

Simulação Numérica Tridimensional De Uma Bolha Isotérmica Ascendente Em Um Meio Líquido Utilizando O Método De Lattice-Boltzmann

Matheus dos Santos Guzella

*Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri; Instituto de Ciência e Tecnologia (ICT/UFVJM)
matheus.guzella@ict.ufvjm.edu.br*

Gustavo dos Santos Ribeiro

*Universidade de São Paulo; Escola de Engenharia de São Carlos – Núcleo de Térmica e Fluidos
gustavo.srbr@gmail.com*

Luiz Eduardo Czelusniak

*Universidade de São Paulo; Escola de Engenharia de São Carlos – Núcleo de Térmica e Fluidos
luizedu.cze@gmail.com*

Vinícius Pessoa Mapelli

*Universidade de São Paulo; Escola de Engenharia de São Carlos – Núcleo de Térmica e Fluidos
viniciusmapelli@gmail.com*

Luben Cabezas-Gómez

*Universidade de São Paulo; Escola de Engenharia de São Carlos – Núcleo de Térmica e Fluidos
lubencg@sc.usp.br*

Resumo: O método de Lattice Boltzmann (LB) tem atraído muita atenção nos últimos anos para simulação de escoamentos isotérmicos e não-isotérmicos. Os problemas envolvendo escoamentos multifásicos tem sido tratados com este método segundo diferentes metodologias. Neste artigo, emprega-se o método LB para simulação tridimensional de uma bolha isotérmica ascendente em um meio líquido. Inicialmente, o método numérico é descrito e explicado. Posteriormente o mesmo é empregado para simular o problema de uma bolha estática, evidenciando a presença de velocidades espúrias (não-nulas) próximas à interface. Posteriormente, simula-se o problema da bolha ascendente em um meio líquido por ação da força de empuxo. Os resultados demonstram a capacidade do método em simular o problema da ascensão de uma bolha isotérmica em um meio líquido.

Palavras-chave: Métodos Numéricos e Aplicações. Método de Lattice Boltzmann. Simulação Numérica. Bolhas

Introdução

Nas últimas décadas, o método de Lattice Boltzmann surgiu como uma técnica nova e efetiva para simulações de escoamento de fluidos e transferência de calor, como em Wolf-Gladrow (2000), Chen e Doolen (1998), He e Luo (1997), Hou et al (1995), Lai et al (2001), Guo et al (2002) e Kamali e Van den Akker (2013). Dentre as vantagens do método sobre as técnicas tradicionais de dinâmica dos fluidos computacional podem ser citadas a facilidade de paralelização, a redução do custo computacional envolvido na correção da pressão via equação de Laplace e a facilidade de captura de interfaces. Como desvantagens citam-se a limitação do incremento de tempo (por se tratar de um método explícito no tempo) e a degradação da estabilidade do método para valores baixos ou elevados do parâmetro de relaxação temporal.

Neste artigo são realizadas simulações da ascensão de uma bolha isotérmica em um meio líquido utilizando o método LB, com base no modelo dos pseudo-potenciais.

Modelo matemático e método numérico

De acordo com Huang et al. (2015), a equação da evolução da função de distribuição das partículas no método LB usa-se comumente considerando o operador de colisões simplificado de BGK, no qual as colisões se concebem como um processo simples de relaxação com uma constante de tempo τ :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (1)$$

em que $f_i(\mathbf{x}, t)$ é a função de distribuição de partículas com velocidade \mathbf{e}_i na posição \mathbf{x} e no tempo t , τ é a tempo de relaxação e $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ é a função de distribuição de equilíbrio correspondente, dada por:

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho w_i \left[1 + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^{eq})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}^{eq})^2}{2c_s^4} - \frac{(\mathbf{u}^{eq})^2}{2c_s^2} \right] \quad (2)$$

sendo w_i os coeficientes de ponderação, \mathbf{u} o vetor velocidade do fluido (não o real), c_s a velocidade do som associada ao esquema selecionado.

Neste artigo, para simulação tridimensional, emprega-se o esquema D3Q19 (3 direções e 19 velocidades). Assim tem-se $c_s^2 = 1/3$ e os coeficientes de ponderação são dados por:

$$w_i = \begin{cases} 1/3, i = \{0, 1, 2\} \\ 1/18, i = \{3, 4, 5\} \\ 1/36, i = \{6, 7, 8\} \end{cases} \quad (3)$$

Uma representação esquemática do esquema D319 é mostrada na Figura 1:

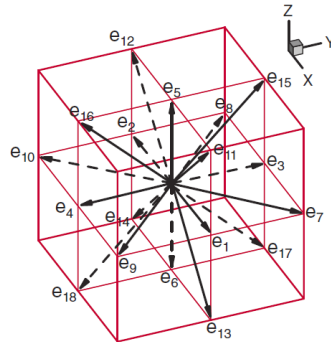


Figura 1: Esquema D3Q19 (Huang et al, 2015)

Com a obtenção da função de distribuição de Boltzmann na forma discreta, f_i , pode-se obter o campo de densidades, ρ , e de velocidades, \mathbf{u} , pelas Equações (4) e (5), respectivamente:

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (4)$$

$$\mathbf{u} = \frac{\sum_i \mathbf{e}_i f_i}{\rho}, \quad (5)$$

O método dos pseudopotenciais, de acordo com Yuan e Schaefer (2006) simula a separação entre as fases líquido-vapor por meio da utilização de uma força repulsiva entre partículas, dada pela Equação (6):

$$\mathbf{F}_{\text{int}}(\mathbf{x}, t) = -g\psi(\mathbf{x}, t) \sum_i w_i \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i t, t) \mathbf{e}_i, \quad (6)$$

em que $\psi(\mathbf{x}, t)$ representa o potencial médio de campo e g é um parâmetro que controla a intensidade da força entre as partículas.

O potencial médio de campo é obtido pela Equação (7):

$$\psi = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_s^2 g}}, \quad (7)$$

Para o cálculo do potencial médio de campo, emprega-se uma Equação de Estado para o cálculo da pressão. Diferentes equações podem ser utilizadas. Neste trabalho foi utilizada a Equação de Carnahan e Starling (1969):

$$p = \rho RT \left[\frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 + (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} \right] - a\rho^2, \quad (8)$$

onde $a = 0,4963R^2T_c^2/p_c$ e $b = 0,187RT_c/p_c$. Para as simulações realizadas neste artigo, foram admitidos $a=1$, $b=4$, $R=1$, recomendados por Yuan e Schaefer (2006).

Para condição de equilíbrio de uma bolha estática em um meio, a tensão superficial faz com que a bolha permaneça esférica. Neste caso é possível calcular o salto de pressão que existe entre o interior da bolha e o meio líquido pela Equação de Young-Laplace:

$$\Delta p = \sigma \frac{2}{R}, \quad (9)$$

O movimento ascendente em um meio líquido ocorre devido à ação da força de empuxo. Esta força foi introduzida pela Equação (9), de acordo com Yuan e Schaefer (2006):

$$\mathbf{F}_g = G(\rho - \bar{\rho}), \quad (10)$$

em que G representa a aceleração da gravidade e $\bar{\rho}$ representa a densidade média, que é calculada considerando todo o domínio computacional.

A velocidade de equilíbrio, \mathbf{u}^{eq} , é calculada incluindo-se o efeito da aceleração gerado pela força total, $\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{int}} + \mathbf{F}_g$:

$$\mathbf{u}^{eq} = \mathbf{u} + \tau \frac{\mathbf{F}}{\rho}, \quad (11)$$

De acordo com Yuan e Schaefer (2006), a velocidade real do fluido, \mathbf{U} , é dada por:

$$\mathbf{U} = \mathbf{u}^{\text{eq}} + \frac{\mathbf{F}}{2\rho}, \quad (12)$$

Por meio da expansão de Chapman-Enskog, conforme Guo e Shu (2013), demonstra-se a relação entre as escalas macroscópica e mesoscópica, ou seja, a relação entre a viscosidade e a relaxação temporal:

$$\nu = c_s^2(\tau - 0,5), \quad (13)$$

Assim, a escolha do parâmetro de relaxação temporal define a viscosidade cinemática. Uma simples análise da Equação 13 revela que $\tau \geq 0,5$. Logo, o operador de colisão BGK possui a limitação de simular somente problemas de baixos números de Reynolds.

Resultados e discussão

Para todas as simulações realizadas foi considerada a temperatura do fluido igual a $T/T_c = 0,75$. Nesta condição as densidades das fases líquida e vapor são iguais a 0,33 e 0,015, respectivamente. Estas densidades são obtidas por meio da Equação de Estado utilizada (Equação (8)). Convém ressaltar que as variáveis utilizadas nas simulações estão em unidades de lattice, seguindo a metodologia de Gong e Cheng (2012). Condições de contorno periódicas foram implementadas em todas as direções, conforme Guo e Shu (2013). As bolhas foram inicializadas com um diâmetro de 30 (em unidades de lattice). Estas podem ser convenientemente convertidas para unidades do sistema internacional (ou outro conveniente) por meio das respectivas grandezas expressas na forma reduzida, ou seja, utilizando as propriedades críticas. Inicialmente foram realizadas simulações de uma bolha estática imersa em um meio líquido. Trata-se de um problema teste típico na simulação de problemas bifásicos. Neste caso, espera-se que a bolha estática permaneça em repouso no meio líquido. Adotou-se relação temporal unitária, ou seja, $\tau = 1$. O domínio computacional foi estabelecido com uma malha uniforme com $51 \times 51 \times 81$ nós para simulação da bolha estática e $51 \times 51 \times 151$ nós para simulação da ascensão da bolha.

O objetivo destas simulações é abordar uma característica da simulação numérica de problemas bifásicos utilizando-se o método dos pseudopotenciais: a presença de velocidade não-nula nas proximidades da interface (velocidades espúrias). A presença de velocidades espúrias na região da interface deve-se ao desbalanceamento da tensão superficial e surge em métodos numéricos utilizados na simulação deste tipo de problema.

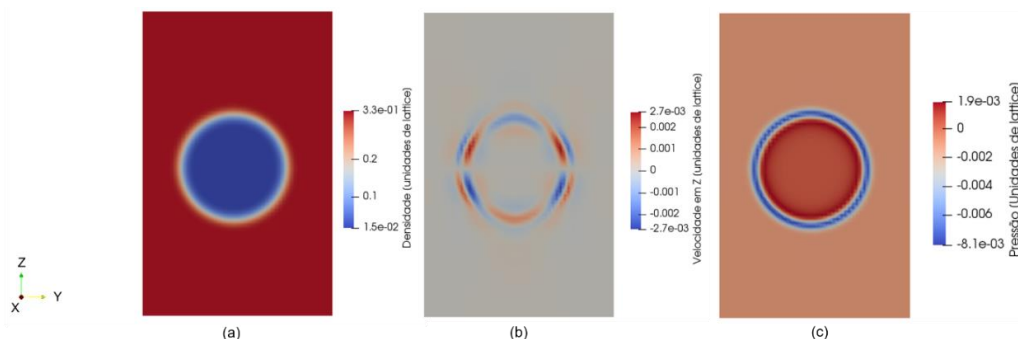


Figura 2: distribuição de densidades (a), velocidade na direção Z (b) e pressão (c) para a bolha estática

O campo de pressões apresentado na Figura 2 permite a obtenção da tensão superficial associada à bolha. Assim, pela Figura 2c, a tensão superficial σ (em unidades de lattice) é igual a 0,075. Esta é

inclusive uma característica do modelo dos pseudopotenciais: a tensão superficial é obtida somente a posteriori à simulação numérica. Isso ocorre pela impossibilidade de se ajustar a tensão superficial de modo independente da força entre partículas, F_{int} , dada pela Equação (6).

Posteriormente foram realizadas simulações numéricas de uma bolha ascendente em um meio líquido. Neste caso, a aceleração da gravidade G foi assumida igual a 0,0003 (em unidades de lattice), conforme Gong e Cheng (2012). A Figura 3 apresenta a distribuição de densidades para diferentes instantes de tempo ($t=0$, $t=50$ s e $t=100$ s):

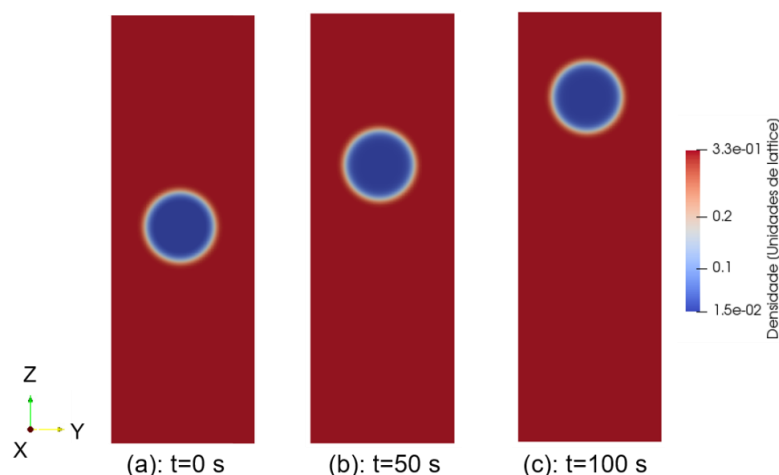


Figura 3: distribuição de densidades para a ascensão da bolha para diferentes instantes de tempo

Em relação à Figura 3, nota-se que a forma da bolha não se altera durante a ascensão, ou seja, permanece esférica. Isso resulta do predomínio das forças de tensão superficial ou forças viscosas em comparação com as forças de inércia.

A Figura 4 apresenta o campo de velocidades para a simulação da ascensão de uma bolha. A partir dos resultados, pode-se definir o número de Reynolds para a simulação da ascensão da bolha. Tomando-se a velocidade máxima obtida (veja Figura 4) como a velocidade característica, o diâmetro da bolha e a viscosidade cinemática (veja Equação (13)) obtém-se $Re=5,4$. Este resultado confirma o fato da forma da bolha ter sido esférica.

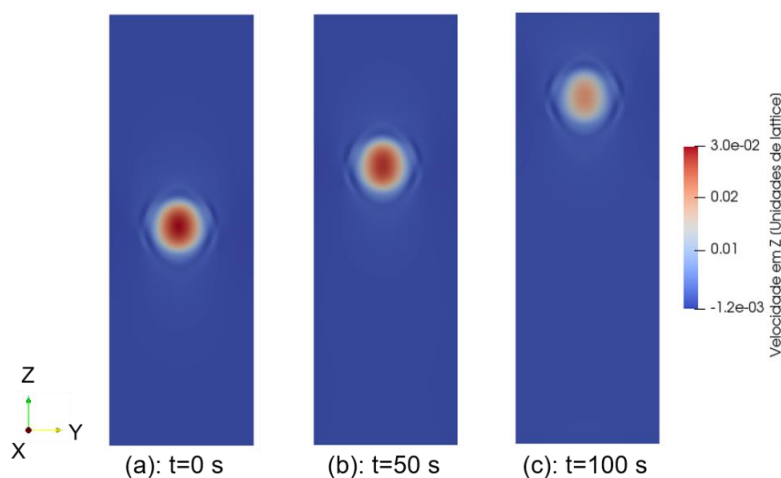


Figura 4: distribuição de velocidades para a ascensão da bolha (a) $t=0$ s (b) $t=50$ s (c) $t=100$ s

Conclusões