

# Simulação tridimensional adaptativa da coalescência de duas gotas usando as equações do Modelo H

**Rudimar L. Nós**

Departamento Acadêmico de Matemática, UTFPR  
80230-901, Curitiba, PR  
E-mail: rudimarnos@gmail.com

**Hector D. Ceniceros**

Department of Mathematics, UCSB  
93106, Santa Barbara, CA  
E-mail: hdc@math.ucsb.edu

**Alexandre M. Roma**

Departamento de Matemática Aplicada, IME, USP  
05311-970, São Paulo, SP  
E-mail: roma@ime.usp.br

## 1 Resumo

Apresentamos uma eficiente metodologia numérica à simulação tridimensional de fluidos multifásicos incompressíveis descritos por modelos de campo de fase conservativos. Enfocamos neste trabalho o caso de fluidos de mesma densidade com viscosidades diferentes (Modelo H). O método numérico emprega malhas adaptativas refinadas localmente (AMR), combinadas a uma discretização temporal semi-implícita e a um multigrid multinível linear para suavizar restrições de estabilidade de alta ordem e capturar as díspares escalas do escoamento a um custo ótimo. Validamos o método e demonstramos suas capacidades e eficiência simulando a coalescência de gotas.

## 2 Abstract

We present an efficient numerical methodology for the 3D computation of incompressible multi-phase flows described by conservative phase field models. We focus here on the case of density matched fluids with different viscosity (Model H). The numerical method employs adaptive mesh refinements (AMR) in concert with an semi-implicit time discretization strategy and a linear, multi-level multigrid to relax high order stability constraints and to capture the flow's disparate scales at optimal cost. We validate the method and demonstrate its capabilities and efficacy with flow induced drop coalescence.

## 3 Introdução

A coalescência tem recebido atenção recentemente devido ao papel que desempenha na formação de polímeros. A compreensão das condições nas quais a coalescência ocorre, como a dependência das propriedades do fluido e do escoamento, é fundamental para o controle desse processo. Simular a coalescência é um experimento numérico que oferece a oportunidade de testar o modelo de campo de fase adotado e a conservação de volume durante essa transição singular.

Os modelos de campo de fase constituem uma classe particular dos modelos de interface difusiva. Nesses modelos, as transições abruptas nas interfaces entre os diferentes fluidos ou materiais 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*  $\phi$  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.

Fundamentados nas pesquisas recentes de Badalassi, Cenicerros e Banerjee [1] e de Cenicerros, Nós e Roma [4, 5, 6, 7, 9], apresentamos neste trabalho uma metodologia para efetuar simulações tridimensionais completamente adaptativas de um modelo de campo de fase para um fluido incompressível de densidade constante e viscosidade variável, conhecido como Modelo H segundo a nomenclatura de Hohenberg e Halperin [8].

A metodologia numérica aplicada à solução das equações do Modelo H consiste no uso de uma discretização temporal linear semi-implícita de segunda ordem e de uma acurada discretização espacial em malhas refinadas localmente que se adaptam dinamicamente para recobrir a interface de transição. Isto garante precisão tanto no tempo quanto no espaço.

Na discretização temporal das equações do Modelo H aplicamos o método de extrapolação de Gear com coeficientes variáveis no tempo [5, 9] e os sistemas lineares provenientes da discretização são solucionados com técnicas *multinível-multigrid* [5, 7, 9]. Quanto à discretização do domínio, utilizamos o refinamento local adaptativo introduzido por Berger [3] na solução numérica de equações diferenciais parciais hiperbólicas. Optamos por essa técnica devido à sua eficiência e baixo custo computacional na remalhagem.

## 4 Modelo matemático

O Modelo H acopla as equações de Cahn-Hilliard [5, 6, 9] e de Navier-Stokes [9] através de uma força de superfície dependente do campo de fase:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot [M(\phi) \nabla \mu(\phi)], \quad \mu(\phi) = \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{x})}, \quad H[\phi] = \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \alpha |\nabla \phi(\mathbf{x})|^2 + \beta f(\phi(\mathbf{x})) \right\} d\mathbf{x}, \quad (1)$$

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

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3)$$

sendo  $\phi$  o parâmetro de ordem (ou campo de fase),  $M(\phi)$  a mobilidade ou coeficiente Onsager,  $\mu(\phi)$  o potencial químico,  $\alpha$  e  $\beta$  constantes,  $\rho$  a densidade (constante),  $p$  a pressão,  $\eta(\phi)$  a viscosidade e  $\mathbf{u}$  o campo de velocidade.

Adimensionalizamos as equações do Modelo H (1)-(3) com as variáveis

$$\mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u}}{U_c}, \quad t' = \frac{t}{T_c}, \quad \mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{L_c}, \quad p' = \frac{p L_c}{\eta_c U_c}, \quad (4)$$

sendo  $L_c$ ,  $U_c$ ,  $T_c$  e  $\eta_c$  o comprimento, a velocidade, o tempo e a viscosidade características, respectivamente. Selecionamos  $L_c$  como o comprimento horizontal do domínio do escoamento e  $U_c$  como a velocidade de cisalhamento. Definindo  $T_c = L_c/U_c$  e suprimindo as aspas, obtemos as equações do Modelo H adimensionalizadas [9]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \frac{1}{Pe} \nabla \cdot [M(\phi) \nabla \mu(\phi)], \quad (5)$$

$$Re \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi)(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \frac{1}{Ca} \mu(\phi) \nabla \phi, \quad (6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (7)$$

onde agora  $\eta(\phi)$  e  $M(\phi)$  são normalizadas pela viscosidade característica e pela mobilidade característica, respectivamente.

Os grupos adimensionais usados em (5)-(7) são o número de Reynolds, o número capilar e o número de Péclet, dados por

$$Re = \frac{\rho U_c L_c}{\eta_c}, \quad Ca = \frac{\eta_c U_c}{\beta L_c}, \quad Pe = \frac{U_c L_c}{M_c \beta}, \quad (8)$$

respectivamente. O número de Reynolds  $Re$  é a razão entre as forças inerciais e viscosas; o número capilar  $Ca$  fornece uma medida da magnitude relativa das forças viscosas e capilares (ou de tensão superficial) na interface; o número de Péclet  $Pe$  é a razão entre as escalas temporais difusiva e convectiva.

Reescrevemos o número capilar  $Ca$  como  $Ca = \frac{2\sqrt{2}K}{3} Ca^*$ , sendo  $K$  o número de Cahn, uma medida relativa da espessura da interface de transição,  $Ca^* = \eta_c U_c / \sigma$  o número capilar usual e  $\sigma$  a tensão superficial.

O potencial químico adimensional é dado por  $\mu(\phi) = \phi^3 - \phi - K^2 \nabla^2 \phi$  e consideramos a viscosidade  $\eta$  como uma função linear do parâmetro de ordem  $\phi$ , ou seja,  $\eta(\phi) = \frac{\lambda-1}{2}\phi + \frac{\lambda+1}{2}$ , onde  $\lambda = \eta_+ / \eta_-$  ( $\eta_- \leq \eta \leq \eta_+$  e  $\eta_c = \eta_-$ ) é a razão de viscosidade.

## 5 Metodologia numérica

Adotamos o esquema temporal semi-implícito utilizado por Badalassi et al. [1] e uma discretização tridimensional adaptativa para as equações do Modelo H. A discretização espacial [9] é uma extensão da discretização bidimensional adaptativa para a equação de Cahn-Hilliard empregada por Ceniceros e Roma [5].

### 5.1 Discretização temporal

Considerando  $\varphi_1 = \phi$ , reescrevemos as equações do Modelo H (5)-(7) como

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \varphi_2 + g_1(\varphi_1, \varphi_2, \mathbf{u}), \quad (9)$$

$$\varphi_2 = \tau \varphi_1 - K^2 \nabla^2 \varphi_1, \quad (10)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{1}{Re} \nabla p + \frac{\bar{\eta}}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{Re Ca} \mu(\varphi_1, \varphi_2) \nabla \varphi_1 + g_2(\varphi_1, \mathbf{u}), \quad (11)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (12)$$

onde  $\tau$  e  $\bar{\eta}$  são constantes e

$$g_1(\varphi_1, \varphi_2, \mathbf{u}) = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \mu(\varphi_1, \varphi_2) - \frac{1}{Pe} \nabla^2 \varphi_2 - \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi_1, \quad (13)$$

$$g_2(\varphi_1, \mathbf{u}) = \frac{1}{Re} \nabla \cdot [\eta(\varphi_1) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \frac{\bar{\eta}}{Re} \nabla^2 \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad (14)$$

$$\mu(\varphi_1, \varphi_2) = \varphi_1^3 - (1 + \tau) \varphi_1 + \varphi_2. \quad (15)$$

Na estratégia semi-implícita, os termos  $g_1$  e  $g_2$  são tratados explicitamente, enquanto que os demais termos do lado direito de (9)-(11) são tratados implicitamente. Empregamos o método de extrapolação de Gear de segunda ordem com coeficientes variáveis no tempo [5, 9]. Assim, o

esquema semi-implícito para o Modelo H é dado por

$$\frac{\alpha_2 \varphi_1^{n+1} + \alpha_1 \varphi_1^n + \alpha_0 \varphi_1^{n-1}}{\Delta t} = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \varphi_2^{n+1} + \beta_1 g_1(\varphi_1^n, \varphi_2^n, \mathbf{u}^n) \quad (16)$$

$$+ \beta_0 g_1(\varphi_1^{n-1}, \varphi_2^{n-1}, \mathbf{u}^{n-1}),$$

$$\varphi_2^{n+1} = \tau \varphi_1^{n+1} - K^2 \nabla^2 \varphi_1^{n+1}, \quad (17)$$

$$\frac{\alpha_2 \mathbf{u}^{n+1} + \alpha_1 \mathbf{u}^n + \alpha_0 \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} = -\frac{1}{Re} \nabla p^{n+1} + \frac{\bar{\eta}}{Re} \nabla^2 \mathbf{u}^{n+1} \quad (18)$$

$$+ \frac{1}{Re Ca} \mu(\varphi_1^{n+1}, \varphi_2^{n+1}) \nabla \varphi_1^{n+1}$$

$$+ \beta_1 g_2(\varphi_1^n, \mathbf{u}^n) + \beta_0 g_2(\varphi_1^{n-1}, \mathbf{u}^{n-1}),$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0, \quad (19)$$

onde  $\alpha_0 = \Delta t^2 / (\Delta t_0 \Delta t_1)$ ,  $\alpha_1 = -\Delta t_1 / \Delta t_0$ ,  $\alpha_2 = (\Delta t_0 + 2\Delta t) / \Delta t_1$ ,  $\beta_0 = -\Delta t / \Delta t_0$  e  $\beta_1 = \Delta t_1 / \Delta t_0$ , com  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ ,  $\Delta t_0 = t^n - t^{n-1}$  e  $\Delta t_1 = \Delta t_0 + \Delta t$ . Para um passo temporal constante, os coeficientes  $\alpha_s$  e  $\beta_s$  assumem seus valores usuais [5, 9].

A estabilidade para a discretização semi-implícita descrita anteriormente foi analisada recentemente por Xu e Tang [10] e os valores que usamos para os parâmetros de estabilidade  $\tau$  e  $\bar{\eta}$  concordam com os preditos em [10].

Em (16)-(19), o campo de fase é atualizado pela solução de (16)-(17); já o campo de velocidade é atualizado com o emprego de um método de projeção [4, 9] para solucionar (18)-(19). Para iniciar o método de extrapolação de Gear utilizamos o método de Euler semi-implícito.

## 5.2 Discretização espacial adaptativa

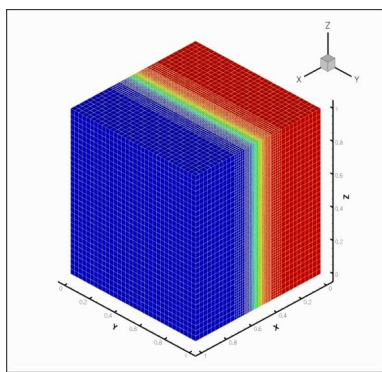


Figura 1: Malha composta por dois níveis de refinamento. O nível mais grosso corresponde a uma malha  $32 \times 32 \times 32$ .

[5, 9]. Com o conjunto de células marcadas, as malhas em cada nível são geradas pelo algoritmo de Berger e Rigoutsos [3]. Para facilitar a implementação do método de projeção, as variáveis são definidas em uma malha MAC [4, 9]. Assim, variáveis escalares como a pressão, o parâmetro de ordem e a viscosidade, são definidas no centro da célula computacional; os componentes da velocidade são definidos no centro das faces da célula computacional. Discretizamos os operadores gradiente, divergente e Laplaciano empregando diferenças finitas.

O domínio computacional é um paralelepípedo  $\Omega = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2] \times [A_3, B_3]$ . Usamos uma malha composta, isto é, refinada localmente, para solucionar eficientemente a fina camada de transição da solução. A malha composta é bloco estruturada e definida como uma sequência hierárquica de níveis aninhados progressivamente mais finos [5]. A razão de refinamento entre dois níveis sucessivos é dois. A Figura 1 mostra um exemplo de uma malha composta com dois níveis de refinamento. A malha composta é substituída dinamicamente para assegurar que a região de transição seja recoberta com o nível mais fino durante todo tempo. A remalhagem é acionada após um certo número de passos no tempo para adequar a malha composta [5, 9]. Para recobrir eficientemente a camada interfacial, marcamos para o refinamento todas as células computacionais nas quais o valor do parâmetro de ordem  $\phi$  é próximo de zero

## 5.3 Solução dos sistemas lineares

Solucionamos cinco sistemas lineares na malha composta: um para a equação de Cahn-Hilliard, três para os componentes da velocidade e um para a pressão. Para solucionar esses sistemas lineares empregamos um multigrid multinível, ou seja, um multigrid aplicado a cada

nível de refinamento. Para tanto, fazemos distinção entre níveis físicos - níveis de refinamento da malha composta - e níveis virtuais - níveis usuais associados ao multigrid. Dada a estrutura hierárquica da malha composta, os níveis virtuais são aqueles abaixo do nível físico mais grosso.

Baseados nos resultados preliminares reportados em [7], adotamos para o multigrid o ciclo W modificado. Este consiste em um ciclo V nos níveis físicos e um ciclo W nos níveis virtuais. Nessa técnica multigrid, empregamos Gauss-Seidel red-black para relaxar a correção uma vez na descida e uma vez na subida. Na malha mais grossa, ao invés de solucionarmos exatamente a equação residual, relaxamos a correção algumas vezes. No ciclo W adaptado, utilizamos uma média simples na restrição e interpolações trilineares no prolongamento [7, 9].

## 5.4 Estabilidade numérica

Selecionamos  $\Delta t$  conforme [1]. Devido ao tratamento explícito do termo convectivo, temos uma restrição de estabilidade do tipo CFL (Courant, Friedrichs e Lewy) dada por

$$\Delta t_{\text{CFL}} \leq \left( \frac{|u|_{\infty}}{\Delta x} + \frac{|v|_{\infty}}{\Delta y} + \frac{|w|_{\infty}}{\Delta z} \right)^{-1}. \quad (20)$$

Devido ao acoplamento das equações de Cahn-Hilliard e Navier-Stokes, existe também uma restrição de estabilidade induzida pelo termo de tensão superficial [1] da forma

$$\Delta t_s \leq C_1 \sqrt{ReCa} [\min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\}]^{3/2}, \quad (21)$$

sendo  $C_1$  uma constante. Com a discretização semi-implícita proposta, constatamos que  $C_1$  pode ser 10 vezes maior do que em [1]. Finalmente, como verificado em [1], existe ainda uma restrição devido ao termo viscoso quando a interface é muito fina ( $K$  pequeno) e há uma grande variação na viscosidade:

$$\Delta t_v \leq C_2 \frac{Re}{\lambda - 1} \min\{\Delta x, \Delta y, \Delta z\}, \quad (22)$$

onde  $C_2$  é uma constante que também pode ser 10 vezes maior do que a verificada em [1]. Assim, adotamos como estratégia de seleção do passo temporal

$$\Delta t = \min\{\Delta t_{\text{CFL}}, \Delta t_s, \Delta t_v\}. \quad (23)$$

Como  $C_1$  e  $C_2$  podem ser iguais a 100, o passo temporal efetivo é comparável a  $\Delta t \leq 0.5 \Delta t_{\text{CFL}}$  na maioria de nossas simulações.

## 6 Simulação computacional

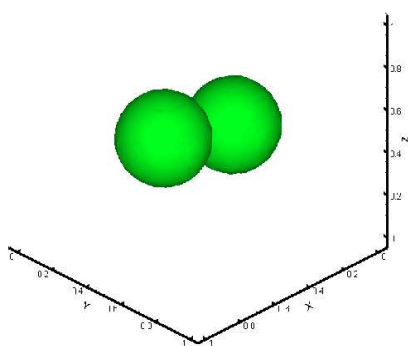


Figura 2: Configuração inicial das gotas: isosuperfície em  $t = 0$ .

Em (25), temos  $u = -1$  em  $z = 0$  e  $u = 1$  em  $z = 1$ . As Figuras 2 e 3 ilustram a configuração inicial das gotas.

Consideramos inicialmente duas gotas esféricas idênticas de raio  $R = 0,2$ , separadas uma da outra por uma distância de cerca de três células computacionais do nível mais fino ( $3/256$ ). Os centros das gotas estão em  $\mathbf{x}_1 = (0.299, 0.5, 0.45)$  e  $\mathbf{x}_2 = (0.701, 0.5, 0.55)$ , respectivamente, e o domínio computacional é  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ . O parâmetro de ordem e a velocidade iniciais são dados por

$$\phi(0, \mathbf{x}) = \begin{cases} \tanh\left(\frac{R - \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\|}{\sqrt{2}K}\right) & \text{for } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\| < R + 2\sqrt{2}K \\ \tanh\left(\frac{R - \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|}{\sqrt{2}K}\right) & \text{for } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\| < R + 2\sqrt{2}K \end{cases}, \quad (24)$$

$$\mathbf{u}(0, x, y, z) = (2z - 1, 0, 0), \quad (25)$$

respectivamente.



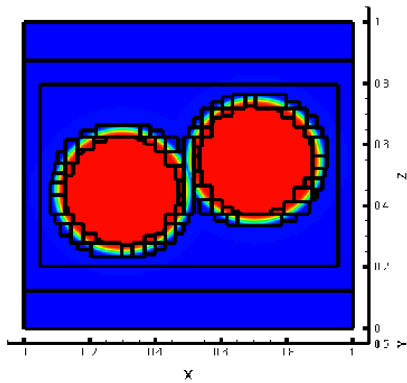


Figura 3: Configuração inicial das gotas: corte em  $y = 0,5$  da malha composta adaptativa.

Assumimos condições de contorno periódicas nas direções  $x$  e  $y$  e, em  $z = 0$  e  $z = 1$ , impomos  $v = w = 0$  e aplicamos condições de contorno homogêneas de Neumann para o parâmetro de ordem  $\phi$  e para o incremento de pressão. Adotamos viscosidade constante ( $\lambda = 1$ ) e  $Ca = 0,001$ , assim como em [2], e  $Re = 0,1$ . Empregamos 4 níveis de refinamento, mobilidade constante ( $M(\phi) = 1$ ),  $K = \frac{1,4}{256}$ ,  $Pe = \frac{1}{K}$ ,  $\tau = 2$  e  $\bar{\eta} = \lambda$ .

A dinâmica da coalescência é ilustrada na Figura 4, onde um corte 2D (plano  $xz$ ) permite melhor visualização da interação das bolhas. Estas evoluem para uma única bolha de formato elipsoidal, que atinge o estado de equilíbrio entre as forças de cisalhamento, tensão superficial e dissipação viscosa. Nesse estado, o parâmetro de ordem  $\phi$  atinge um valor quase uniforme no interior da bolha oriunda da coalescência das duas gotas iniciais. Durante todo o processo de coalescência, o valor médio do parâmetro de ordem, bem como o volume das gotas, tem uma variação de somente 0,09% [4].

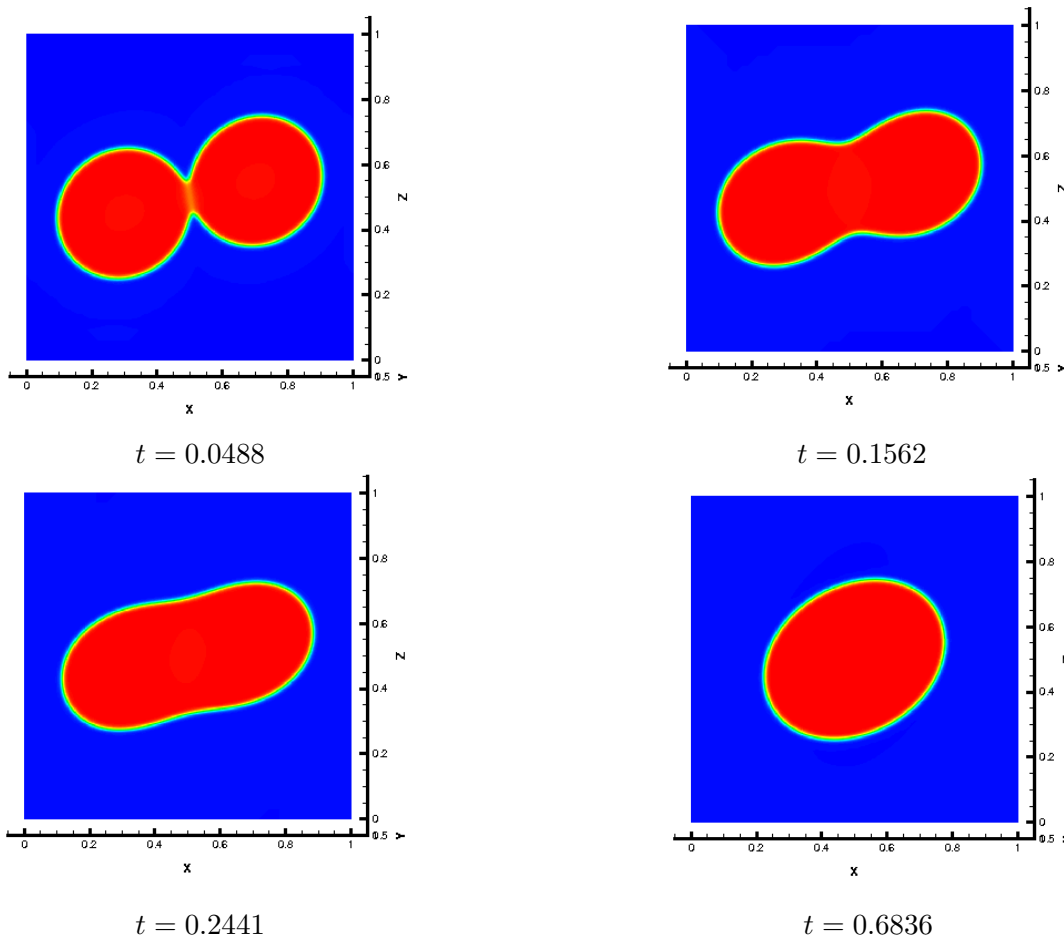


Figura 4: Dinâmica da coalescência. Corte 2D (plano  $xz$ ) do parâmetro de ordem  $\phi$ .

## 7 Conclusão

Apresentamos uma estratégia numérica para a simulação tridimensional completamente adaptativa de um modelo de campo de fase conservativo descrito pelas equações do Modelo H.

Com ela simulamos a coalescência de duas gotas.

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. A discretização proposta é isenta de restrições severas de estabilidade.

## 8 Ferramentas computacionais

A simulação computacional foi executada em 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). Os resultados foram visualizados no Tecplot 360.

## 9 Agradecimentos

Parte desta pesquisa foi financiada pela *National Science Foundation* (projeto DMS 0609996) e pela FAPESP (projetos 04/13781-1 e 06/57099-5). Agradecemos também à equipe do Laboratório de Ciências Térmicas (LACIT) da UTFPR pelo uso de equipamentos na visualização das simulações computacionais.

## Referências

- [1] V.E. Badalassi, H.D. Cenicerros, S. Banerjee, Computation of multiphase systems with phase field models, *J. Comput. Phys.*, 190 (2003) 371-397.
- [2] I. Barosan, P.D. Anderson, H.E.H. Meijer, Application of mortar elements to diffuse-interface methods, *Computer & Fluids*, 35 (2006) 1384-1399.
- [3] M.J. Berger, I. Rigoutsos, An algorithm for point clustering and grid generation, *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 21(5) (1991) 1278-1286.
- [4] H.D. Cenicerros, R.L. Nós, A.M. Roma, Three-dimensional, fully adaptive simulations of phase-field fluid models, *a ser publicado em J. Comput. Phys.*.
- [5] H.D. Cenicerros, A.M. Roma, A nonstiff, adaptive mesh refinement-based method for the Cahn-Hilliard equation, *J. Comput. Phys.*, 225(2) (2007) 1849-1862.
- [6] H.D. Cenicerros, R.L. Nós, A.M. Roma, *Simulação tridimensional da separação dos componentes de uma mistura bifásica usando a equação de Cahn-Hilliard*, XXX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, Florianópolis, 2007.
- [7] H.D. Cenicerros, R.L. Nós, A.M. Roma, *Solução de equações diferenciais parciais elípticas por técnicas multinível-multigrid em malhas tridimensionais bloco-estruturadas com refinamento localizado*, XXVIII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, São Paulo, 2005.
- [8] P.C. Hohenberg, B.I. Halperin, Theory of dynamic critical phenomena, *Rev. Mod. Phys.*, 49(3) (1977) 435.
- [9] R.L. Nós, “Simulações de escoamentos tridimensionais bifásicos empregando métodos adaptativos e modelos de campo de fase”, Tese de Doutorado, IME-USP, 2007.
- [10] C. Xu, T. Tang, Stability analysis of large time-stepping methods for epitaxial growth models, *SIAM J. Numer. Anal.*, 44(4) (2006) 1759-1779.