63
$128 \times 128 \times 128$	1.391738×10^{-3}	15.83	9.827282×10^{-4}	15.91
$256 \times 256 \times 256$	8.728650×10^{-5}	15.94	6.150977×10^{-5}	15.98

Tabela 4.1: Ordem do operador Laplaciano.

Observamos na Tabela 4.1 que

$$\log_2 R \rightarrow 4$$

tanto para a norma do máximo quanto para a norma Euclidiana. Temos portanto uma discretização de quarta ordem para o operador Laplaciano.

4.3 Equação de Cahn-Hilliard

Verificamos a ordem de discretização do esquema numérico proposto para a equação de Cahn-Hilliard (1.16) testando-o na solução da equação

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) = \nabla \cdot [M(\phi(t, \mathbf{x})) \nabla \mu(\phi(t, \mathbf{x}))] + F_{CH}(t, \mathbf{x}), \quad (4.13)$$

onde $F_{CH}(t, \mathbf{x})$ é um termo forçante.

Construimos um problema teste suave escolhendo a função

$$\phi_e(t, \mathbf{x}) = \sin^3(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \quad (4.14)$$

com $0 \leq t \leq 10$ e $(x, y, z) = \mathbf{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, como solução exata de (4.13) (solução manufaturada), de tal maneira que $-1 \leq \phi_e \leq 1 \quad \forall (t, \mathbf{x})$. A partir dessa escolha, o termo forçante é dado por

$$F_{CH}(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \phi_e}{\partial t}(t, \mathbf{x}) - \nabla \cdot [M(\phi_e(t, \mathbf{x})) \nabla \mu(\phi_e(t, \mathbf{x}))]$$

e a condição inicial por $\phi(0, \mathbf{x}) = \phi_e(0, \mathbf{x})$.

Adotamos mobilidade constante, isto é, $M(\phi_e(t, \mathbf{x})) = 1$, condições de contorno periódicas e o passo temporal (2.97). Para as constantes presentes nas equações discretas (2.22)-(2.23), atribuímos os valores

$$\alpha = \beta = 1,$$

$$\tilde{M} = 1,$$

$$\tau = 2,$$

$$\epsilon^2 = 0.01.$$

As Tabelas 4.2-4.3 mostram os resultados obtidos para o teste em uma malha uniforme e na malha composta descrita no início deste capítulo, respectivamente. Observando-as, percebemos a convergência de segunda ordem do esquema numérico.

Malhas	$\ \phi - \phi_e\ _2$	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L1	7.475653×10^{-2}	8	
$64 \times 64 \times 64$ L1	1.843576×10^{-2}	7	4.05
$128 \times 128 \times 128$ L1	4.584894×10^{-3}	7	4.02

Tabela 4.2: Razão de convergência para a equação de Cahn-Hilliard em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e mobilidade constante.

Malhas	$\ \phi - \phi_e\ _2$	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L2	8.085192×10^{-2}	11	
$64 \times 64 \times 64$ L2	2.376079×10^{-2}	11	3.40
$128 \times 128 \times 128$ L2	5.963587×10^{-3}	11	3.98

Tabela 4.3: Razão de convergência para a equação de Cahn-Hilliard em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e mobilidade constante.

4.4 Equações de Navier-Stokes

Verificamos a estratégia numérica proposta às equações de Navier-Stokes (1.20) testando a metodologia na solução das equações

$$\begin{aligned}
 \rho(t, \mathbf{x}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \right) &= -\nabla p(t, \mathbf{x}) + \\
 &+ \nabla \cdot [\eta(t, \mathbf{x}) (\nabla \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) + \nabla \mathbf{u}^T(t, \mathbf{x}))] + \\
 &+ F_{NS}(t, \mathbf{x}), \\
 \nabla \cdot \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) &= 0,
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

onde $F_{NS}(t, \mathbf{x})$ é novamente um termo forçante.

Para o teste suave, atribuímos à solução exata de (4.15) o campo de velocidade

$$\begin{aligned}
 u_e(t, \mathbf{x}) &= \sin^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t) \\
 v_e(t, \mathbf{x}) &= \cos^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \\
 w_e(t, \mathbf{x}) &= 1
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

cujo divergente é nulo, e o campo de pressão

$$p_e(t, \mathbf{x}) = \cos(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \quad (4.17)$$

nos quais $0 \leq t \leq 5$ e $(x, y, z) = \mathbf{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$.

Solucionamos as equações discretas (2.39) usando o passo temporal (2.99) e a projeção descrita no Capítulo 2. O termo forçante é dado por

$$\begin{aligned} F_{NSx} &= \rho_e \left[\frac{\partial u_e}{\partial t} + (u_e, v_e, w_e) \cdot \left(\frac{\partial u_e}{\partial x}, \frac{\partial u_e}{\partial y}, \frac{\partial u_e}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial p_e}{\partial x} + \\ &\quad - \left[\eta_e \nabla^2 u_e + 2 \frac{\partial u_e}{\partial x} \frac{\partial \eta_e}{\partial x} + \left(\frac{\partial u_e}{\partial y} + \frac{\partial v_e}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial y} + \left(\frac{\partial u_e}{\partial z} + \frac{\partial w_e}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial z} \right], \\ F_{NSy} &= \rho_e \left[\frac{\partial v_e}{\partial t} + (u_e, v_e, w_e) \cdot \left(\frac{\partial v_e}{\partial x}, \frac{\partial v_e}{\partial y}, \frac{\partial v_e}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial p_e}{\partial y} + \\ &\quad - \left[\eta_e \nabla^2 v_e + \left(\frac{\partial v_e}{\partial x} + \frac{\partial u_e}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial x} + 2 \frac{\partial v_e}{\partial y} \frac{\partial \eta_e}{\partial y} + \left(\frac{\partial v_e}{\partial z} + \frac{\partial w_e}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial z} \right], \\ F_{NSz} &= \rho_e \left[\frac{\partial w_e}{\partial t} + (u_e, v_e, w_e) \cdot \left(\frac{\partial w_e}{\partial x}, \frac{\partial w_e}{\partial y}, \frac{\partial w_e}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial p_e}{\partial z} + \\ &\quad - \left[\eta_e \nabla^2 w_e + \left(\frac{\partial w_e}{\partial x} + \frac{\partial u_e}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial x} + \left(\frac{\partial w_e}{\partial y} + \frac{\partial v_e}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial y} + 2 \frac{\partial w_e}{\partial z} \frac{\partial \eta_e}{\partial z} \right] \end{aligned}$$

e as condições iniciais por $u(0, \mathbf{x}) = u_e(0, \mathbf{x})$, $v(0, \mathbf{x}) = v_e(0, \mathbf{x})$, $w(0, \mathbf{x}) = w_e(0, \mathbf{x})$ e $p(0, \mathbf{x}) = p_e(0, \mathbf{x})$.

Apresentamos a seguir os resultados obtidos para propriedades físicas constantes e variáveis.

4.4.1 Propriedades físicas constantes

Consideramos inicialmente densidade de massa e viscosidade constantes e atribuímos às mesmas os valores

$$\rho_e(t, \mathbf{x}) = 1,$$

$$\eta_e(t, \mathbf{x}) = 1.$$

Para a constante $\tilde{\eta}$ presente nas equações (2.39) adotamos

$$\tilde{\eta} = 2 \max_{\Omega} \{\eta_e\} = 2.$$

As Tabelas 4.4-4.7 mostram os resultados que obtivemos em uma malha uniforme e na malha composta descrita anteriormente para condições de contorno periódicas e mistas (condições de Dirichlet para a velocidade e condições homogêneas de Neumann para a correção de pressão).

1. Malha uniforme

(a) Condições de contorno periódicas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 2.877516 \times 10^{-3}$	4	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.714069 \times 10^{-3}$	4	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.714069 \times 10^{-3}$	4	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 1.571127 \times 10^{-5}$	2	
$64 \times 64 \times 64$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 1.729498 \times 10^{-3}$	4	1.66
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.173169 \times 10^{-3}$	5	4.02
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.173169 \times 10^{-3}$	5	4.02
	w	$\ w - w_e\ _2 = 3.805070 \times 10^{-6}$	3	4.13
$128 \times 128 \times 128$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 3.729197 \times 10^{-4}$	3	4.64
	u	$\ u - u_e\ _2 = 2.933410 \times 10^{-4}$	6	4.00
	v	$\ v - v_e\ _2 = 2.933410 \times 10^{-4}$	6	4.00
	w	$\ w - w_e\ _2 = 9.437223 \times 10^{-7}$	3	4.03

Tabela 4.4: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade constantes.

(b) Condições de contorno mistas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 7.625060 \times 10^{-2}$	10	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.710233 \times 10^{-3}$	5	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.709300 \times 10^{-3}$	5	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 8.654570 \times 10^{-4}$	5	
$64 \times 64 \times 64$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 2.618331 \times 10^{-2}$	10	2.91
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.179119 \times 10^{-3}$	8	3.99
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.178833 \times 10^{-3}$	8	3.99
	w	$\ w - w_e\ _2 = 2.209748 \times 10^{-4}$	6	3.92
$128 \times 128 \times 128$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 7.867745 \times 10^{-3}$	11	3.33
	u	$\ u - u_e\ _2 = 2.956806 \times 10^{-4}$	10	3.99
	v	$\ v - v_e\ _2 = 2.956023 \times 10^{-4}$	10	3.99
	w	$\ w - w_e\ _2 = 5.595993 \times 10^{-5}$	7	3.95

Tabela 4.5: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade constantes.

2. Malha composta

(a) Condições de contorno periódicas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 3.301222 \times 10^{-2}$	8	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.914711 \times 10^{-3}$	9	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 6.267344 \times 10^{-3}$	7	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 5.296267 \times 10^{-4}$	8	
$64 \times 64 \times 64$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 1.086049 \times 10^{-2}$	10	3.04
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.133314 \times 10^{-3}$	10	4.34
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.599518 \times 10^{-3}$	9	3.92
	w	$\ w - w_e\ _2 = 1.274240 \times 10^{-4}$	8	4.16
$128 \times 128 \times 128$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 3.713757 \times 10^{-3}$	10	2.92
	u	$\ u - u_e\ _2 = 3.532378 \times 10^{-4}$	16	3.21
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.044154 \times 10^{-4}$	15	3.96
	w	$\ w - w_e\ _2 = 3.505976 \times 10^{-5}$	13	3.63

Tabela 4.6: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade constantes.

(b) Condições de contorno mistas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32 \text{L2}$	p	$\ p - p_e\ _2 = 8.590690 \times 10^{-2}$	13	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.586510 \times 10^{-3}$	6	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.585859 \times 10^{-3}$	6	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 8.290550 \times 10^{-4}$	6	
$64 \times 64 \times 64 \text{L2}$	p	$\ p - p_e\ _2 = 2.762066 \times 10^{-2}$	12	3.11
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.145301 \times 10^{-3}$	11	4.00
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.144909 \times 10^{-3}$	11	4.01
	w	$\ w - w_e\ _2 = 2.105845 \times 10^{-4}$	10	3.94
$128 \times 128 \times 128 \text{L2}$	p	$\ p - p_e\ _2 = 8.269195 \times 10^{-3}$	13	3.34
	u	$\ u - u_e\ _2 = 2.866686 \times 10^{-4}$	15	4.00
	v	$\ v - v_e\ _2 = 2.864136 \times 10^{-4}$	15	4.00
	w	$\ w - w_e\ _2 = 5.323783 \times 10^{-5}$	13	3.96

Tabela 4.7: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade constantes.

Analisando as Tabelas 4.4-4.7, constatamos as ordens de convergência esperadas para a pressão (pelo menos um) e para as componentes da velocidade (dois). É importante salientar que a razão nem sempre converge de forma monotônica (crescente ou decrescente). Em alguns casos, a convergência pode ocorrer de forma oscilante.

4.4.2 Propriedades físicas variáveis

Consideramos agora a densidade de massa e a viscosidade dadas respectivamente por

$$\rho_e(t, \mathbf{x}) = 1 + 0.1 \sin^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t), \quad (4.18)$$

$$\eta_e(t, \mathbf{x}) = 1 + 0.2 \cos^2(2\pi x + 2\pi y + 2\pi z + t). \quad (4.19)$$

Segundo (4.18) e (4.19), a densidade de massa e a viscosidade variam 10% e 20%, respectivamente, no domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$. Para a constante $\tilde{\eta}$ presente nas equações (2.39) adotamos $\tilde{\eta} = 2 \max_{\Omega} \{\eta_e\} = 2.4$.

Mostramos nas Tabelas 4.8-4.11 os resultados que obtivemos para densidade de massa e viscosidade variáveis em uma malha uniforme e na malha composta descrita inicialmente. As condições de contorno usadas são periódicas e mistas (condições de Dirichlet para a velocidade e condições homogêneas de Neumann para a correção de pressão).

1. Malha uniforme

(a) Condições de contorno periódicas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 5.770574 \times 10^{-3}$	4	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 7.025708 \times 10^{-1}$	5	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 7.025840 \times 10^{-1}$	5	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 1.984570 \times 10^{-5}$	3	
$64 \times 64 \times 64$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 2.104960 \times 10^{-3}$	4	2.74
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.798963 \times 10^{-1}$	5	3.91
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.798994 \times 10^{-1}$	5	3.91
	w	$\ w - w_e\ _2 = 4.827774 \times 10^{-6}$	3	4.11
$128 \times 128 \times 128$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 2.252903 \times 10^{-4}$	3	9.34
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.524258 \times 10^{-2}$	6	3.98
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.524335 \times 10^{-2}$	6	3.98
	w	$\ w - w_e\ _2 = 1.198052 \times 10^{-6}$	3	4.03

Tabela 4.8: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade variáveis.

(b) Condições de contorno mistas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 1.026733 \times 10^{-1}$	10	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.709652 \times 10^{-3}$	5	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.708920 \times 10^{-3}$	5	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 8.713121 \times 10^{-4}$	5	
$64 \times 64 \times 64$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 3.253977 \times 10^{-2}$	10	3.16
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.180966 \times 10^{-3}$	8	3.99
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.180722 \times 10^{-3}$	8	3.99
	w	$\ w - w_e\ _2 = 2.223571 \times 10^{-4}$	6	3.92
$128 \times 128 \times 128$ L1	p	$\ p - p_e\ _2 = 9.453558 \times 10^{-3}$	11	3.44
	u	$\ u - u_e\ _2 = 2.962292 \times 10^{-4}$	10	3.99
	v	$\ v - v_e\ _2 = 2.961612 \times 10^{-4}$	10	3.99
	w	$\ w - w_e\ _2 = 5.628550 \times 10^{-5}$	7	3.95

Tabela 4.9: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis.

2. Malha composta

(a) Condições de contorno periódicas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 3.616793 \times 10^{-2}$	8	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 6.911005 \times 10^{-1}$	9	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 6.880506 \times 10^{-1}$	7	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 4.707882 \times 10^{-4}$	8	
$64 \times 64 \times 64$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 1.173238 \times 10^{-2}$	10	3.08
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.783823 \times 10^{-1}$	11	3.87
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.768310 \times 10^{-1}$	11	3.89
	w	$\ w - w_e\ _2 = 1.074030 \times 10^{-4}$	10	4.38
$128 \times 128 \times 128$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 4.012595 \times 10^{-3}$	10	2.92
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.552491 \times 10^{-2}$	16	3.92
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.478652 \times 10^{-2}$	16	3.95
	w	$\ w - w_e\ _2 = 2.980896 \times 10^{-5}$	13	3.60

Tabela 4.10: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e densidade de massa e viscosidade variáveis.

(b) Condições de contorno mistas

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 1.106547 \times 10^{-1}$	13	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.579125 \times 10^{-3}$	6	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.578537 \times 10^{-3}$	6	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 8.292402 \times 10^{-4}$	6	
$64 \times 64 \times 64$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 3.365981 \times 10^{-2}$	12	3.29
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.143598 \times 10^{-3}$	11	4.00
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.143219 \times 10^{-3}$	11	4.00
	w	$\ w - w_e\ _2 = 2.106345 \times 10^{-4}$	10	3.94
$128 \times 128 \times 128$ L2	p	$\ p - p_e\ _2 = 9.745991 \times 10^{-3}$	13	3.45
	u	$\ u - u_e\ _2 = 2.862557 \times 10^{-4}$	16	4.00
	v	$\ v - v_e\ _2 = 2.860217 \times 10^{-4}$	15	4.00
	w	$\ w - w_e\ _2 = 5.320698 \times 10^{-5}$	13	3.96

Tabela 4.11: Razão de convergência para as equações de Navier-Stokes em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno homogêneas de Neumann para a correção de pressão e de Dirichlet para as componentes da velocidade e densidade de massa e viscosidade variáveis.

Nas Tabelas 4.8-4.11 observamos novamente ordem pelo menos um para a pressão e ordem dois para as componentes da velocidade.

4.5 Modelo H

Testamos a estratégia numérica proposta às equações (1.27)-(1.29) do modelo H dimensional na solução das equações

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla \phi(t, \mathbf{x}) = \nabla \cdot [M(\phi(t, \mathbf{x})) \nabla \mu(\phi(t, \mathbf{x}))] + F_{CH}(t, \mathbf{x}), \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \rho(t, \mathbf{x}) \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) \right) &= -\nabla p(t, \mathbf{x}) + \\ &+ \nabla \cdot [\eta(t, \mathbf{x}) (\nabla \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) + \nabla \mathbf{u}^T(t, \mathbf{x}))] + \\ &+ \mu(\phi(t, \mathbf{x})) \nabla \phi(t, \mathbf{x}) + F_{NS}(t, \mathbf{x}), \end{aligned} \quad (4.21)$$

e

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(t, \mathbf{x}) = 0, \quad (4.22)$$

nas quais $F_{CH}(t, \mathbf{x})$ e $F_{NS}(t, \mathbf{x})$ são termos forçantes.

Na construção do problema de teste suave, atribuímos à solução exata de (4.20)-(4.22) o campo de fase dado por (4.14) e os campos de velocidade (4.16) e de pressão (4.17), para os quais $0 \leq t \leq 5$ e $(x, y, z) = \mathbf{x} \in [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$.

Resolvemos as equações discretas (2.59)-(2.62) usando o passo temporal (2.99) e a projeção relatada no Capítulo 2. Os termos forçantes são dados por

$$F_{CH}(t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \phi_e}{\partial t}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{u}_e(t, \mathbf{x}) \cdot \nabla \phi_e(t, \mathbf{x}) - \nabla \cdot [M(\phi_e(t, \mathbf{x})) \nabla \mu(\phi_e(t, \mathbf{x}))],$$

$$\begin{aligned} F_{NSx} &= \rho_e \left[\frac{\partial u_e}{\partial t} + (u_e, v_e, w_e) \cdot \left(\frac{\partial u_e}{\partial x}, \frac{\partial u_e}{\partial y}, \frac{\partial u_e}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial p_e}{\partial x} + \\ &- \left[\eta_e \nabla^2 u_e + 2 \frac{\partial u_e}{\partial x} \frac{\partial \eta_e}{\partial x} + \left(\frac{\partial u_e}{\partial y} + \frac{\partial v_e}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial y} + \left(\frac{\partial u_e}{\partial z} + \frac{\partial w_e}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial z} \right] + \\ &- \mu(\phi_e) \frac{\partial \phi_e}{\partial x}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_{NSy} &= \rho_e \left[\frac{\partial v_e}{\partial t} + (u_e, v_e, w_e) \cdot \left(\frac{\partial v_e}{\partial x}, \frac{\partial v_e}{\partial y}, \frac{\partial v_e}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial p_e}{\partial y} + \\
&- \left[\eta_e \nabla^2 v_e + \left(\frac{\partial v_e}{\partial x} + \frac{\partial u_e}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial x} + 2 \frac{\partial v_e}{\partial y} \frac{\partial \eta_e}{\partial y} + \left(\frac{\partial v_e}{\partial z} + \frac{\partial w_e}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial z} \right] + \\
&- \mu(\phi_e) \frac{\partial \phi_e}{\partial y}, \\
\\
F_{NSz} &= \rho_e \left[\frac{\partial w_e}{\partial t} + (u_e, v_e, w_e) \cdot \left(\frac{\partial w_e}{\partial x}, \frac{\partial w_e}{\partial y}, \frac{\partial w_e}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial p_e}{\partial z} + \\
&- \left[\eta_e \nabla^2 w_e + \left(\frac{\partial w_e}{\partial x} + \frac{\partial u_e}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial x} + \left(\frac{\partial w_e}{\partial y} + \frac{\partial v_e}{\partial z} \right) \frac{\partial \eta_e}{\partial y} + 2 \frac{\partial w_e}{\partial z} \frac{\partial \eta_e}{\partial z} \right] + \\
&- \mu(\phi_e) \frac{\partial \phi_e}{\partial z}
\end{aligned}$$

e as condições iniciais por $\phi(0, \mathbf{x}) = \phi_e(0, \mathbf{x})$, $u(0, \mathbf{x}) = u_e(0, \mathbf{x})$, $v(0, \mathbf{x}) = v_e(0, \mathbf{x})$, $w(0, \mathbf{x}) = w_e(0, \mathbf{x})$ e $p(0, \mathbf{x}) = p_e(0, \mathbf{x})$.

Adotamos mobilidade, densidade de massa e viscosidade constantes, isto é,

$$M(\phi_e(t, \mathbf{x})) = 1,$$

$$\rho_e(t, \mathbf{x}) = 1 \quad e$$

$$\eta_e(t, \mathbf{x}) = 1,$$

assim como condições de contorno periódicas. Para as constantes presentes nas equações discretas (2.59)-(2.62), atribuímos os valores

$$\alpha = \beta = 1,$$

$$\tilde{M} = 1,$$

$$\tau = 2,$$

$$\epsilon^2 = 0.01,$$

$$\tilde{\eta} = 2 \max_{\Omega} \{\eta_e\} = 2.$$

As Tabelas 4.12-4.13 mostram os resultados encontrados para o teste em uma malha uniforme e na malha composta descrita no início deste capítulo, respectivamente. Observando-as, notamos que as razões de convergência se aproximam dos valores esperados, com exceção da quarta ordem obtida na malha uniforme para a componente w da velocidade.

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L1	ϕ	$\ \phi - \phi_e\ _2 = 7.692415 \times 10^{-2}$	7	
	p	$\ p - p_e\ _2 = 3.411351 \times 10^{-2}$	4	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 5.940015 \times 10^{-3}$	5	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 5.939964 \times 10^{-3}$	5	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 3.585000 \times 10^{-3}$	4	
$64 \times 64 \times 64$ L1	ϕ	$\ \phi - \phi_e\ _2 = 1.898491 \times 10^{-2}$	6	4.05
	p	$\ p - p_e\ _2 = 1.019306 \times 10^{-2}$	5	3.35
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.200621 \times 10^{-3}$	5	4.95
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.200621 \times 10^{-3}$	5	4.95
	w	$\ w - w_e\ _2 = 2.520940 \times 10^{-4}$	4	14.22
$128 \times 128 \times 128$ L1	ϕ	$\ \phi - \phi_e\ _2 = 4.716435 \times 10^{-3}$	5	4.03
	p	$\ p - p_e\ _2 = 2.562559 \times 10^{-3}$	4	3.98
	u	$\ u - u_e\ _2 = 2.936539 \times 10^{-4}$	6	4.09
	v	$\ v - v_e\ _2 = 2.936539 \times 10^{-4}$	6	4.09
	w	$\ w - w_e\ _2 = 1.587802 \times 10^{-5}$	3	15.88

Tabela 4.12: Razão de convergência para as equações do Modelo H em uma malha uniforme, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e mobilidade e viscosidade constantes.

Malhas	Variável	Norma	MW	R
$32 \times 32 \times 32$ L2	ϕ	$\ \phi - \phi_e\ _2 = 8.113969 \times 10^{-2}$	9	
	p	$\ p - p_e\ _2 = 5.391881 \times 10^{-2}$	7	
	u	$\ u - u_e\ _2 = 4.873936 \times 10^{-3}$	9	
	v	$\ v - v_e\ _2 = 9.129110 \times 10^{-3}$	7	
	w	$\ w - w_e\ _2 = 4.165557 \times 10^{-3}$	8	
$64 \times 64 \times 64$ L2	ϕ	$\ \phi - \phi_e\ _2 = 2.425453 \times 10^{-2}$	10	3.35
	p	$\ p - p_e\ _2 = 1.587228 \times 10^{-2}$	9	3.40
	u	$\ u - u_e\ _2 = 1.165863 \times 10^{-3}$	12	4.18
	v	$\ v - v_e\ _2 = 1.827253 \times 10^{-3}$	11	5.00
	w	$\ w - w_e\ _2 = 4.286092 \times 10^{-4}$	10	9.72
$128 \times 128 \times 128$ L2	ϕ	$\ \phi - \phi_e\ _2 = 6.683664 \times 10^{-3}$	10	3.63
	p	$\ p - p_e\ _2 = 4.900852 \times 10^{-3}$	8	3.31
	u	$\ u - u_e\ _2 = 3.738785 \times 10^{-4}$	16	3.12
	v	$\ v - v_e\ _2 = 4.286984 \times 10^{-4}$	15	4.26
	w	$\ w - w_e\ _2 = 6.591865 \times 10^{-5}$	13	6.50

Tabela 4.13: Razão de convergência para as equações do Modelo H em uma malha composta, com número de ciclos W (MW) no *multigrid*, condições de contorno periódicas e mobilidade e viscosidade constantes.

Verificação do esquema numérico: comparações com a literatura

Apresentamos neste último capítulo alguns testes que permitem a comparação com os resultados presentes na literatura. Com a equação de Cahn-Hilliard, simulamos a separação dos componentes de uma mistura bifásica (*spinodal decomposition*); com as equações do Modelo H, a deformação sofrida por uma gota esférica quando submetida a um escoamento cisalhante, assim como as instabilidades de Kelvin-Helmholtz.

As simulações foram executadas nas máquinas 1, 2 e 3 (Apêndice C) e os resultados visualizados no Tecplot 360 [106].

5.1 Equação de Cahn-Hilliard

5.1.1 Separação dos componentes de uma mistura bifásica

Usamos como condição inicial para o campo de fase ϕ uma distribuição randômica fornecida por

$$\phi(0, x, y, z) = \phi_m + \epsilon r(x, y, z), \quad (5.1)$$

onde $\phi_m = 0$ é a concentração constante da mistura uniforme, ϵ é a constante relacionada à espessura da interface de transição e $r(x, y, z) \in [-1, 1]$ com média igual a zero.

As equações (2.14)-(2.16) são resolvidas no domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, com

condições de contorno homogêneas de Neumann, ou seja,

$$\begin{aligned}\mathbf{n} \cdot \nabla \phi_1 &= 0 \Rightarrow \frac{\partial \phi_1}{\partial \mathbf{n}} = 0, \\ \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_2 &= 0 \Rightarrow \frac{\partial \phi_2}{\partial \mathbf{n}} = 0,\end{aligned}$$

onde $\mathbf{n}$ é o vetor unitário normal à fronteira do domínio de resolução.

O passo temporal empregado é aquele mencionado no Algoritmo 2, sendo $c = 10$, e as equações discretas (2.22)-(2.24) são integradas durante um tempo $t = 23$. Este tempo é suficiente para que ocorra a separação completa dos dois componentes da mistura.

Utilizamos uma malha composta $32 \times 32 \times 32$ L3 e duas células computacionais em cada uma das direções no primeiro nível virtual, sendo que a malha do nível LTOP coincide inicialmente com o domínio. Desta forma, começamos integrando as equações em uma malha $128 \times 128 \times 128$. Como a fase inicial da separação ($0 \leq t \leq 10\epsilon$) ocorre rapidamente, ativamos nessa fase o refinamento localizado a cada 2 passos no tempo. Após essa fase, a cada 4 passos. Usamos a estratégia (3.50) com $p = 0.99$ para marcar as células computacionais que serão submetidas ao AMR e definir assim as regiões refinadas.

Quanto às constantes presentes nas equações discretas (2.22)-(2.24), adotamos para elas os valores

$$\alpha = \beta = 1, \quad \tau = 2, \quad \tilde{M} = 1, \quad (5.2)$$

$$\gamma = 0 \rightarrow M = 1, \quad (5.3)$$

$$\epsilon^2 = 0.00095 \approx \left(\frac{4.0}{128} \right)^2. \quad (5.4)$$

De (5.3) temos que a mobilidade é constante.

A Figura 5.1 ilustra o comportamento da energia livre do sistema e do valor médio ϕ_m do campo de fase ϕ na execução da aplicação. Observando essa figura, constatamos que a energia livre decresce monotonicamente em direção a um valor mínimo e que ϕ_m é preservado pelo menos até a segunda casa decimal [4]. Isto comprova o bom comportamento do código computacional na execução do teste.

A Figura 5.2 mostra o tempo de CPU e o número de células computacionais requeridas a cada passo no tempo. Como iniciamos em uma malha uniforme, é possível perceber a

Figura 5.1: Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: (a) energia livre do sistema; (b) valor médio ϕ_m do campo de fase ϕ .

redução do custo computacional no decorrer do tempo, uma vez que

$$\frac{\text{tempo inicial de CPU}}{\text{tempo final de CPU}} \approx 10.12 \text{ e } \frac{\text{número inicial de células}}{\text{número final de células}} \approx 3.32.$$

Figura 5.2: Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: (a) tempo de CPU; (b) número de células computacionais.

As Figuras 5.3-5.7 ilustram algumas etapas da simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard.

Figura 5.3: Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t \approx 7.6 \times 10^{-3}$, (c) $t \approx 3.8 \times 10^{-2}$ e (d) $t \approx 5.3 \times 10^{-2}$.

Figura 5.4: Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 7.6 \times 10^{-2}$, (b) $t \approx 9.1 \times 10^{-2}$, (c) $t \approx 0.11$ e (d) $t \approx 0.16$.

Figura 5.5: Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 0.21$, (b) $t \approx 0.25$, (c) $t \approx 0.33$ e (d) $t \approx 0.46$.

Figura 5.6: Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 0.77$, (b) $t \approx 1.39$, (c) $t \approx 1.89$ e (d) $t \approx 2.58$.

Figura 5.7: Simulação da separação dos componentes de uma mistura bifásica empregando a equação de Cahn-Hilliard: isosuperfície (esquerda), estado da separação (centro) e refinamento local (direita) nos tempos (a) $t \approx 5.58$, (b) $t \approx 8.21$, (c) $t \approx 10.65$ e (d) $t \approx 23.00$.

5.2 Modelo H

5.2.1 Deformação da gota esférica sob cisalhamento

Usando as equações do Modelo H com viscosidade constante, simulamos agora a deformação sofrida por uma gota esférica submetida a um escoamento cisalhante. Escolhemos este teste porque o refinamento localizado da gota é um teste não trivial para o AMR e também porque a simulação numérica exige bastante do *multigrid* para as componentes da velocidade em (2.79) devido aos baixos números de Reynolds e de capilaridade.

A condição inicial para o campo de fase ϕ , que define a gota no instante $t = 0$, é dada por

$$\phi(0, x, y, z) = \tanh \left[\frac{3}{1.5H} (d - r) \right] = \tanh \left[\frac{2}{H} (d - r) \right], \quad (5.5)$$

sendo

$$d = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 + (z - z_c)^2} \quad (5.6)$$

a distância entre o ponto $P(x, y, z)$ do domínio

$$\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$$

e o centro $C(x_c, y_c, z_c)$ da esfera, r o raio da esfera e $H = \min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\}$, onde Δx , Δy e Δz são os passos espaciais nas direções x , y e z no nível LTOP.

Na condição inicial (5.5), $r = \frac{1}{4}$, $C = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ e ϕ varia de $\tanh(-3) \approx -0.995$ a $\tanh(3) \approx 0.995$ em uma faixa de três células computacionais do nível LTOP. Isto ocorre porque transformamos linearmente a função $\tanh$, representada na Figura 5.8, levando-a do intervalo $[-3, 3]$ para o intervalo $[r - 1.5H, r + 1.5H]$.

A condição inicial para o campo de velocidade é

$$\mathbf{u}_0 = (2z - 1, 0, 0). \quad (5.7)$$

Assim, estabelecemos um campo inicial $\mathbf{u}_0$ cisalhante, uma vez que $u = -1$ em $z = 0$ e $u = 1$ em $z = 1$.

As condições de contorno são periódicas nas direções x e y . Na direção z , adotamos condições homogêneas de Neumann para o campo de fase ϕ e a correção de pressão q e Dirichlet para a componente w da velocidade.

Figura 5.8: Gráfico da função $f(x) = \tanh(x)$.

Realizamos a simulação em uma malha composta $32 \times 32 \times 32$ L4 usando a própria esfera (5.5) para determinar a malha composta no instante $t = 0$, como mostra a Figura 5.9. O primeiro nível virtual é uma malha $2 \times 2 \times 2$. Acionamos o refinamento localizado a cada quatro passos no tempo e utilizamos a estratégia (3.50), com $p = 0.99$, para marcar as células computacionais submetidas ao AMR. Em relação ao passo temporal, empregamos a restrição (2.99), na qual $C_{CFL} = 1$.

Para as constantes e os adimensionais presentes nas equações discretas (2.77)-(2.84), atribuímos os valores

$$\alpha = \beta = 1, \quad \tau = 2, \quad \tilde{\lambda} = 1, \quad (5.8)$$

$$\gamma = 0 \rightarrow \lambda = 1, \quad (5.9)$$

$$\theta_{max} = 1 \rightarrow \theta = 1, \quad (5.10)$$

$$K^2 = \left(\frac{1.5}{256} \right)^2, \quad (5.11)$$

$$Pe = 10, \quad (5.12)$$

$$Re = 1. \quad (5.13)$$

De (5.9) e (5.10) temos, respectivamente, que a mobilidade e a viscosidade são constantes. De (5.11), que ξ é da ordem de 1.5 células computacionais do nível LTOP, uma

Figura 5.9: Configuração inicial da gota: (a) isosuperfície, (b) malhas do último nível físico, (c) corte transversal e oblíquo, (d)-(f) corte em $y = 0.5$ mostrando a região de transição e o refinamento localizado.

vez que

$$K = \frac{\xi}{L} \Rightarrow \xi = K \Rightarrow \xi = \frac{1.5}{256}. \quad (5.14)$$

Dessa maneira, a espessura da interface de equilíbrio, dada pela expressão (1.10), é de cerca de 6 células computacionais do nível LTOP. Quanto ao número de Cahn K em (5.11), assumimos para ele um valor segundo o que mostram estudos preliminares sobre a perda de massa (ou o murchamento da gota).

Figura 5.10: Eixos ℓ e s e ângulo de inclinação φ da gota deformada em $y = 0.5$.

Quando submetida a um campo de velocidade cisalhante, a gota esférica tende a assumir a forma de um elipsóide inclinado (Figura 5.10) com uma deformação que depende da viscosidade e da tensão superficial presente no número de capilaridade. Testamos cinco números de capilaridade distintos para verificar o ângulo φ de inclinação do eixo maior do elipsóide com a horizontal: $Ca = 0.001$, $Ca = 0.0015$, $Ca = 0.002$, $Ca = 0.0025$ e $Ca = 0.003$. A Tabela 5.1 relaciona os ângulos de inclinação e a deformação obtidos para esses números de capilaridade após o estado de equilíbrio, sendo ℓ o comprimento do eixo maior do elipsóide e s o comprimento do eixo menor.

Ca	1.0×10^{-3}	1.5×10^{-3}	2.0×10^{-3}	2.5×10^{-3}	3.0×10^{-3}
$D = (\ell - s) / (\ell + s)$	0.107	0.163	0.216	0.275	0.337
φ	45°	40°	35°	31°	30°

Tabela 5.1: Deformação D e ângulo φ aproximados obtidos para a gota esférica em um escoamento cisalhante com cinco diferentes números de capilaridade Ca e viscosidade constante.

Observando a Tabela 5.1, constatamos uma dependência quase linear entre a deformação D e o número de capilaridade Ca , como mostra a Figura 5.11. Quanto ao ângulo de inclinação, sabemos que se $Re \rightarrow 0$ e $Ca \rightarrow 0$, então $\varphi \rightarrow 45^\circ$ [85, 89]. Nossos resultados são compatíveis com a teoria, mesmo que tenhamos usado um número de

Reynolds um pouco maior.

Figura 5.11: Deformação da gota esférica em função do número de capilaridade para cinco valores tabelados.

Simulamos também a deformação que a gota esférica sofre quando é submetida a um escoamento cisalhante com viscosidade variável. Neste caso, a razão de viscosidade escolhida é dois (a viscosidade do fluido fora da gota é o dobro da viscosidade do fluido dentro dela). A Tabela 5.2 compara, para um número de capilaridade fixo, a deformação e o ângulo de inclinação quando a viscosidade é constante e variável.

Ca	Viscosidade θ	D	φ
1×10^{-3}	$\theta_{max} = 1 \rightarrow \theta = 1$	0.107	45°
1×10^{-3}	$\theta_{max} = 2 \rightarrow \theta = 0.5\phi + 1.5$	0.202	39°

Tabela 5.2: Deformação D e ângulo φ aproximados para um número de capilaridade fixo e viscosidade constante e variável.

As Figuras 5.12-5.15 mostram a gota no estado de equilíbrio, comparando-a com a geometria inicial, para os números de capilaridade da Tabela 5.1. A Figura 5.16 ilustra o comportamento da pressão e da velocidade para um número de capilaridade $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$. A Figura 5.17 mostra a deformação sofrida pela gota para um número de capilaridade $Ca = 5.0 \times 10^{-3}$ e um tempo inferior ao estado de equilíbrio. A Figura 5.18 ilustra a gota no estado de equilíbrio para viscosidade constante e variável.

Figura 5.12: Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) isosuperfície da configuração inicial; isosuperfície do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$.

Figura 5.13: Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) configuração inicial em $y = 0.5$; configuração do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$ em $y = 0.5$.

Figura 5.14: Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) níveis de refinamento da configuração inicial em $y = 0.5$; níveis de refinamento do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$ em $y = 0.5$.

Figura 5.15: Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$: (a) malha composta da configuração inicial em $y = 0.5$; malha composta do estado de equilíbrio para (b) $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, (c) $Ca = 1.5 \times 10^{-3}$, (d) $Ca = 2.0 \times 10^{-3}$, (e) $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$ e (f) $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$ em $y = 0.5$.

Figura 5.16: Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$, $Ca = 3.0 \times 10^{-3}$: corte em $y = 0.5$ para (a) pressão, (b) componente u da velocidade, (c) componente v da velocidade e (d) componente w da velocidade.

Figura 5.17: Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$, $Ca = 5.0 \times 10^{-3}$: (a) isosuperfície; (b) configuração em $y = 0.5$, (c) níveis de refinamento em $y = 0.5$ e (d) malha composta em $y = 0.5$.

Figura 5.18: Deformação de uma gota inicialmente esférica descrita por ϕ , $Pe = 10$, $Re = 1$, $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$: (a)-(c) viscosidade constante ($\theta_{max} = 1 \rightarrow \theta = 1$); (d)-(f) viscosidade variável ($\theta_{max} = 2 \rightarrow \theta = 0.5\phi + 1.5$).

5.2.2 Instabilidades de Kelvin-Helmholtz

Em um escoamento cisalhante podem surgir instabilidades do tipo descrito pela primeira vez por Kelvin [55] e Helmholtz [49]. As Figuras 5.19 e 5.20 ilustram a ocorrência dessas instabilidades na atmosfera dos planetas Terra e Saturno.

Figura 5.19: Instabilidades de Kelvin-Helmholtz visíveis em nuvens sobre o monte Duval na Austrália [105].

Figura 5.20: Instabilidades de Kelvin-Helmholtz formadas pela interação de duas camadas da atmosfera do planeta Saturno [105].

Empregamos as equações do Modelo H com viscosidade constante para simular computacionalmente essas instabilidades. Este teste exige muito do *multigrid* para a correção de pressão em (2.87) devido ao alto número de Reynolds e também possibilita que verifiquemos se há efeitos numéricos artificiais na terceira dimensão [28].

A condição inicial para o campo de fase ϕ é dada pela função

$$z^* = f(x) = 0.01 \sin(2\pi x) \quad (5.15)$$

no plano xz , a qual é transladada em $y \in [0, 1]$. Para cada z no domínio

$$\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [-1, 1],$$

calculamos a distância

$$d = z - z^* \quad (5.16)$$

e com ela

$$\phi(0, x, y, z) = \tanh\left(\frac{3d}{1.5H}\right) = \tanh\left(\frac{2d}{H}\right), \quad (5.17)$$

sendo $H = \min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\}$ e Δx , Δy e Δz os passos espaciais nas direções x , y e z no nível LTOP. Na função (5.17), ϕ varia de $\tanh(-3) \approx -0.995$ a $\tanh(3) \approx 0.995$ em uma faixa de apenas três células computacionais do nível LTOP.

Figura 5.21: Condição inicial para as componentes da velocidade na simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz.

A condição inicial para o campo de velocidade é

$$\mathbf{u}_0 = (\tanh(25d), 0, 0). \quad (5.18)$$

Como $u = -1$ em $z = -1$ e $u = 1$ em $z = 1$, temos um campo inicial $\mathbf{u}_0$ cisalhante. Essa condição inicial para a velocidade, juntamente com o valor adotado para o número de capilaridade, conduz ao enrolamento, característica das instabilidades de Kelvin-Helmholtz. A Figura 5.21 mostra o campo inicial de velocidade.

As condições de contorno são periódicas nas direções x e y . Na direção z , adotamos

condições homogêneas de Neumann para o campo de fase ϕ e a correção de pressão q e Dirichlet para a componente w da velocidade.

Executamos a simulação em uma malha composta $32 \times 32 \times 32$ L4 utilizando a própria “superfície” transladada (5.17) para determinar a malha composta no instante $t = 0$. O primeiro nível virtual é uma malha $2 \times 2 \times 4$. Ativamos o refinamento localizado a cada quatro passos no tempo e empregamos a estratégia (3.50), com $p = 0.99$, para marcar as células computacionais submetidas ao AMR. Quanto ao passo temporal, usamos a restrição (2.99), sendo $C_{CFL} = 1$.

Para as constantes e os adimensionais que integram as equações discretas (2.77)- (2.84), atribuímos os valores

$$\alpha = \beta = 1, \quad \tau = 2, \quad \tilde{\lambda} = 1, \quad (5.19)$$

$$\gamma = 0 \rightarrow \lambda = 1, \quad (5.20)$$

$$\theta_{max} = 1 \rightarrow \theta = 1, \quad (5.21)$$

$$K^2 = \left(\frac{1.5}{256} \right)^2, \quad (5.22)$$

$$Pe = 200, \quad (5.23)$$

$$Re = 5000, \quad (5.24)$$

$$Ca = 200. \quad (5.25)$$

De (5.20) e (5.21) temos, respectivamente, que a mobilidade e a viscosidade são constantes. De (5.22), que ξ é da ordem de 1.5 células computacionais do nível LTOP, o que implica em uma espessura para a interface de equilíbrio de aproximadamente 6 células computacionais do nível LTOP. O número de Péclet (5.23) foi escolhido a partir da relação $Pe = \frac{1}{K}$, onde K é o número de Cahn.

As Figuras 5.22-5.24 ilustram algumas etapas da simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz. A Figura 5.25 mostra a isosuperfície e a malha composta $32 \times 32 \times 32$ L4 em alguns instantes da simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz. A Figura 5.26 ilustra a comportamento da pressão e das componentes da velocidade no instante de tempo $t \approx 1.69$.

Figura 5.22: Instabilidades de Kelvin-Helmholtz definidas por ϕ , $Pe = 200$, $Re = 5000$, $Ca = 200$: simulação nos tempos (a) $t = 0$, (b) $t \approx 0.53$, (c) $t \approx 0.65$, (d) $t \approx 0.70$, (e) $t \approx 0.79$ e (f) $t \approx 0.87$.

Figura 5.23: Instabilidades de Kelvin-Helmholtz definidas por ϕ , $Pe = 200$, $Re = 5000$, $Ca = 200$: simulação nos tempos (a) $t \approx 0.97$, (b) $t \approx 1.08$, (c) $t \approx 1.22$, (d) $t \approx 1.31$, (e) $t \approx 1.34$ e (f) $t \approx 1.44$.

Figura 5.24: Instabilidades de Kelvin-Helmholtz definidas por ϕ , $Pe = 200$, $Re = 5000$, $Ca = 200$: simulação nos tempos (a) $t \approx 1.48$, (b) $t \approx 1.52$, (c) $t \approx 1.63$, (d) $t \approx 1.69$, (e) $t \approx 1.77$ e (f) $t \approx 1.83$.

Figura 5.25: Isosuperfície (esquerda) e malha composta $32 \times 32 \times 32$ L4 em $y = 0.5$ (direita) na simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz nos tempos (a) $t \approx 1.52$, (b) $t \approx 1.63$ e (c) $t \approx 1.69$.

Figura 5.26: Simulação das instabilidades de Kelvin-Helmholtz no tempo $t \approx 1.69$: (a) campo de pressão, (b) componente u da velocidade, (c) componente v da velocidade e (d) componente w da velocidade.

Conclusão

Apresentamos uma estratégia computacional para a simulação tridimensional completamente adaptativa de escoamentos bifásicos descritos por modelos de campo de fase conservativos, tais como o Modelo H. Essa estratégia permite que trabalhem com condições de contorno generalizadas (periódicas, de Dirichlet, de Neumann ou mistas) e passos espaciais diferenciados. Com ela simulamos a deformação de uma gota esférica submetida a um escoamento cisalhante e as instabilidades de Kelvin-Helmholtz, sendo que os resultados obtidos são compatíveis com aqueles disponíveis na literatura.

A metodologia numérica empregada combinou malhas refinadas localmente com uma discretização temporal semi-implícita de segunda ordem e técnicas *multinível-multigrid* lineares para a solução de sistemas, inclusive daquele proveniente da equação de campo de fase, a qual contém o termo biarmônico. A discretização proposta é isenta de restrições severas de estabilidade e é também menos onerosa do que os esquemas iterativos não lineares usados em discretizações completamente implícitas.

Contudo, nossa estratégia numérica pode ser aperfeiçoada em alguns aspectos. Nas técnicas *multinível-multigrid*, podemos substituir a média simples na restrição por um *full weighting* [21], a interpolação trilinear no prolongamento por uma interpolação tricúbica [62] e o ciclo V ou o ciclo W adaptado pelo *full multigrid* [21]. Ou melhor, podemos combinar essas três técnicas em uma só, como ilustra a Figura 1. Nessa estratégia, a repetição dos ciclos V, que também poderia ocorrer com ciclos W, é controlada por um critério de parada do tipo

$$\text{resíduo} \leq \frac{1}{2}H^2,$$

Figura 1: *Full multigrid* para 4 níveis com repetição dos ciclos V.

onde $H = \min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\}$ é o passo espacial local. Ainda em relação ao *multigrid*, poderíamos trocar a relaxação de Gauss-Seidel por uma relaxação por linha, o que implicaria na solução de um sistema tridiagonal. Essa forma de relaxação permitiria uma variação maior da densidade de massa na equação de Poisson (2.48) para a correção de pressão e também melhoraria o desempenho do código computacional perante a anisotropia introduzida por $\Delta x \neq \Delta y \neq \Delta z$.

Dando continuidade a este trabalho, pretendemos inicialmente simular com as equações do Modelo H a coalescência e a ruptura de gotas. Em seguida, planejamos propor uma estratégia adaptativa para simular a região de interação entre fluidos imiscíveis por intermédio de dois modelos distintos, os quais requerem densidade de massa e mobilidade variáveis, diferentemente do que fizemos nas simulações com as equações do Modelo H. Um dos modelos é o *Modelo de Miscibilidade Parcial* (PMM) proposto por Lowengrub e Truskinovsky [64]. Nesse modelo, o campo de fase é baseado na concentração das espécies envolvidas e o sistema de equações é formado pelas equações de Navier-Stokes, pela equação da continuidade modificada e por uma equação similar à equação de Cahn-Hilliard, na qual a mobilidade está ausente. Lowengrub e Truskinovsky mostraram que não somente a tensão superficial deve ser considerada nas equações de conservação de quantidade de movimento, mas também a condição de incompressibilidade deve ser alterada para incorporar a variação de densidade de massa (quase-incompressibilidade). No outro modelo, proposto por Boyer [16], o escoamento é incompressível e na equação do campo de fase a mobilidade e a densidade de massa são variáveis. Isto exige uma revisão

da estratégia *multigrid* que usamos para solucionar a equação com o termo biarmônico, como também do comportamento da equação do campo de fase para mobilidade variável.

Interface de transição

Apresentamos neste apêndice o cálculo de uma das soluções de

$$\mu(\phi) = 0$$

dada por

$$\phi_0(z) = \phi_+ \tanh\left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi}z\right). \quad (\text{A.1})$$

Esta solução permite que calculemos a espessura da interface de transição (1.10).

1. Solução (A.1)

$$\begin{aligned} \mu(\phi_0) &= f'(\phi_0) - \epsilon^2 \nabla^2 \phi_0 = 0 \\ \epsilon^2 \nabla^2 \phi_0 &= f'(\phi_0) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Como a solução (A.1) é unidimensional, na direção z , reescrevemos (A.2) na forma

$$\epsilon^2 \frac{d^2 \phi_0}{dz^2} = f'(\phi_0). \quad (\text{A.3})$$

Multiplicando (A.3) por $\frac{d\phi_0}{dz}$, chegamos a

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \frac{d\phi_0}{dz} \frac{d^2 \phi_0}{dz^2} &= \frac{d\phi_0}{dz} f'(\phi_0) \\ \frac{1}{2} \epsilon^2 \frac{d}{dz} \left(\frac{d\phi_0}{dz} \right)^2 &= \frac{d}{dz} f(\phi_0) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2}\epsilon^2 \left(\frac{d\phi_0}{dz} \right)^2 = f(\phi_0). \quad (\text{A.4})$$

De (A.4), obtemos as relações

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \left(\frac{d\phi_0}{dz} \right)^2 &= 2f(\phi_0) \quad e \\ dz &= \frac{\epsilon d\phi_0}{\sqrt{2f(\phi_0)}}, \end{aligned}$$

empregadas no cálculo da tensão superficial (1.14).

Substituindo em (A.4) a densidade de energia típica dada por (1.4), temos que

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\epsilon^2 \left(\frac{d\phi_0}{dz} \right)^2 &= \frac{\alpha}{4} \left(\frac{\beta}{\alpha} - \phi_0^2 \right)^2 \\ \frac{d\phi_0}{dz} &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\epsilon^2}} \left(\frac{\beta}{\alpha} - \phi_0^2 \right). \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Utilizando as igualdades

$$\begin{aligned} \phi_0 &= \phi_+ \bar{\phi}_0, \\ \xi &= \sqrt{\frac{\epsilon^2}{\beta}} \quad e \\ \phi_+ &= \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}}, \end{aligned}$$

podemos reescrever (A.5) como

$$\begin{aligned} \phi_+ \frac{d\bar{\phi}_0}{dz} &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\epsilon^2}} \left(\frac{\beta}{\alpha} - \bar{\phi}_0^2 \phi_+^2 \right) \\ \phi_+ \frac{d\bar{\phi}_0}{dz} &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\epsilon^2}} \phi_+^2 \left(1 - \bar{\phi}_0^2 \right) \\ \frac{d\bar{\phi}_0}{dz} &= \sqrt{\frac{\beta}{2\epsilon^2}} \left(1 - \bar{\phi}_0^2 \right) \\ \frac{d\bar{\phi}_0}{1 - \bar{\phi}_0^2} &= \frac{\sqrt{2}}{2\xi} dz \\ \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 + \bar{\phi}_0}{1 - \bar{\phi}_0} \right) &= \frac{\sqrt{2}}{2\xi} z \\ \tanh^{-1} \bar{\phi}_0 &= \frac{\sqrt{2}}{2\xi} z \end{aligned}$$

$$\bar{\phi}_0 = \tanh \left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi} z \right). \quad (\text{A.6})$$

Uma vez que $\phi_0 = \phi_+ \bar{\phi}_0 \rightarrow \bar{\phi}_0 = \frac{\phi_0}{\phi_+}$, verificamos que (A.6) é equivalente a (A.1), ou seja,

$$\phi_0(z) = \phi_+ \tanh \left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi} z \right).$$

2. Limites da solução (A.1)

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \phi_0(z) = \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \phi_+ \tanh \left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi} z \right) = \phi_+ \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \tanh \left(\frac{\sqrt{2}}{2\xi} z \right) \quad (\text{A.7})$$

Considerando

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{2}}{2\xi}$$

e lembrando que

$$\tanh(\varepsilon z) = \frac{e^{\varepsilon z} - e^{-\varepsilon z}}{e^{\varepsilon z} + e^{-\varepsilon z}},$$

os limites em (A.7) são dados por

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \phi_0(z) = \phi_+ \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{\frac{e^{\varepsilon z}}{e^{\varepsilon z}} - \frac{e^{-\varepsilon z}}{e^{\varepsilon z}}}{\frac{e^{\varepsilon z}}{e^{\varepsilon z}} + \frac{e^{-\varepsilon z}}{e^{\varepsilon z}}} = \phi_+ \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{1 - \frac{1}{e^{2\varepsilon z}}}{1 + \frac{1}{e^{2\varepsilon z}}} = \phi_+$$

e

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \phi_0(z) = \phi_+ \lim_{z \rightarrow -\infty} \frac{\frac{e^{\varepsilon z}}{e^{-\varepsilon z}} - \frac{e^{-\varepsilon z}}{e^{-\varepsilon z}}}{\frac{e^{\varepsilon z}}{e^{-\varepsilon z}} + \frac{e^{-\varepsilon z}}{e^{-\varepsilon z}}} = \phi_+ \lim_{z \rightarrow -\infty} \frac{e^{2\varepsilon z} - 1}{e^{2\varepsilon z} + 1} = -\phi_+ = \phi_-.$$

Alguns exemplos da estratégia semi-implícita

Dispomos aqui alguns exemplos que corroboram o que é afirmado sobre a estratégia semi-implícita nas secções 2.1 e 2.2 do Capítulo 2.

Consideremos a equação difusiva com um termo forçante

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\chi \nabla u) + F, \quad (\text{B.1})$$

para a qual adotamos a solução exata dada por

$$u_{exata} = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) e^{-t}, \quad (\text{B.2})$$

$$\chi = 1.0, \quad (\text{B.3})$$

$$F = \frac{\partial u_{exata}}{\partial t} - \nabla \cdot (\chi \nabla u_{exata}) = (8\pi^2 - 1) \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) e^{-t}. \quad (\text{B.4})$$

A equação (B.1) é reescrita como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \nabla^2 u + f(u) + F, \quad (\text{B.5})$$

sendo

$$f(u) = \nabla \cdot (\chi \nabla u) - a \nabla^2 u = (1 - a) \nabla^2 u. \quad (\text{B.6})$$

A equação (B.5) é discretizada no domínio $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ com diferenças finitas e condições de contorno periódicas, e solucionada inicialmente pelo Método de Euler Implícito. Os termos $a \nabla^2 u$ e F são implicitados, enquanto o termo $f(u)$ é explicitado.

As tabelas B.1 e B.2 mostram os erros absolutos cometidos durante o tempo de integração $t \in [0, 1]$ para $a = 0.5$ e $a = 1.0$.

TS	Malhas	$\ u - u_{exata}\ _2$	MV	R
64	64X64	3.168063×10^{-3}	6	
128	128X128	1.511263×10^{-3}	7	2.10
256	256X256	7.371988×10^{-4}	8	2.05

Tabela B.1: Equação difusiva solucionada com o Método de Euler Implícito e $a = 0.5$ em uma malha uniforme bidimensional com condições de contorno periódicas, número de ciclos V (MV) no *multigrid* e TS passos no tempo.

TS	Malhas	$\ u - u_{exata}\ _2$	MV	R
64	64X64	6.120414×10^{-3}	6	
128	128X128	2.977628×10^{-3}	7	2.06
256	256X256	1.467723×10^{-3}	8	2.03

Tabela B.2: Equação difusiva solucionada com o Método de Euler Implícito e $a = 1.0$ em uma malha uniforme bidimensional com condições de contorno periódicas, número de ciclos V (MV) no *multigrid* e TS passos no tempo.

Observamos nas Tabelas B.1 e B.2 que $\log_2 R \rightarrow 1$, o que comprova a ordem do Método de Euler Implícito.

Substituindo o Método de Euler Implícito pelo Método de Gear, constatamos que a estratégia semi-implícita diverge para $a = 0.5$. Já para $a = 1.0$, obtemos convergência e comprovamos a ordem dois do método, como ilustra a tabela B.3.

TS	Malhas	$\ u - u_{exata}\ _2$	MV	R
64	64X64	2.072886×10^{-4}	6	
128	128X128	5.212381×10^{-5}	7	3.98
256	256X256	1.310408×10^{-5}	8	3.98

Tabela B.3: Equação difusiva solucionada com o Método de Gear e $a = 1.0$ em uma malha uniforme bidimensional com condições de contorno periódicas, número de ciclos V (MV) no *multigrid* e TS passos no tempo.

Máquinas usadas na execução do código computacional

Listamos a seguir as máquinas que foram usadas na execução e validação do código computacional.

1. **Máquina 1**, uma *Power Mac G5* (modelo M9591LL/A) com processador dual de 2.3GHz, 4GB de memória RAM, 250GB de disco rígido, aritmética de 64 bits, compilador *absoft* para Fortran 90 e sistema operacional *Linux* (*yellow dog linux* - ydl). Esta máquina está localizada no Departamento de Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.
2. **Máquina 2**, uma *Power Mac G5* (modelo M9592LL/A) com processador quad (duplo dual) de 2.5GHz, 16GB de memória RAM, 250GB de disco rígido, aritmética de 64 bits, compilador *absoft* para Fortran 90 e sistema operacional *Linux* (ydl). Esta máquina está localizada no Departamento de Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.
3. **Máquina 3**, uma *Power Mac G5* com processador dual de 2.5GHz, 8GB de memória RAM, 100GB de disco rígido, aritmética de 64 bits, compilador *absoft* para Fortran 90 e sistema operacional *Linux* (ydl). Esta máquina está localizada no Departamento de Matemática da Universidade da Califórnia em Santa Barbara.
4. **Máquina 4**, *Cluster Beowulf Alcatéia*, constituído de um nó servidor e 32 nós clientes conectados via Ethernet, baseados em CPUs Intel Dual Xeon de 2.8GHz e

2.5GB de memória RAM, equipado com discos SCSI com 72GB para armazenamento dos usuários e aritmética de 32 bits. O compilador para Fortran 90 é Intel e o *cluster* está localizado no Laboratório de Computação Científica Avançada (LCCA) do Centro de Computação Eletrônica (CCE) da Universidade de São Paulo.

Estimativas para a memória RAM

Estimamos na Tabela D.1 a memória RAM necessária ao armazenamento de NV variáveis em dupla precisão em aritmética de 64 bits. Para essas estimativas usamos a expressão

$$\text{NCELL} \times \text{NV} \times \text{NB} \div 2^{30}, \quad (\text{D.1})$$

sendo que NCELL é o número de células computacionais da malha uniforme e de todas as malhas abaixo dela, até uma malha $9 \times 9 \times 9$, e NB é o número de bytes que uma variável em dupla precisão ocupa em aritmética de 64 bits ($128/8 = 16$). A divisão por 2^{30} ou 1024^3 converte bytes em gigabytes.

Ao número de células da malha uniforme em cada direção acrescentamos 7 células, as quais correspondem à nossa área de trabalho. Assim, por exemplo, ao invés de uma malha $32 \times 32 \times 32$, temos uma malha $39 \times 39 \times 39$. Nessa área de trabalho guardamos os valores para as células fantasmas e as condições de contorno. As malhas abaixo da malha uniforme são necessárias à aplicação das técnicas *multinível-multigrid* que empregamos para resolver sistemas lineares.

Equações	NV	Malha uniforme	NCELL	RAM (GB)
Cahn-Hilliard	12	$39 \times 39 \times 39$	76921	1.38×10^{-2}
		$71 \times 71 \times 71$	434832	7.78×10^{-2}
		$135 \times 135 \times 135$	2895207	5.18×10^{-1}
		$263 \times 263 \times 263$	21086654	3.77
		$519 \times 519 \times 519$	160885013	2.88×10
		$1031 \times 1031 \times 1031$	1256797804	2.25×10^2
Navier-Stokes	21	$39 \times 39 \times 39$	76921	2.41×10^{-2}
		$71 \times 71 \times 71$	434832	1.36×10^{-1}
		$135 \times 135 \times 135$	2895207	9.06×10^{-1}
		$263 \times 263 \times 263$	21086654	6.60
		$519 \times 519 \times 519$	160885013	5.04×10
		$1031 \times 1031 \times 1031$	1256797804	3.94×10^2
Modelo H	28	$39 \times 39 \times 39$	76921	3.21×10^{-2}
		$71 \times 71 \times 71$	434832	1.82×10^{-1}
		$135 \times 135 \times 135$	2895207	1.21
		$263 \times 263 \times 263$	21086654	8.80
		$519 \times 519 \times 519$	160885013	6.72×10
		$1031 \times 1031 \times 1031$	1256797804	5.25×10^2

Tabela D.1: Estimativa de memória RAM necessária à alocação das NV variáveis do modelo matemático: Cahn-Hilliard, Navier-Stokes e Modelo H.

Estrutura de dados

No desenvolvimento da parte computacional, optamos pela linguagem Fortran 90 [36, 73] e estruturamos o código usando módulos e tipos derivados (cerca de 108 mil linhas).

Os módulos conferem organização e nosso código computacional conta com 40 deles na sua estrutura. Cada um desses módulos é responsável pela execução de uma parte específica do trabalho, como por exemplo a criação dos níveis físicos e daqueles empregados pelo *multigrid*.

Os tipos derivados permitem acessar os dados armazenados em uma lista ligada. Temos um tipo derivado para acessar os dados de todas as malhas que compõem um nível e outro que permite o acesso a cada um dos níveis, de 1 a LTOP. A Figura E.1 ilustra esquematicamente os dados armazenados em cada nível.

Na Figura E.1, HX, HY e HZ são respectivamente o passo espacial nas direções x, y e z, armazenados na cabeça da lista de cada nível, isto porque esses dados são válidos para todas as malhas que compõem o nível.

Armazenamos 13 informações de cada uma das malhas que compõem os níveis. IGX, IGY e IGZ são os índices globais da célula computacional do canto inferior esquerdo de cada uma das malhas, e NX, NY e NZ o número de células computacionais nas direções x, y e z respectivamente. Com essas 6 informações somos capazes de reconstruir as malhas que configuram cada um dos níveis. IUG, a sétima informação da lista ligada, indica a posição em um vetor onde começam os valores de uma determinada variável calculada em todas as malhas do nível 1 a LTOP. Saber onde começam os valores da variável

Figura E.1: Esquema da estrutura de dados empregada no código computacional: NVL é o número de níveis empregados apenas pelo *multigrid* e NPL é o número de níveis físicos.

para cada uma das malhas é necessário, uma vez que as 19 variáveis globais do modelo matemático descrito no Capítulo 1, calculadas no centro ou no centro das faces das células computacionais de todas as malhas de todos os níveis, são armazenadas cada uma em um vetor. Finalmente, BCW, BCE, BCN, BCS, BCB e BCT informam se as faces oeste, leste, sul, norte, inferior e superior respectivamente, de cada uma das malhas, tocam ou não a fronteira do domínio Ω . Se tocam, armazenamos o valor 1; se não tocam, guardamos o valor 0. Essas informações são relevantes à transferência de condições de contorno não periódicas do domínio à malha composta. Para os níveis abaixo de LBOT temos sempre que

$$BCW = BCE = BCS = BCN = BCB = BCT = 1.$$

As variáveis do modelo matemático discretizado, globais ou não, são sempre alocadas

dinamicamente. Dimensionamos cada malha tridimensional por

$$(NX + 1 + 2NBC) (NY + 1 + 2NBC) (NZ + 1 + 2NBC), \quad (E.1)$$

sendo que NBC é o número de células da área de trabalho na qual guardamos os valores de NGC células fantasmas ($NGC < NBC$) e as condições de contorno, entre outros. O número 1 acrescentado a cada fator do produto (E.1) garante espaço suficiente quando a variável é calculada no centro de uma das faces da célula computacional. Somando-se o produto (E.1) das malhas do nível 1 a LTOP obtemos o número total de células computacionais NCELL. Este número é então empregado para alocar as variáveis globais.

Ilustramos a seguir a estrutura descrita na Figura E.1. O exemplo refere-se a uma lista ligada para NVL=6 e NPL=2 (malha $128 \times 128 \times 128$ L2), o primeiro nível do *multigrid* formado por uma malha $2 \times 2 \times 2$ e os níveis LBOT e LTOP dados pela malha composta ilustrada na Figura 4.1. O domínio no qual as variáveis são calculadas é $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$. Podemos observar que os níveis para o *multigrid* são criados de baixo para cima (das malhas mais grossas para as mais finas), enquanto os níveis físicos são gerados de cima para baixo (das malhas mais finas para as mais grossas). Os dados são acessados varrendo-se a lista ligada através de um laço que percorre as malhas de cada nível dentro de um laço que varre os níveis.

```

NCELL = 3465621
3.9062500000000000E-003  3.9062500000000000E-003  3.9062500000000000E-003
33  1  97  64  64  32  2895208  0  0  1  0  0  0
  1  1  1  32  64  128  3091807  1  0  1  0  1  0
7.8125000000000000E-003  7.8125000000000000E-003  7.8125000000000000E-003
  1  1  1  128  128  128  434833  1  1  1  1  1  1
1.5625000000000000E-002  1.5625000000000000E-002  1.5625000000000000E-002
  1  1  1  64  64  64  76922  1  1  1  1  1  1
3.1250000000000000E-002  3.1250000000000000E-002  3.1250000000000000E-002
  1  1  1  32  32  32  17603  1  1  1  1  1  1
6.2500000000000000E-002  6.2500000000000000E-002  6.2500000000000000E-002
  1  1  1  16  16  16  5436  1  1  1  1  1  1
0.1250000000000000  0.1250000000000000  0.1250000000000000
  1  1  1  8  8  8  2061  1  1  1  1  1  1

```

0.2500000000000000	0.2500000000000000	0.2500000000000000
1	1	1
4	4	4
730	1	1
1	1	1
1	1	1
1	1	1
0.5000000000000000	0.5000000000000000	0.5000000000000000
1	1	1
2	2	2
1	1	1
1	1	1
1	1	1
1	1	1

Referências Bibliográficas

- [1] ALTAS, I.; DYM, J.; GUPTA, M.M.; MANOHAR, R.P. Multigrid solution of automatically generated high-order discretizations for the biharmonic equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 19, n. 5, p. 1575-1585, 1998.
- [2] ALTAS, I.; ERHEL, J.; GUPTA, M.M. High accuracy solution of three-dimensional biharmonic equations. *Numerical Algorithms*, v. 29, p. 1-19, 2002.
- [3] ANDERSON, D.M.; McFADDEN, G.B.; WHEELER, A.A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 30, p. 139, 1998.
- [4] BADALASSI, V.E.; CENICEROS, H.D.; BANERJEE, S. Computation of multiphase systems with phase field models. *Journal of Computational Physics*, v. 190, p. 371-397, 2003.
- [5] BADALASSI, V.E.; CENICEROS, H.D.; BANERJEE, S. Gravitational effects on structural development in quenched complex fluids. *Ann. NY. Acad. Sci.*, v. 1027, p. 371-382, 2004.
- [6] BAROSAN, I.; ANDERSON, P.D.; MEIJER, H.E.H. Application of mortar elements to diffuse-interface methods. *Computers & Fluids*, v 35, p. 1384-1399, 2006.
- [7] BELL, J.; BERGER, M.J.; SALTZMAN, J.; WELCOME, M. Three-dimensional adaptive mesh refinement for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 15, n. 1, p. 127-138, 1994.

- [8] BELL, J.B; COLLELA, P.; GLAZ, H.M. A second order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 85, p. 257-283, 1989.
- [9] BERGER, M.J.; OLIGER, J. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, v. 53, p. 484-512, 1984.
- [10] BERGER, M.J.; JAMESON, A. Automatic adaptive grid refinement for the Euler equations. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, v. 23, n. 4, p. 561-568, 1985.
- [11] BERGER, M.J. Data structures for adaptive grid generation. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, v. 7, n. 3, p. 904-916, 1986.
- [12] BERGER, M.J. On conservation at grid interfaces. *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 24, n. 5, p. 967-984, 1987.
- [13] BERGER, M.J. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, v. 82, p. 64-84, 1989.
- [14] BERGER, M.J.; RIGOUTSOS, I. An algorithm for point clustering and grid generation. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, v. 21, n. 5, p. 1278-1286, 1991.
- [15] BERGER, M.J.; Le VEQUE, R.J. Adaptive mesh refinement using wave-propagation algorithms for hyperbolic systems. *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 35, n. 6, p. 2298-2316, 1998.
- [16] BOYER, F. A theoretical and numerical model for the study of incompressible mixture flows. *Computers & Fluids*, v. 31, n. 1, p. 41-68, 2002.
- [17] BOYER, F.; CHUPIN, L.; FABRIE, P. Numerical study of viscoelastic mixtures through a Cahn-Hilliard flow model. *Euro J. Mech. B/Fluids*, v. 23, p. 759-780, 2004.
- [18] BRACKBILL, J.U.; KOTHE, D.B.; ZEMACH, C. A continuum model for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, v. 100, p. 335, 1991.

- [19] BRAY, A.J. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, v. 43, n. 3, p. 357-459, 1994.
- [20] BRAY, A.J. Coarsening dynamics of phase-separation systems. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, v. 361 A, p. 781-792, 2003.
- [21] BRIGGS, W.L. *A multigrid tutorial*. Philadelphia : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987.
- [22] BROWN, D.L; CORTEZ, R.; MINION, M.L. Accurate projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 168, n. 2, p. 464-499, 2001.
- [23] BURDEN, R.L.; FAIRES, J.D. *Numerical analysis*. 6th ed. Pacific Grove : Brooks/Cole, 1997.
- [24] CAHN, J.W.; HILLIARD, J.E. Free energy of a nonuniform system - I. Interfacial free energy. *The Journal of Chemical Physics*, v. 28, n. 2, p. 258-267, 1958.
- [25] CAHN, J.W.; HILLIARD, J.E. Free energy of a nonuniform system - III. Nucleation in two-component incompressible fluid. *The Journal of Chemical Physics*, v. 31, n. 3, p. 688-699, 1959.
- [26] CENICEROS, H.D.; NOS, R.L.; ROMA, A.M. *Solução de equações diferenciais parciais elípticas por técnicas multinível-multigrid em malhas tridimensionais blocos-estruturadas com refinamento localizado*. XXV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, São Paulo, 2005.
- [27] CENICEROS, H.D.; ROMA, A.M. A multi-phase flow method with a fast, geometry-based fluid indicator. *Journal of Computational Physics*, v. 205, p. 391-400, 2005.
- [28] CENICEROS, H.D.; ROMA, A.M. Study of the long-time dynamics of a viscous vortex sheet with a fully adaptive nonstiff method. *Physics of Fluids*, v. 16, n. 12, p. 4285-4318, 2004.
- [29] CENICEROS, H.D.; ROMA, A.M. A nonstiff, adaptive mesh refinement-based method for the Cahn-Hilliard equation. A ser publicado no *Journal of Computational Physics*.

- [30] CENICEROS, H.D. A semi-implicit moving mesh method for the focusing Schrödinger equation. *Commun. Pure Appl. Anal.*, v. 1, p.1, 2002.
- [31] CHANG, Y.C.; HOU, T.Y.; MERRIMAN, B.; OSHER, S. A level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *J. Comput. Phys.*, v. 124, p. 449-464, 1996.
- [32] CHELLA, R.; VIÑALS, J. Mixing of a two-phase fluid by a cavity flow. *Physical Review E*, v. 53, n. 4, p. 3832-3840, 1996.
- [33] CHORIN, A.J. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of Computation*, v. 22, n. 104, p. 745-762, 1968.
- [34] CHORIN, A.J.; MARSDEN, J.E. *A mathematical introduction to fluid mechanics*. 3rd ed. New York : Springer-Verlag, 1993.
- [35] DOUGLAS, J.Jr.; DUPONT, T. Alternating-direction Galerkin methods on rectangles. *Numerical Solution of Partial Differential Equations-II*, n. 4, p. 133-213, 1971.
- [36] ELLIS, T.M.R. PHILIPS, I.R.; LAHEY, T.M. *Fortran 90 programming*. Harlow : Addison-Wesley, 1994.
- [37] FORTUNA, A.O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos - Conceitos básicos e aplicações*. São Paulo : Editora da Universidade de São Paulo, 2000.
- [38] GARCKE, H.; RUMPF, M.; WEIKARD, U. The Cahn-Hilliard equation with elasticity: finite element approximation and qualitative studies. *Interfaces and Free Boundaries*, v. 3, p. 101-118, 2001.
- [39] GEAR, C.W. The numerical integration of ordinary differential equations. *Math. Comp.*, v. 21, n. 2, p. 146-156, 1967.
- [40] GEAR, C.W. The automatic integration of stiff ordinary differential equations. *Information Processing*, v. 68, p. 187-193, 1969.
- [41] GEAR, C.W. The automatic integration of ordinary differential equations. *Communications of the ACM*, v. 14, n. 3, p. 176-179, 1971.

- [42] GIBBS, J.W. On the equilibrium of heterogeneous substances. *Trans. Conn. Acad.*, v. 3, p. 108-248, 1876. Reimpresso em *The Scientific Papers of J. Willard Gibbs*. London : Longmans, 1906.
- [43] GLIMM, J.; GROVE, J.; LI, X.L.; SHYUE, K.M.; ZENG, Y.; ZHANG, Q. Three-dimensional front tracking. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 19, n. 3, p. 703-727, 1998.
- [44] GLIMM, J.; GROVE, J.; LI, X.L.; TAN, D.C. Robust computational algorithms for dynamic interface tracking in three dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 21, n. 6, p. 2240-2256, 2000.
- [45] GLIMM, J.; GROVE, J.; LI, X.L.; OH, W.; SHARP, D.H. A critical analysis of Rayleigh-Taylor growth rates. *J. Comput. Phys.*, v. 169, p. 652-677, 2001.
- [46] GOTTLIEB, D.; ORSZAG, S.A. Numerical analysis of spectral methods. *Regional Conference Series in Applied Mathematics*, v. 26.
- [47] GURTIN, M.E.; POLIGNONE, D.; VIÑALS, J. Two-phase binary fluids and immiscible fluids described by an order parameter. *Math. Models Meth. Appl. Sci.*, v. 6, n. 6, p. 815, 1996.
- [48] HARLOW, F.H.; WELCH, J.E. Numerical calculation of time-dependent viscous of incompressible flow of fluid with free surface. *Physics Fluids*, v. 8, p. 2182-2189, 1965.
- [49] von HELMHOLTZ, H.L.F. On the discontinuous movements of fluids. *Monthly Reports of the Royal Prussian Academy of Philosophy in Berlin*, v. 23, p. 215 ff, 1868.
- [50] HOHENBERG, P.C.; HALPERIN, B.I. Theory of dynamic critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, v. 49, n. 3, p. 435, 1977.
- [51] HOU, T.Y.; LOWENGRUB, J.S.; SHELLEY, M.J. Boundary integral methods for multicomponent fluids and multiphase materials. *J. Comput. Phys.*, v. 169, p. 302-362, 2001.
- [52] JACQMIN, D. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *J. Comput. Phys.*, v. 155, p. 96-127, 1999.
- [53] JOHN, F. *Partial differential equations*. 4th ed. New York : Springer-Verlag, 1982.

- [54] KANG, M.; FEDKIW, R.; LIU, X.D. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *J. Sci. Computing*, v. 15, p. 323-360, 2000.
- [55] KELVIN, W.T. Hydrokinetic solutions and observations. *Philosophical Magazine*, v. 42, p. 362-377, 1871.
- [56] KIM, J.; KANG, K.; LOWENGRUB, J.S. Conservative multigrid methods for Cahn-Hilliard fluids. *Journal of Computational Physics*, v. 193, p. 511-543, 2004.
- [57] KIM, J.; KANG, K.; LOWENGRUB, J.S. Conservative multigrid methods for ternary Cahn-Hilliard systems. *Comm. Math. Sci.*, v. 2, p. 53-77, 2004.
- [58] KIM, J.; MOIN, P. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, v. 59, p. 308-323, 1985.
- [59] LANGER, J.S.; BARON, M.; MILLER, H. New computational method in theory of spinodal decomposition. *Phys. Rev. A*, v. 11, n. 4, p. 1417, 1975.
- [60] LEE, H.; LOWENGRUB, J.S. Modeling pinchoff and reconnection in a Hele-Shaw cell. I. The models and their calibration. *Physics of Fluids*, v. 14, n. 2, p. 492-513, 2002.
- [61] LEE, H.; LOWENGRUB, J.S. Modeling pinchoff and reconnection in a Hele-Shaw cell. II. Analysis and simulation in the nonlinear regime. *Physics of Fluids*, v. 14, n. 2, p. 514-545, 2002.
- [62] LEKIEN, F.; CHAD, C.; MARSDEN, J. *Tricubic engine - Technical notes and full matrix*. California Institute of Technology, 2004.
- [63] Le VEQUE, R.J.; LANGSETH, J.O.; BERGER, M.J.; McQUEEN, D.; CALHOUN, D.; BLOSSEY, P.; MITRAN, S. *Clawpack version 4.2 user's guide*. University of Washington, 2003. <http://www.amath.washington.edu/~claw/>
- [64] LOWENGRUB, J.S.; TRUSKINOVSKY, L. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions. *Proc. Royal Society London*, v. 454 A, p. 2617-2654, 1998.
- [65] MAXWELL, J.C. *Capillary action*. Encyclopaedia Britannica, 9th ed., 1876. Reimpresso em *The Scientific Papers of James Clerk Maxwell*. New York : Dover, 1951.

- [66] MCCORMICK, S.F. *Multigrid methods*. Frontiers in Applied Mathematics, v. 3. Philadelphia : SIAM Books, 1987.
- [67] NOS, R.L. *Solução da equação de Poisson pelo método multigrid*. Notas sobre as atividades iniciais do curso de doutoramento. Universidade de São Paulo, 2004.
- [68] NOS, R.L. *Variação temporal da elasticidade no método da fronteira imersa*. Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2001.
- [69] PESKIN, C.S. Numerical analysis of blood flow in the heart. *J. Comput. Phys.*, v. 25, p. 220-252, 1977.
- [70] PEYRET, R.; TAYLOR, T.D. *Computational methods for fluid flow*. New York : Springer-Verlag, 1983.
- [71] POISSON, S.D. *Nouvelle Théorie de l'Action Capillaire*. Paris : Bachelier, 1831.
- [72] PRESS, W.; TEUKOLSKY, S.A.; VETTERLING, W.T.; FLANERRY, B.P. *Numerical recipes in fortran: the art of scientific computing*. 2nd ed. v. 1. Cambridge : Cambridge University Press, 1992.
- [73] PRESS, W.; TEUKOLSKY, S.A.; VETTERLING, W.T.; FLANERRY, B.P.; METCALF, M. *Numerical recipes in fortran 90: the art of parallel scientific computing*. 2nd ed. v. 2. Cambridge : Cambridge University Press, 1996.
- [74] POPINET, S.; ZALESKI, S. A front-tracking algorithm for accurate representation of surface tension. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, v. 30, p. 775-793, 1999.
- [75] POZRIKIDIS, C. *Boundary integral and singularity methods for linearized viscous flow*. Cambridge : Cambridge Univ. Press, 1992.
- [76] PROVATAS, N.; GOLDENFELD, N.; DANTZIG, J. Adaptive mesh refinement computation of solidification microstructures using dynamic data structures. *Journal of Computational Physics*, v. 148, p. 265-290, 1999.
- [77] PUCKETT, E.G.; ALMGREN, A.S.; BELL, J.B.; MARCUS, D.L.; RIDER, W.J. A high order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. *J. Comput. Phys.*, v. 100, p. 269-282, 1997.

- [78] RALLISON, J.M. The deformation of small viscous drops and bubbles in shear flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 16, p. 45-66, 1984.
- [79] RAYLEIGH, L. On the theory of surface forces-II. Compressible fluids. *Phil. Mag.*, v. 33, p. 209, 1892.
- [80] RIDER, W.J.; KOTHE, D.B. Reconstructing volume tracking. *J. Comput. Phys.*, v. 141, p. 112, 1998.
- [81] ROMA, A.M. *A multilevel self adaptive version of the immersed boundary method*. PhD thesis, New York University, 1996.
- [82] ROMA, A.M.; PESKIN, C.S.; BERGER, M.J. An adaptive version of the immersed boundary method. *Journal of Computational Physics*, v. 153, p. 509-534, 1999.
- [83] SCARDOVELLI, R.; ZALESKI, S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, v. 31, p. 567-603, 1999.
- [84] SCHWARZ, H.R.; WALDVOGEL, J. *Numerical analysis - A comprehensive introduction*. New York : John Wiley & Sons, 1989.
- [85] SHAPIRA, M.; HABER, S. Low Reynolds number motion of a droplet in shear flow including wall effects. *Int. J. Multiphase Flow*, v. 16, n. 2, p. 305-321, 1990.
- [86] STOER, J.; BULIRSCH, R. *Introduction to numerical analysis*. New York : Springer-Verlag, 1993.
- [87] STRICKWERDA, J.C. *Finite difference schemes and partial differential equations*. New York : Chapman & Hall, 1989.
- [88] SUSSMAN, M.; SMERKA, P.; OSHER, S. An level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, v. 114, p. 146-159, 1994.
- [89] TAYLOR, G.I. The formation of emulsions in definable fields of flows. *Proc. R. Soc. Lond.*, v. A 146, p. 501-523, 1934.
- [90] UNVERDI, S.O.; TRYGGVASON, G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multifluid flows. *J. Comput. Phys.*, v. 100, p. 25-37, 1992.

- [91] van der WAALS, J.D. *The thermodynamic theory of capillarity flow under the hypothesis of a continuous variation of density*. Verhandel/Konink. Akad. Weten. 1 (1879) 8. Publicado originalmente em Holandês. Traduzido por J.S. Rowlinson e publicado em *J. Stat. Phys.*, v. 20, p. 200-244, 1979.
- [92] WEINAN, E.; LIU, J. Projection method I: convergence and numerical boundary layers. *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 32, n. 4, p. 1017-1057, 1995.
- [93] VAN-KAN, J. A second-order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computation*, v. 7, p. 870-891, 1986.
- [94] YAVNEH, I. Multigrid smoothing factors for red-black Gauss-Seidel relaxation applied to a class of elliptic operators. *SIAM J. Numer. Anal.*, v. 32, n. 4, p. 1126-1138, 1995.
- [95] YE, T.; SHYY, W.; CHUNG, J. A fixed-grid, sharp interface method for bubble dynamics and phase change. *J. Comput. Phys.*, v. 174, p. 781-815, 2001.
- [96] YUE, P.; FENG, J.J.; LIU, C.; SHEN, J. A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids. *J. Fluid Mech.*, v. 515, p. 293-317, 2004.
- [97] YUE, P.; FENG, J.J.; LIU, C.; SHEN, J. Viscoelastic effects on drop deformation in steady shear. *J. Fluid Mech.*, v. 540, p. 427-437, 2005.
- [98] YUE, P.; FENG, J.J.; LIU, C.; SHEN, J. Diffuse-interface simulations of drop-coalescence and retraction in viscoelastic fluids. *J. non-Newtonian Fluid Dynamics*, v. 129, p. 163-176, 2005.
- [99] YUE, P.; ZHOU, C.; FENG, J.J.; OLLIVIER-GOOCH, C.F.; HU, H.H. Phase-field simulations of interfacial dynamics in viscoelastic fluids using finite elements with adaptive meshing. *J. Comp. Phys.*, v. 219, p. 47-67, 2006.
- [100] ZHANG, J. A cost-effective multigrid projection operator. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, v. 76, p. 325-333, 1996.
- [101] ZHU, J; CHEN, L.; SHEN, J.; TIKARE, V. Coarsening kinetics from a variable-mobility Cahn-Hilliard equation: application of a semi-implicit Fourier spectral method. *Physical Review E*, v. 60, n. 4, p. 3564-3572, 1999.

- [102] <http://www.amath.washington.edu/~claw/bearclaw.html> (outubro de 2004)
- [103] http://www.deas.harvard.edu/projects/weitzlab/research/phase_separation.html (25 de novembro de 2006, 17h)
- [104] <http://www.flash.uchicago.edu/~nata/separation/simulation.html> (25 de novembro de 2006, 17h)
- [105] http://en.wikipedia.org/wiki/Kelvin-Helmholtz_instability (30 de janeiro de 2007, 17h20min)
- [106] <http://www.tecplot.com/>
- [107] <http://www.rit.edu/andtp>

Índice Remissivo

- adimensionalização, 16, 17, 21, 37
- anisotropia, 67, 116
- biharmônico, 7, 25, 115, 117
- Cahn-Hilliard, 3–7, 9, 13, 16, 19, 23, 24, 38, 41, 44, 60, 65, 72, 73, 87, 89–94, 116, 128
- campo de fase, 2, 3, 6, 9, 10, 16, 35, 45, 65, 67, 83, 87–89, 95, 107, 109, 115–117
- célula
 - computacional, 40–42, 56–59, 65–67, 69, 88, 89, 95, 96, 98, 108, 109, 127, 129–131
 - fantasma, 64, 65, 67, 127, 131
- ciclo
 - V, 52–57, 115, 116, 124
 - W, 52, 53, 56, 57, 73, 75–82, 85, 86, 115
- condição
 - de contorno, 27, 29, 32, 33, 64, 67, 73, 75–82, 85, 86, 88, 95, 108, 115, 123, 124, 127, 130, 131
 - de integrabilidade, 33
 - convergência, 67, 69, 73, 75–82, 85, 86
 - correção, 51, 55–59, 64
 - densidade de massa, 2, 6, 14, 16, 31, 40, 41, 69, 74–82, 84, 116
 - derivada, 65
 - diferenças finitas, 41
 - Dirichlet, 29, 33, 75, 76, 78–80, 82, 95, 109, 115
 - discretização, 6, 7, 23–25, 28–30, 34, 38, 40, 41, 43–45, 51, 54, 60, 61, 63, 69, 71, 72, 115
 - divergente, 15, 26, 41, 42
 - domínio computacional, 38, 40, 48, 64, 67
 - energia livre, 10, 12, 88, 89
 - equação
 - de Poisson, 33, 41, 53, 116
 - difusiva, 123, 124
 - escoamento, 2, 6, 14, 15, 30, 87, 99, 115, 116
 - estabilidade, 23, 43–45, 115
 - Euler Implícito, 24, 27, 30, 123, 124
 - fluido, 1–3, 6, 9, 10, 14, 16, 17, 31, 116

- Fortran 90, 125, 126, 129
- Gauss-Seidel, 51, 56, 116
- Gear, 7, 27–29, 34, 124
- gradiente, 17, 18, 41, 42
- Hohenberg e Halperin, 16
- incompressibilidade, 30, 32, 116
- interface de equilíbrio, 10, 12
- interpolação
 - bilinear, 56–59
 - tricúbica, 115
 - trilinear, 56–58, 115
- Kelvin-Helmholtz, 87, 107–115
- Laplaciano, 15, 17, 18, 41, 60, 61, 63, 64, 71, 72
- lista ligada, 65, 129, 131
- malha
 - composta, 7, 47, 50–52, 55, 56, 67, 68, 71, 73, 77, 78, 81, 82, 86, 88, 96, 103, 105, 109, 113, 130
 - irmã, 49, 65, 67
 - uniforme, 6, 47, 48, 52–54, 67, 71, 73, 75, 76, 79, 80, 84, 85, 88, 124, 127
- Método de Projeção, 6, 23, 30, 32, 35, 37, 40, 74, 83
- mistura, 3, 6, 9, 13, 39, 87–89
- mobilidade, 14, 19, 25, 40, 41, 69, 72, 73, 84–86, 88, 96, 109, 116, 117
- Modelo H, 6, 7, 9, 16, 19, 22, 23, 34, 36, 38, 43–46, 83, 85–87, 95, 107, 115, 116, 128
- multigrid, 7, 40, 47, 51–53, 56–60, 64, 67, 73, 75–82, 85, 86, 95, 107, 115–117, 124, 127, 129–131
- Navier-Stokes, 6, 9, 14, 16, 23, 28, 38, 41, 60, 73, 75–82, 116, 128
- Neumann, 29, 33, 75, 76, 78–80, 82, 88, 95, 109, 115
- nível
 - físico, 47, 53, 55, 64, 67, 68, 97, 129–131
 - virtual, 52, 53, 56, 64, 67, 88, 96, 109
- norma
 - do máximo, 69, 70, 72
 - Euclidiana, 69, 70, 72
- normal, 12, 27, 33, 88
- número
 - de Cahn, 9, 17, 98, 109
 - de capilaridade, 9, 20, 45, 95, 98, 99, 108
 - de Péclet, 9, 109
 - de Reynolds, 9, 20, 45, 95, 99, 107
- parâmetro de ordem, 3, 6, 9, 14, 16, 17, 40, 41, 69
- passo
 - espacial, 44, 45, 47, 51, 52, 65, 95, 108, 115, 116, 129
 - temporal, 6, 28, 44, 45, 88, 96, 109
- potencial químico, 10, 13, 14, 16–18, 24, 25, 27
- pressão, 14, 16, 23, 29–33, 37, 38, 40, 41, 60, 67, 69, 74–76, 78–80, 82, 83, 95, 99, 104, 107, 109, 114, 116

prolongamento, 52, 54, 56, 57, 64, 115

razão de refinamento, 47, 51, 70

refinamento adaptativo, 65

resíduo, 51, 56, 57, 64

restrição, 51, 52, 54–57, 115

semi-implícito, 6, 23–25, 30, 34, 43–45,
115

Tecplot 360, 87

tensão superficial, 12, 13, 20, 45, 98, 116,
120

termo forçante, 14, 16, 35, 72–74, 83

van der Waals, 12

velocidade, 14–17, 20, 23, 29–32, 35, 37,
40–42, 45, 67, 69, 70, 73, 75, 76,
78–80, 82–84, 95, 98, 99, 104, 108,
109, 114

viscosidade, 2, 6, 14–17, 20, 21, 28, 40,
41, 45, 69, 74–82, 84–86, 95, 96,
98, 99, 106, 107, 109