Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana

Este capítulo trata da modelagem computacional referente ao problema do escoamento 3D de filme fino, sobre um plano inclinado, gerado a partir de injeção contínua de líquido. Mas na literatura atual existem mais estudos sobre a análise do escoamento de filme fino com volume de líquido constante. Portanto, será importante mostrar a formulação básica resumida deste tipo de escoamento com injeção contínua, incluindo o resumo da literatura existente.

2.1 Formulação matemática

2

Na figura 2.1 pode-se observar a configuração do problema físico tratado neste capítulo onde gotas de líquido são originadas por portas de injeção localizadas num plano inclinado a α graus com o plano horizontal. Para ilustrar, é mostrado na figura 2.1 duas portas de injeção, sendo que na formulação será definida para q portas. O sistema de referência cartesiano é escolhido de forma que o eixo x seja paralelo à direção descendente e o eixo y perpendicular à esta direção e contido no plano inclinado, conforme indicado na figura.



Figura 2.1: Esquema do escoamento 3D de filme fino, num plano inclinado, gerado por duas portas de injeção.

Assume-se que o fluido é incompressível e Newtoniano com densidade ρ , viscosidade dinâmica μ (viscosidade cinemática ν), e tensão superficial σ . Definimos o vetor velocidade do líquido como sendo $\mathbf{u}(x, y, z, t) = (u, v, w)$, a pressão como p(x, y, z, t) e a espessura da camada líquida dada pela função z = h(x, y, t), medida na direção normal ao plano inclinado.

O escoamento de um filme líquido sobre uma placa é descrito pelas equações de Navier-Stokes, em conjunto com as condições de superfície livre e também com a linha de contato dinâmica, sendo estas equações representadas por:

- Equação de continuidade:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$
(2-1)

- Equação de conservação de quantidade de movimento linear:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \left(-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \right)$$
(2-2)

A análise matemática do problema torna-se possível através de duas hipóteses simplificativas. Primeiro, quando o líquido de interesse é suficientemente viscoso e sua velocidade resultante é pequena, o número de Reynolds é pequeno e o escoamento é denominado lento ou creeping flow. O termo não linear da inércia pode ser desprezado, levando-nos à equação de Stokes. Segundo, se adicionalmente, a relação da espessura característica do fluido, H, com a escala de comprimento característico do substrato, L, for muito pequena, i.e. $\epsilon = H/L \ll 1$, uma nova simplificação pode ser feita pela aplicação da teoria de lubrificação. Deve-se mencionar que a segunda hipótese é a mais relevante para a aplicação da teoria de lubrificação sendo a definição de Reynolds neste caso como $\epsilon^2 \Re \epsilon$. Muitos termos viscosos podem ser desprezados, simplificando ainda mais a equação de conservação de quantidade de movimento linear e a condição de contorno na superfície livre.

Levando em consideração as hipóteses simplificativas, a equação de conservação de quantidade de movimento linear fica:

$$\nabla p = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \left(\rho g \sin \alpha\right) \mathbf{i} \tag{2-3}$$

Uma outra hipótese necessária é que a variação da pressão ao longo da espessura é simplesmente hidrostática, i.e.

$$p(z) = p(h) + (\rho g \cos \alpha)(h - z), \qquad (2-4)$$

que permite garantir que a velocidade do fluido na direção z seja desprezível fora da região de injeção.

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana 31

A pressão na superfície, p(x, y, h(x, y)), é especificada como uma condição de contorno, esta pode ser considerada constante se os efeitos da tensão superficial não são importantes, mas se forem, a pressão será dada pela condição de Young-Laplace. Nos problemas de escoamento 3D de filmes finos os efeitos da tensão superficial são importantes e a pressão na superfície fica definida da seguinte maneira:

$$p(x, y, h(x, y)) = p_o - \sigma \nabla^2 h(x, y), \qquad (2-5)$$

com p_o representando a pressão atmosférica.

Uma outra condição de contorno é a de não deslizamento na superfície, i.e. em z = 0 temos $\mathbf{u}(x, y) = 0$. Esta condição permite que a Eq. (2-3) seja integrável ao longo da espessura, obtendo assim a velocidade média:

$$\hat{\mathbf{u}} = \frac{h^2}{3\mu} \Big[\sigma \nabla \nabla^2 h - (\rho g \cos \alpha) \nabla h + (\rho g \sin \alpha) \mathbf{i} \Big], \qquad (2-6)$$

Fazendo uso da condição cinemática na superfície, significando fisicamente que o líquido não pode atravessar a superfície livre, temos que DF/Dt =0, onde F é a função que define a superfície livre F(x, y, z, t) = z - h(x, y, t) = 0:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot (h\hat{\mathbf{u}}) = 0, \qquad (2-7)$$

Assim, obtém-se a equação de evolução da camada líquida de volume constante; conforme apresentado por Huppert [3] e Schwartz [4]. O sucesso desta aproximação, aplicando a teoria de lubrificação, está documentado na literatura (R. L. Panton [5], A. Oron et al. [6]) e uma característica deste sucesso é a sua robustez e a obtenção de bons resultados.

No lado direito da Eq. (2-7) pode ser adicionado um termo fonte para representar a taxa de injeção de líquido gerado pelas "q" portas de injeção. Assim, obtemos a equação abaixo:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nabla \cdot \left\{ \frac{h^3}{3\mu} \left(\sigma \nabla \nabla^2 h - \rho g \nabla h \cos \alpha + \rho g \sin \alpha \mathbf{i} \right) \right\} + \sum_{j=1}^q \Phi_j(x_{cpj}, y_{cpj}) \quad (2-8)$$

A equação (2-8) representa o balanço das forças viscosa, capilar e gravitacional. O índice **i** é o vetor unitário ao longo do eixo x. As injeções de líquido estão sendo representadas por um termo fonte dado em função da velocidade de injeção $\Phi_j(x_{cpj}, y_{cpj})$ normal ao plano. A aplicação do termo fonte foi utilizada inicialmente por Schwartz & Michaeledis [7]. Quando $\Phi = 0$ não há injeção de líquido, torna-se num caso de escoamento com volume de líquido constante. O líquido é injetado através de orifícios circulares de raios R_f , centralizados nas coordenadas (x_{cpj}, y_{cpj}) . O subscrito j denota a sequência das "q" portas de injeção consideradas no problema. A velocidade de injeção é obtida assumindo que o fluido sai através de uma porta cilíndrica de raio R_f , com um perfil totalmente desenvolvido como mostrado na figura 2.2. Considerando coordenadas cilíndricas nas portas de injeção, temos:



Figura 2.2: Esboço da porta de injeção

$$\Phi = u_z = \frac{2\Gamma}{\pi R_f^2} \left[1 - (\frac{r_f}{R_f})^2 \right],$$
(2-9)

onde Γ é a vazão volumétrica de injeção. Neste caso, vamos considerar a injeção do líquido perpendicular ao plano x - y, portanto r_f está definido em função de (x, y)

$$\Phi_j(x_{cpj}, y_{cpj}) = \begin{cases} \frac{2\Gamma}{\pi R_f^2} \left[1 - \left(\frac{r_f}{R_f}\right)^2 \right] & \text{caso} \quad r_f \le R_f; \\ 0 & \text{caso} \quad r_f > R_f. \end{cases}$$
(2-10)

$$r_f = [(x - x_{cpj})^2 + (y - y_{cpj})^2]^{\frac{1}{2}}$$
(2-11)

sendo que j é o índice que define as portas de injeção.

A equação (2-8) é uma equação não linear, parabólica, degenerada de quarta ordem que governa a evolução da camada de filme ao longo do tempo. Schwartz & Michaeledis [7] examinaram analiticamente e numericamente o problema do escoamento de um fluido viscoso num plano inclinado com uma porta de injeção, visando representar o escoamento de lava vulcânica. Porém, eles não levaram em consideração efeitos de tensão superficial e efeitos térmicos.

2.2

Equações adimensionalizadas

Na ausência de injeção, a equação (2-8) tem sido estudada e avaliada adimensionalmente por muitos pesquisadores, dando origem a diferentes números adimensionais. Schwartz [4] apresentou esta equação somente em função do número de Bond Bo,

$$Bo = \frac{\rho g L^2}{\sigma},\tag{2-12}$$

onde L é um comprimento característico (L = Lx como mostrado na Fig. 2.1). Kondic et al. [8] analisaram a equação só em função do número de capilaridade Ca,

$$Ca = \frac{\mu U}{\sigma},\tag{2-13}$$

onde U é a velocidade característica do fluido, usando uma escala de tempo em função de um comprimento capilar, $a = \sqrt{\sigma/\rho g}$, sendo que esta adimensionalização está limitada a valores pequenos de inclinação α . Myers [9] também analisou esta equação de forma adimensional em função de Bo e Ca sendo que este último parâmetro independe de a dada por Kondik et al.

As situações físicas discutidas neste capítulo serão modeladas com as equações na forma adimensional, sendo que para isso é importante definir alguns parâmetros característicos. Da equação (2-8) pode-se deduzir a existência de três escalas de tempo, T, distintas e que representam diferentes mecanismos físicos. Então é preciso definir o termo mais adequado para continuar com o processo de adimensionalização. A seguir mostramos as escalas de tempo e as velocidades características, U, correspondentes:

- 1. Escala de tempo $T = T_{\sigma}$ (para casos onde o efeito de σ é importante) $T_{\sigma} = 3\mu L/(\sigma\epsilon^3)$ e $U_{\sigma} = (\sigma\epsilon^3)/3\mu$,
- 2. Escala de tempo $T = T_{g1}$ (para casos onde o efeito de g1 é importante) $T_{g1} = 3\mu/(\rho g L \epsilon^3)$ e $U_{g1} = (\rho g L^2 \epsilon^3)/3\mu$,
- 3. Escala de tempo $T = T_{g2}$ (para casos onde o efeito de g2 é importante) $T_{g2} = 3\mu/(\rho g L \epsilon^2)$ e $U_{g2} = (\rho g L^2 \epsilon^2)/3\mu$,

como indicado no início deste capítulo, o problema a tratar é a interação de gotas de líquido. Nestas situações observa-se complexas topologias com grandes curvaturas. Nestes casos o efeito da tensão superficial torna-se importante. Portanto, a escala de tempo estará representada por $T = T_{\sigma} = 3\mu L/(\sigma\epsilon^3)$, semelhante ao caso utilizado no trabalho de Orchard [10], e esta depende das propriedades do fluido e da geometria do escoamento. As variáveis adimensionais utilizadas neste trabalho são as seguintes:

$$\bar{x} = \frac{x}{L}, \qquad \bar{y} = \frac{y}{L}, \qquad \bar{t} = \frac{t}{T}, \qquad \bar{h} = \frac{h}{H}, \qquad \bar{\nabla} = L\nabla \qquad \bar{\nabla}^2 = L^2\nabla^2$$

Desse modo, a equação (2-8) pode ser reescrita como:

$$\frac{H}{T}\frac{\partial\bar{h}}{\partial\bar{t}} = -\frac{\bar{\nabla}}{L} \cdot \left\{ H^3\bar{h}^3 \left(\frac{\sigma H}{3\mu} \frac{\bar{\nabla}}{L} \frac{\bar{\nabla}^2}{L^2} \bar{h} - \frac{\rho g H}{3\mu} \frac{\bar{\nabla}}{L} \bar{h} \cos\alpha + \frac{\rho g}{3\mu} \sin\alpha \mathbf{i} \right) \right\} + \Phi$$

$$\frac{\partial \bar{h}}{\partial \bar{t}} = -\bar{\nabla} \cdot \left\{ \bar{h}^3 \left(\frac{\sigma H^3 T}{3\mu L} \frac{\bar{\nabla}}{L} \frac{\bar{\nabla}^2}{L^2} \bar{h} - \frac{\rho g H^3 T}{3\mu L} \frac{\bar{\nabla}}{L} \bar{h} \cos \alpha + \frac{\rho g H^2 T}{3\mu L} \sin \alpha \mathbf{i} \right) \right\} + \frac{T}{H} \Phi$$
$$\frac{\partial \bar{h}}{\partial \bar{t}} = -\bar{\nabla} \cdot \left\{ \bar{h}^3 \left(\bar{\nabla} \bar{\nabla}^2 \bar{h} - \frac{\rho g L^2}{\sigma} \bar{\nabla} \bar{h} \cos \alpha + \frac{\rho g L^2}{\sigma} \frac{L}{H} \sin \alpha \mathbf{i} \right) \right\} + \frac{3\mu U L}{\sigma \epsilon^3 H} \frac{\Phi}{U}$$

A equação 2-8 na forma adimensional é:

$$\frac{\partial \bar{h}}{\partial \bar{t}} = -\bar{\nabla} \cdot \left\{ \bar{h}^3 \left(\bar{\nabla} \bar{\nabla}^2 \bar{h} - Bo \bar{\nabla} \bar{h} \cos \alpha + \frac{Bo}{\epsilon} \sin \alpha \mathbf{i} \right) \right\} + Ca \bar{\Phi}$$
(2-14)

Sendo, a taxa de injeção adimensional igual a:

$$\bar{\Phi} = \frac{3\Phi}{\epsilon^4 U} = \frac{3}{\epsilon^4 U} \frac{2\Gamma}{\pi L^2 \bar{R}_f^2} \left[1 - (\frac{\bar{r}_\phi}{\bar{R}_f})^2 \right] = \frac{2\bar{\Gamma}}{\pi \bar{R}_f^2} \left[1 - (\frac{\bar{r}_\phi}{\bar{R}_f})^2 \right],$$
(2-15)

sendo a vazão adimensional definida como:

$$\bar{\Gamma} = \frac{3\Gamma}{\epsilon^4 U L^2} \tag{2-16}$$

O termo $Ca\bar{\Phi}$ está representando a força de injeção de líquido na equação (2-14), que fisicamente também está ligado à pressão de injeção. Portanto, quanto maior o número capilar maior a pressão de injeção. Por comodidade, as variáveis adimensionais serão consideradas sem barra nas próximas seções.

2.3 Descrição da linha de contato dinâmica

A equação (2-14) é definida somente no domínio onde se localiza o líquido injetado. A área do plano molhado pelo líquido muda com o tempo e é desconhecida a *priori*. A linha que contorna esta área é conhecida como linha de contato. Quando o líquido em questão escoa sobre uma superfície sólida, deslocando o gás que está em volta dele, a linha é definida como linha de contato dinâmica (LCD). E é nesta situação que encontramos dois problemas fundamentais para descrevê-la e representá-la matematicamente. O primeiro, está associado ao uso da condição de não deslizamento entre o líquido e o sólido o que leva a uma singularidade nas tensões ao longo da linha de contato (ver Huh & Scriven [11] e Dussan & Davis [12]). O segundo problema é relacionado ao modelo do ângulo de contato do líquido com a superfície sólida ao longo da LCD. Uma extensa discussão em relação aos problemas teóricos e experimentais associados ao ângulo de contato dinâmico é abordada no trabalho de DeGennes [13]. Nos trabalhos de Schwartz & Tejeda [14], Hoffman [15] e Chen [16] são mencionados que existem muitas evidências experimentais da relação entre o valor de ângulo de contato dinâmico e a velocidade da LCD.

Num contexto geral, o problema da descrição matemática do molhamento e avanço da LCD pode ser separado em dois grupos: superfícies parcialmente molháveis pelo líquido e superfícies perfeitamente molháveis pelo líquido. No primeiro caso ($\theta_{LCD} > 90^{\circ}$), o problema pode ser resolvido pela relaxação da condição de contorno de não deslizamento na LCD, como mostrado na Fig. 2.3, ou pela incorporação do efeito de longo alcance das forças intermoleculares de van der Walls (*disjoining pressure*^a). O primeiro critério leva a introduzir um novo termo no pré-fator h^3 , enquanto no segundo critério se adiciona um outro termo (Π) não linear de segunda ordem na equação (2-14) ([17, 18]). Ambos modificam efetivamente o comportamento do escoamento na vizinhança da linha de contato.

No caso de fluidos que molham completamente a superfície ($\theta_{LCD} < 90^{\circ}$) existem evidências experimentais indicadas por Ludviksson & Lightfoot [19] e Hansen & Toong [20] que motivam a inclusão de um filme precursor microscópico na frente da linha de contato aparente. Esta abordagem é consistente com o modelo de van der Waals no caso de uma pressão de separação favorável, como discutido por DeGennes [13] e Eres et al. [21].

Diez et al. [22] realizaram uma análise comparativa do modelo com filme precursor e do modelo com relaxação da condição de não deslizamento. A principal conclusão do trabalho foi que os resultados obtidos pelos dois modelos são semelhantes, mas o modelo de filme precursor apresenta um melhor desempenho computacional. O presente trabalho aborda o caso de superfície completamente molhada pelo líquido fazendo uso do modelo de filme precursor.

O valor da espessura do filme precursor ilustrado na Fig. 2.3, deve ser o menor possível para evitar problemas de resultados defasados no tempo, como mencionado por Diez e Kondic [8] que interpretam estes deslocamentos como resultado da diminuição da taxa de dissipação viscosa para espessuras grandes do filme precursor. Como resultado, obtém-se incremento da velocidade da frente de avanço no início da coalescência. Porém, este valor de espessura não

^afrequentemente encontra-se este mecanismo denominado como pressão de separação ou desligamento, que seria uma tradução literal da expressão em inglês, *disjoining pressure*.

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana 36



Figura 2.3: Esboço do perfil de um líquido perto da LCD e a distribuição parabólica do vetor de velocidade $u_x(z)$ para (a) método do filme precursor e (b) método de relaxação. Nota-se que em (b) a velocidade $u_x(z)$ não é zero na superfície (deslizamento).

deve atingir a interface molecular em que efeitos de van der Walls pode-se tornar dominante. Para garantir que a aproximação seja válida precisa-se que a espessura de filme precursor de forma dimensional esteja acima de 1μ m.

2.4 Modelagem computacional

A equação (2-14) é de primeira ordem no tempo e de quarta ordem no espaço. Além disso, o pré-fator^b h^3 faz com que a equação seja não linear. Sempre que existir uma pequena variação na espessura do filme, esta não linearidade influenciará a solução. Esta equação têm características degenerativas pela presença deste pré-fator. A equação se degenera, i.e. o pré-fator $h^3 \rightarrow 0$, quando h assume valores pequenos (dentro do limite do contínuo). A existência de soluções da equação (2-14) foi provada por Giacomelli [23].

O Método de Diferenças Finitas (MDF) será utilizado para discretizar o domínio do escoamento e aproximar as derivadas parciais apresentadas na equação (2-14). A discretização da equação não deve ser realizada de forma

 $^{^{\}rm b}{\rm conhecido}$ também como termo não linear difusivo

arbitrária, deve ser realizada analisando sua exatidão, estabilidade e eficiência (Michael Heath, [24]).

2.4.1 Discretização espacial

O domínio numérico é um retângulo definido por $x \in [0, L_x]$ e $y \in [0, L_y]$ que é dividido em $Ntot = Nx \times Ny$ células retangulares como mostrado na Fig. 2.4. Portanto, os pontos nodais são discretizados assim $x_i = i\Delta x, i = 0, ..., Nx$ e $y_j = j\Delta y, j = 0, ..., Ny$, onde $\Delta x = L_x/Nx$ e $\Delta y = L_y/Ny$. A numeração dos nós na malha em forma euleriana é definida por $k = i - (j - 1) \times Nx$ e para representar o estêncil de 13 pontos (lagrangiana) definimos irh = (i, j)como sendo o índice central e as letras R, L, T, B indicam as posições direita, esquerda, acima e abaixo, respectivamente, em relação ao índice central. As outras letras RT, RB, LT, LB indicam as relações entre as posições acima indicadas como representadas na Fig. 2.4. Os 13 pontos servem para avaliar as derivadas em torno de cada nó da malha.



Figura 2.4: Malha típica mostrando o estêncil formado por 13 pontos em torno do nó k que serão utilizados para avaliar as derivadas de maior ordem.

A discretização espacial da equação (2-14), utilizando diferenças finitas centrais, nos leva a obter um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO), que descreve a evolução da espessura h_k de cada ponto k em função do tempo.

$$\frac{\partial h_k}{\partial t} - Ca\Phi = -\sum_{m=1}^7 f_k^m = \underbrace{4termos}_{\sigma} + \underbrace{2termos}_{g_y} + \underbrace{1termo}_{g_x}, \qquad (2-17)$$
$$k = 1, \dots, Nx \times Ny$$

Os valores de f_k envolvem h_{irh} e também os outros valores de h ao redor do ponto irh para avaliar as derivadas requeridas. Um tratamento especial para cada termo é necessário devido a alta ordem da equação. É fácil verificar que uma escolha ingênua, por exemplo, do uso das diferenças centrais poderia levar a computar um grande número de pontos vizinhos a irh. Para uma equação de quarta ordem é possível utilizar um estêncil de 25 pontos (k = iL3, iL2, iL1, irh, iR1, iR2, iR3, iT3, iT2, iT1, ... etc). No presente trabalho utiliza-se um estêncil com poucos pontos não somente pela simplicidade e desempenho computacional, mas também para evitar a complicação da avaliação nas condições de contorno. Dessa forma a discretização foi realizada utilizando somente um estêncil de 13 pontos, conservando ainda uma correta aproximação de segunda ordem.

2.4.2 Termo de tensão superficial

Expandindo o primeiro termo do lado direito da Eq. (2-14), que representa a força de tensão superficial, temos:

$$\nabla \cdot \left\{ D(h) \left(\nabla \nabla^2 h \right) \right\} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(h) \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D(h) \frac{\partial^3 h}{\partial y^3} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left(D(h) \frac{\partial^3 h}{\partial y^2 \partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D(h) \frac{\partial^3 h}{\partial x^2 \partial y} \right), \quad (2-18)$$

em que $D(h) = h^3$ é o coeficiente difusivo. Este coeficiente é positivo se h for positivo e torna-se desprezível quando h atinge valores próximos da escala molecular, isto é, $h \sim h_{\lambda}$. Em que h_{λ} representa o limite coloidal. Lembrando que para $h > h_{\lambda}$ a lubrificação é dominante e para $h \le h_{\lambda}$ os efeitos da força de van der Walls são dominantes. Portanto, a equação (2-14) se degenera quando a espessura $h \to h_{\lambda}$. Por este motivo, estes tipos de equações são conhecidos como equações parabólicas degeneradas de quarta ordem.

Uma escolha arbitrária para a discretização do coeficiente difusivo $D_k = h_{i+1/2}^3$ entre os pontos x_i e x_{i+1} poderia levar a obter soluções de espessuras negativas em um tempo finito, o que claramente não é físico, pela presença de altos gradientes de h perto da LCD, como mostrado na Fig. 2.5. Isto pode ocorrer apesar de ser possível provar a existência de soluções não negativas dada uma condição inicial positiva (ver J.W. Barrett [25]). Recentemente, um esquema que preserva positividade foi proposto por Bertozzi ([26, 27]), sendo conhecido como *Positive Preserving Scheme* (PPS). Neste esquema o coeficiente de difusão discretizado é definido como:



Figura 2.5: Presença de altos gradientes de h perto da LCD pelo uso do modelo de filme precursor.

$$D_k = \begin{cases} \frac{h_{iR1} - h_{irh}}{g_{iR1} - g_{irh}} & h_{iR1} \neq h_{irh}, \\ D(h_{irh}) & h_{iR1} = h_{irh} \end{cases}$$

em que g(h) é obtida da seguinte função:

$$g(h) = \int \frac{dh}{D(h)} = \int \frac{dh}{h^3} = -\frac{h^{-2}}{2}$$

Dessa forma o coeficiente difusivo nas duas direções é definido como:

$$D_k^{(x)} = 2\frac{h_{irh}^2 h_{iR1}^2}{h_{irh} - h_{iR1}}, \qquad D_k^{(y)} = 2\frac{h_{irh}^2 h_{iT1}^2}{h_{irh} - h_{iT1}}$$

Na Fig. 2.6, pode-se visualizar onde são avaliados os coeficientes $D_k^{(x)}$, $D_{k-1}^{(x)}$, $D_k^{(y)} \in D_{k-1}^{(y)}$. Este esquema produz uma solução numérica que preserva positividade quando a condição inicial também for positiva.



Figura 2.6: Esquema que identifica a localização dos coeficientes difusivos.

2.4.3

Discretização dos termos gravitacionais

O desempenho de um esquema é usualmente determinado pela discretização do termo de mais alta ordem, fazendo com que a discretização dos termos de baixa ordem não requeiram tratamento especial. Porém, a discretização deve sempre preservar as propriedades conservativas da equação de continuidade.

O segundo termo do lado direito da equação (2-14), que representa a força gravitacional (gradiente de pressão hidrostático), é tratado da seguinte forma:

$$\nabla \cdot \{G(h)\nabla h\} = \frac{\partial}{\partial x} \left(G(h)\frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(G(h)\frac{\partial h}{\partial y}\right), \qquad (2-19)$$

onde $G(h) = h^3$. A discretização utilizando diferenças finitas é dada por:

$$G_k^{(x)} = \frac{h_{irh}^3 + h_{iR1}^3}{2}, \quad G_k^{(y)} = \frac{h_{irh}^3 + h_{iT1}^3}{2}, \quad (2-20)$$

estes coeficientes estão localizados no meio das faces como no caso de D_k (ver figura 2.6).

O terceiro termo da equação (2-14), que representa a força gravitacional na direção do escoamento, é definida como:

$$\nabla \cdot \left\{ h_k^3(\mathbf{i}) \right\} = \frac{\partial K(h)}{\partial x} \tag{2-21}$$

A discretização é realizada conforme abaixo:

$$K_{k}^{(x)} = \left(\frac{h_{irh}^{2} + h_{iR1}^{2}}{2}\right) \left(\frac{h_{irh} + h_{iR1}}{2}\right)$$
(2-22)

para não eliminar a influência de h do nó central irh.

2.4.4 Discretização do tempo

A integração numérica da espessura do filme em função do tempo é considerada puramente explícita quando os valores das variáveis dependentes no tempo atual são calculados usando somente valores no tempo anterior. Este tipo de integração é a implementação mais simples do Método de Diferenças Finitas (MDF). Infelizmente, esses esquemas requerem um passo de tempo muito pequeno para manter a solução estável e consequentemente é ineficiente computacionalmente. Para melhorar este inconveniente, Peaceman & Rachford[28] e Douglas[29] sugeriram um método de direções alternadas para resolver a equação de transferência de calor 2D transiente. Neste esquema, as derivadas em x são processadas implicitamente e as derivadas em y explicita-

mente para o primeiro passo do tempo, $\Delta t/2$. Logo depois, no passo do tempo seguinte, as derivadas em y são consideradas implicitamente e x explicitamente. Este método é incondicionalmente estável, como para a equação de calor transiente, e precisa da solução de um sistema de equações tridiagonais para cada metade do passo de tempo. Infelizmente, este esquema não é condicionalmente estável para equações de mais alta ordem, como as equações biharmônicas (quarta ordem). Um método denominado esquema de correção estabilizante foi usado por Conte[30] e Conte&Dames[31] para resolver a equação biharmônica. Este esquema é incondicionalmente estável e oferece uma promissora opção para eliminar as limitações do passo do tempo. Outro esquema similar para a solução numérica da equação biharmônica foi proposto por Ianenko [32] e adaptado por Eres[33], denominado como ADI (Alternating Direction Implicit), que não é mais do que uma extensão do método alternado para equações de quarta ordem. Uma característica do método ADI é que o termo não linear difusivo é avaliado num nível de tempo anterior. Um método implícito foi desenvolvido por Diez & Kondic [8] que fazem uso do método de Crank-Nicholson (implícito, $O(\Delta t^n)^2$) que elimina a limitação do passo do tempo, para mais detalhes ver [34]. Estes métodos não eram aplicáveis nas décadas anteriores pela limitação de capacidade de memória necessária para armazenar a matriz dos coeficientes e sua inversa. Este último método implícito foi aplicado no presente trabalho.

Nos esquemas implícitos existe o método conhecido como esquema- θ_{CN} que usa os valores de f_k na equação (2-17) não somente no tempo t mas também no tempo $t + \Delta t$, como mostrado a seguir:

$$\frac{h_k^{n+1} - h_k^n}{\Delta t^n} + \theta_{CN} f_k^{n+1} + (1 - \theta) f_k^n = 0, \qquad (2-23)$$

onde $0 \leq \theta_{CN} \leq 1$ e *n* representa o nível de tempo t^n . Quando $\theta_{CN} = 1/2$ estamos diante do esquema Crank-Nicolson que é de segunda ordem $(O(\Delta t^n)^2)$ no tempo e incondicionalmente estável. Este método resulta da aplicação da regra trapezoidal a um sistema semidiscreto de EDOs (que alternativamente significaria à média dos métodos explícitos e implícitos).

A grande estabilidade destes métodos implícitos permite a utilização de passos de tempo muito maiores que aqueles permitidos aos métodos explícitos ([24]). Ainda assim, precisa-se considerar algumas questões sobre o valor do passo de tempo, Δt , a ser utilizado. A condição mais importante é produzir resultados de boa precisão e outro requerimento é que a solução tem que ser estritamente positiva. Diez & Kondic [8] indicam que valores muito elevados do passo do tempo poderiam levar a obter de forma errônea soluções próximas de zero. Eles apresentam uma expressão para avaliar o valor máximo do erro relativo, o qual é dado por: Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana \$42\$

$$\mathcal{E} = \max_{1 \le k \le Ntot} \left[\frac{2\Delta t^n}{\Delta t^{n-1}} \frac{\Delta t^{n-1} h_k^{n+1} + \Delta t^{n-1} h_k^{n+1} - (\Delta t^{n-1} - \Delta t^n) h_k^n}{(\Delta t^{n-1} - \Delta t^n) h_k^n} \right] \quad (2-24)$$

Sendo que a solução h_{k+1}^n , obtida utilizando um passo do tempo Δt^n , é aceita sempre que \mathcal{E} seja menor a uma certa tolerância Tol (tipicamente $Tol = 10^{-2}$ ou 10^{-3}), caso contrário o passo do tempo é reduzido e uma nova iteração é executada.

Como a análise involve a evolução da espessura ao longo do tempo, é necessário estabelecer condições iniciais $h(x, y, 0) = h^0$. No início, a superfície encontra-se sem fluido e como estamos utilizando o modelo de filme precursor, o valor de h^0 ao longo do domínio irá se tornar o valor da espessura do filme precursor H_F .

2.4.5 Condição de contorno

Neste caso, de acordo com a física do problema, deve-se considerar a condição de contorno de ausência de fluxo nas fronteiras do domínio. A descrição matemática deste tipo de condição de contorno é dada por uma condição de contorno do tipo Neumann ou de segundo tipo. A primeira e terceira derivada normal, a cada fronteira, da variável dependente é nula, assim:

$$\frac{\partial h}{\partial y} = \frac{\partial^3 h}{\partial y^3} = 0 \quad \text{em} \quad y = 0, y = L_y \quad 0 \le x \le L_x \tag{2-25}$$

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} = 0 \quad \text{em} \quad x = 0, x = L_x \quad 0 \le y \le L_y \tag{2-26}$$

Para discretizar este tipo de condição pode-se utilizar duas filas de células fictícias fora do domínio, que são espelhos das células internas adjacentes. Motivo pelo qual esta condição de contorno também é conhecida como reflexão simétrica, sendo que a linha de simetria é formada pelo perímetro do domínio. A figura (2.7) ilustra os nós fictícios e a aplicação desta condição de simetria.

$$h_{L_y+\delta}^n = h_{L_y-\delta}^n, \qquad h_{L_x+\delta}^n = h_{L_x-\delta}^n, \tag{2-27}$$

onde δ é igual a 1 ou 2 nós. Um procedimento similar é feito para os outros dois lados restantes. Com este procedimento criou-se uma moldura retangular contida ao redor do domínio real.

2.4.6 Método da solução

A discretização da equação (2-17) a cada passo de tempo, leva a formar um sistema de *Ntot* equações algébricas não-lineares. O método usado com

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme 43fino sobre uma placa plana



Figura 2.7: Avaliação da condição de contorno com aplicação de nós fictícios.

frequência para resolver este tipo de equações é o método de Newton (ou Newton Rhapson como mencionado no trabalho de Tjalling J. Ypma [35]). Este método basicamente funciona da seguinte maneira:

O sistema de equações resultantes da discretização pode ser representado de forma vetorial(notação compacta) como:

$$\mathbf{R}(\mathbf{h};\mathbf{b}) = \vec{0},\tag{2-28}$$

onde **R** é o vetor de resíduos associado a cada nó k, **h** representa o vetor solução (incógnitas do problema) e **b** é o vetor dos parâmetros do qual o problema depende. A equação anterior é resolvida de forma iterativa por:

$$\vec{J}\delta\vec{h} = -\vec{R}(\vec{h}^r; \vec{b}),\tag{2-29}$$

$$\delta \vec{h} = \vec{h}^{r+1} - \vec{h}^r \tag{2-30}$$

onde r representa o passo iterativo. **R** é avaliado em \mathbf{h}^r , **J** é a matriz jacobiana cujos componentes são dados por:

$$\mathbf{J}_{i,j} = \left(\frac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial \mathbf{h}_j}\right)^r,\tag{2-31}$$

Cada linha desta matriz tem ao menos 13 elementos não nulos. As derivadas

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana 44

dos coeficientes não lineares, devido aos termos de tensão superficial são:

$$\frac{\partial D_k^{(x)}}{\partial h_{irh}} = \frac{-D_k^{(x)}}{h_{iR1} - h_{irh}} \left(1 - \frac{h_{iR1}^3}{D_k^{(x)}} \right),$$

$$\frac{\partial D_k^{(x)}}{\partial h_{iR1}} = \frac{D_k^{(x)}}{h_{iR1} - h_{irh}} \left(1 - \frac{h_{irh}^3}{D_k^{(x)}} \right),$$

$$\frac{\partial D_k^{(y)}}{\partial h_{irh}} = \frac{-D_k^{(y)}}{h_{iT1} - h_{irh}} \left(1 - \frac{h_{iT1}^3}{D_k^{(y)}} \right),$$

$$\frac{\partial D_k^{(y)}}{\partial h_{iT1}} = \frac{D_k^{(y)}}{h_{iT1} - h_{irh}} \left(1 - \frac{h_{irh}^3}{D_k^{(y)}} \right),$$
(2-32)

As derivadas dos coeficientes dos termos gravitacionais foram calculadas de forma análoga.

$$\begin{split} \frac{\partial G_k^{(x)}}{\partial h_{irh}} &= \frac{(h_{iR1}^2 + h_{iR1}h_{irh} + h_{irh}^2)}{2}, \\ \frac{\partial G_k^{(y)}}{\partial h_{irh}} &= \frac{(h_{iT1}^2 + h_{iT1}h_{irh} + h_{irh}^2)}{2}, \\ \frac{\partial K_k^{(x)}}{\partial h_{irh}} &= \frac{-K_k^{(x)}}{h_{iR1} - h_{irh}} \left(1 - \frac{h_{iR1}^3}{K_k^{(x)}}\right), \\ \frac{\partial K_k^{(x)}}{\partial h_{iR1}} &= \frac{K_k^{(x)}}{h_{iR1} - h_{irh}} \left(1 - \frac{h_{irh}^3}{K_k^{(x)}}\right), \end{split}$$

2.4.7 Critérios de convergência

A cada passo do tempo o procedimento iterativo é inicializado com um valor inicial estimado do método de Newton e continua até que a equação da notação compacta (2-28) seja aproximadamente satisfeita.

O método de Newton converge quadraticamente quando a estimativa inicial está perto da solução pela característica do raio de convergência deste método. A cada iteração do método de Newton, a matriz jacobiana é armazenada em formato esparso e resolvida mediante o método iterativo GM-RES (Generalized Minimal RESidual method) desenvolvido por Yousef Saad & Martin Schultz [36]. Subrotinas da biblioteca Sparskit foram utilizadas para a aplicação deste método iterativo em formato esparso. Para garantir uma boa estimativa inicial usa-se uma extrapolação linear de duas soluções anteriores e o passo do tempo Dt é ajustado de tal forma a manter as iterações de Newton dentro de uma dada faixa, i.e. se para um passo de tempo Dt o método de Newton converge em poucas iterações então o passo do tempo para o próximo nível de tempo é dobrado. Por outro lado, se o número de iterações de Newton é grande então o passo de tempo é divido pela metade. O critério de convergência adotado foi em relação a norma euclidiana L_2 do vetor resíduo, isto é, as iterações devem ser repetidas até:

$$\|\vec{R}\|_2 \le \xi,\tag{2-33}$$

onde ξ define a tolerância admitida.

Neste trabalho o valor da tolerância admitida foi estipulada em $\xi = 10^{-11}$.

2.5 Resultados com uma porta de injeção

Inicialmente, iremos nos concentrar no caso da injeção de líquido utilizando somente uma porta de injeção, como mostrado na figura 2.8.



Figura 2.8: O escoamento de filme fino por injeção em superfície plana com os principais parâmetros adimensionais

Antes da análise dos resultados será necessário mencionar alguns parâmetros adimencionais que caracterizam o escoamento:

- Posição da frente de avanço, $X_f = xf/L$
- Distância transversal máxima, $Y_{max} = ymax/L$

- Espessura adimensional do filme precursor, $H_f = H_F/L$
- Raio adimensional da porta de injeção, $\bar{R}_f = R_f/L$
- Vazão adimensional, $\Phi = 2\bar{\Gamma}/U\pi \bar{R}_f^2$; $\bar{\Gamma} = 3\Gamma/UL^2$

O comprimento característico, L, foi o comprimento da placa L_x . Os pontos representados graficamente foram obtidos da seguinte maneira: para um determinado tempo t, o valor de X_f representa a distância entre o centro da porta de injeção (x_{cp1},y_{cp1}) e a posição mais afastada na direção x. Y_{max} representa a distância entre a linha paralela ao eixo y que passa pelo centro da porta de injeção (x_{cp1},y_{cp1}) com a posição mais afastada do domínio líquido na direção y, conforme indicado na Fig. 2.8.

Para definir a malha é necessário realizar um teste de malha para assegurar que a solução obtida não dependa do número de pontos da malha, pois existe um determinado número de pontos a partir do qual o resultado não varia.

Antes de analisar os resultados é necessário validar a metodologia implementada, comparando os resultados obtidos com aqueles apresentados na literatura para casos particulares do problema estudado.

2.5.1 Teste da malha

A resolução da malha, definida pelo tamanho dos espaçamentos dos pontos nodais, determina a precisão da aproximação das propriedades físicas ou da variável em questão, h neste caso. Por isso é muito importante o processo de escolha da malha adequada no tratamento de todo e qualquer problema numérico para que se tenha uma boa precisão dos resultados.

Uma boa estratégia para determinar o nível de refinamento necessário para obter resultados numéricos independentes do tamanho da malha utilizada é obter uma solução com uma malha grosseira e progressivamente reduzir o espaçamento entre os pontos até que a diferença entre os resultados obtidos com duas malhas seja menor que certo valor estabelecido. Porém, cada vez que o espaçamento da malha for reduzido, o número dos pontos necessários para cobrir o domínio inteiro será incrementado, aumentando-se consideravelmente o tempo computacional para se obter a solução para cada passo do tempo.

A escala de tempo numérico foi escolhida tendo em consideração que $\Delta t/T_{\sigma} \ll 1$ assim os valores variam de $\Delta t \sim <0,001; 0,01 >$.

O teste da malha foi realizado utilizando vários graus de refinamento. O número dos nós da malha varia desde 3600 até 22500, como mostrado na tabela 2.1. Todas as malhas são uniformes e, além disso, o domínio é um quadrado, i.e.

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana 47



Figura 2.9: Teste de malha com Bo = 172,05; Ca = 0,33; $H_f = 1,67 \times 10^{-3}$; $\Phi = 1,8$; $R_f = 1,67 \times 10^{-2}$ e considerando o ângulo $\alpha = 15^{o}$. Critério de passo de tempo: a) Dt variável.

 $L_x = L_y$. Assim, para todos os casos tem-se $\Delta x = \Delta y$. A figura 2.9 apresenta os resultados da evolução da frente de avanço (X_f) e da distância transversal máxima (Y_{max}) para 3 malhas com $Bo = 172, 05; Ca = 0, 33; H_f = 1, 67 \times 10^{-3}; \Phi = 1, 8; R_f = 1, 67 \times 10^{-2}$ e considerando o ângulo de inclinação do plano $\alpha = 15^o$.

Analisando os resultados da evolução de X_f pode-se observar que para um refinamento dado pela malha M1 obtém-se uma tendência diferente dos resultados obtidos com as malhas M2 e M3, que apresentam um mesmo resultado, como mostrado na figura 2.9. No caso de Y_{max} , pode-se observar que as malhas M2 e M3 não apresentam uma diferença considerável nos resultados. No entanto, a malha M2 irá obter resultados satisfatórios com um menor custo computacional, quando comparado ao custo com a malha M3.

Investigou-se também a eficiência do uso do passo de tempo variável, como descrito no item 2.4.7. Comparou-se os resultados obtidos com as malhas $M1b \ e \ M2b$, considerando um passo de tempo constante, com os resultados das malhas $M1 \ e \ M2$, utilizando um passo de tempo variável. Analisando a figura 2.10 observou-se que o modelo numérico com a malha refinada capta os mesmos resultados independente do critério do passo de tempo. Já a malha grosseira apresenta dependência da solução no passo de tempo, indicando que não é adequada para a análise.

2.5.2

Efeito da espessura do filme precursor

Como está sendo aplicado o modelo de filme precursor, que define a linha de contato dinâmica, o parâmetro numérico H_f está sendo utilizado e é importante analisar a sua influência nos resultados. No trabalho de Diez e Kondic [8] se menciona os critérios de escolha do valor deste parâmetro. Na figura 2.11 pode-se visualizar a influência do parâmetro H_f . Os resultados X_f neste gráfico mostram um deslocamento no tempo, mantendo porém uma boa concordância qualitativa. Quanto menor o valor deste parâmetro maior será o tempo computacional utilizado para avaliar os fortes gradientes de espessura h perto da linha de contato dinâmica. A diminuição do parâmetro H_f deve ser proporcional ao refinamento da malha, e evitando atingir valores próximos da escala molecular.

2.5.3 Validação

A melhor maneira de se validar modelos e códigos numéricos derivados destes modelos é comparando os resultados obtidos com resultados experimentais ou soluções analíticas. Existem na literatura soluções assintóticas de espalhamento de gotas de líquido sobre um plano horizontal, $\alpha = 0^{\circ}$, com e

| rabela 2.1. Casos utilizados para o teste da mama | | | | | | |
|---|------------------|---------|-----------------------|-------|----------------------|--|
| Malha | \ddagger Nós x | # Nós y | $\Delta x = \Delta y$ | Total | Passo do tempo | |
| <i>M</i> 1 | 60 | 60 | 0,016 | 3600 | Δt variável | |
| M1b | 60 | 60 | 0,016 | 3600 | Δt constante | |
| M2 | 100 | 100 | 0,010 | 10000 | Δt variável | |
| M2b | 100 | 100 | 0,010 | 10000 | Δt constante | |
| M3 | 150 | 150 | 0,006 | 22500 | Δt variável | |

Tabela 2.1: Casos utilizados para o teste da malha

sem injeção. A linha de contato da gota avança seguindo uma lei de potência $x_f \sim t^m$, onde x_f é a frente de avanço, t o tempo e m é o expoente da lei de potência.

Para o caso do espalhamento de uma gota de líquido sem considerar a injeção, Ehrhard&Davis [6] apresentam valores típicos para m em função das forças que predominam no escoamento (ST quando Bo < 1 e define a maior influência das forças de tensão superficial e G quando Bo > 1 sendo as forças gravitacionais as de maior predominância). A tabela 2.2 mostra os valores de m obtidos analiticamente por solução assintótica (Ehrhard&Davis)



Figura 2.10: Teste de malha com Bo = 172, 05; Ca = 0, 33; $H_f = 1, 67 \times 10^{-3}$; $\Phi = 1, 8$; $R_f = 1, 67 \times 10^{-2}$ e considerando o ângulo $\alpha = 15^o$. Critério de passo de tempo: b) Dt constante e variável.

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana $50\,$



Figura 2.11: Teste do parâmetro H_f com Bo = 172,05; Ca = 0,33; $\Phi = 1,8$; $R_f = 1,67 \times 10^{-2}$ e considerando o ângulo $\alpha = 15^o$.

e numericamente com o modelo apresentado neste trabalho, onde em todos os casos usou-se a malha $M2 = 100 \times 100$ e passo de tempo variável. A condição inicial utilizada foi uma gota líquida semi-esférica de raio Rg/L = 0,125 e considerando uma espessura de filme precursor de $H_f = 1,67 \times 10^{-3}$.

Tabela 2.2: Comparação do expoente *power law*, m, entre resultados analíticos e numéricos do espalhamento de uma gota de líquido (volume constante):

| Numérico (m) | Teórico(m) | Força Dominante |
|----------------|------------|-----------------|
| 0,11 | 0, 1 | ST |
| 0,124 | 0,125 | G |

Holdich et al.(2006) [37] analisaram o espalhamento de líquido por meio de uma porta de injeção circular de raio R_f , e apresentaram os valores de mdeduzidos de forma analítica por meio de solução assintótica, como mostrado na tabela 2.3.

Pode-se observar um erro relativo de 1,75% para *Bo* pequenos e 5,2% para *Bo* grandes representando assim uma boa concordância entre os expoentes obtidos numericamente e os valores teóricos, indicando que a metodologia proposta é adequada.

2.5.4 Efeito do parâmetro alpha

Na equação (2-14) o termo gravitacional está dividido em dois componentes: um na direção do escoamento $(\sin \alpha)$ e um perpendicular $(\cos \alpha)$. Por-

| Força | Taxa de Injeção | Numérico | Teórico |
|-----------|------------------|----------|---------|
| Dominante | $\Gamma(cm^3/s)$ | (m) | (m) |
| | 0,1 | 0,405 | |
| ST | 1,0 | 0,407 | 0,4 |
| | 10, 0 | 0,407 | |
| | 0, 1 | 0,474 | |
| G | 1, 0 | 0,485 | 0,5 |
| | 10, 0 | 0,489 | |

Tabela 2.3: Comparação do expoente *power law*, m, entre resultados analíticos e numéricos considerando injeção contínua de líquido:

tanto, podemos pressupor que uma mudança no ângulo de inclinação α levará à padrões de escoamento diferentes.

Os resultados numéricos apresentados nos gráficos da Fig.2.12 mostram a evolução de X_f e Y_{max} para diferentes valores de α considerando constantes os seguintes parâmetros: Bo = 174, 24; Ca = 0, 33; $Hf = 1, 67 \times 10^{-3}$; $\Phi = 3, 45$; $R_f = 1, 67 \times 10^{-2}$. No gráfico de X_f , em função do tempo adimensional (t), pode-se observar que para atingir uma distância de $X_f = 0, 80$, ou seja, 80% do domínio L_x estabelecido, utilizando o parâmetro $\alpha = 15^{\circ}$, é necessário um tempo aproximado de t = 18; no de $\alpha = 30^{\circ}$, o tempo é reduzido para t = 12, 5. Para $\alpha = 60^{\circ}, t = 8, 8$. Outra redução do tempo, não tão acentuada, é obtida para $\alpha = 75^{\circ}$. Pode-se notar que entre $\alpha = 75^{\circ}$ e $\alpha = 90^{\circ}$ a variação do tempo não é significativa, $t \sim 8$.

Comportamento oposto ocorre para Y_{max} . Observa-se que quando o parâmetro α aumenta, o valor de Y_{max} diminui. Para α menores o líquido injetado se espalha mais rapidamente ao longo da placa. Por exemplo, para t = 20 alcançamos um $Y_{max} = 0,5$ com $\alpha = 15^{\circ}$ e com $\alpha = 90^{\circ}$, o valor de $Y_{max} = 0,42$.

2.5.5 Efeito da vazão de injeção

Visando analisar a influência do termo de injeção no escoamento, foram testados quatro valores para o parâmetro Φ : (a) 3,45, (b) 6,9, (c) 13,8; (d) 20,7. Os outros parâmetros foram mantidos fixos: Bo = 174,24, Ca = 0,33, $H_f = 1,67 \times 10^{-3}, R_f = 1,67 \times 10^{-2}$. Como o processo de injeção ocorre na direção normal ao plano, o tempo calculado no início da injeção não necessariamente estará refletindo o tempo real, porque num pequeno intervalo de tempo o escoamento ocorre na direção z, onde o modelo matemático não descreve o problema de forma adequada. O modelo só passa a ser adequado quando o escoamento ocorre principalmente na direção paralela ao plano

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana 52



Figura 2.12: Resultado numérico mostrando o efeito do α considerando os seguintes parâmetros $\Phi = 3, 45$; Bo = 174, 24; Ca = 0, 33; $H_f = 1, 67 \times 10^{-3}$; $R_f = 1, 67 \times 10^{-2}$

inclinado. Para comparar os resultados para diferentes vazões de injeção, nos gráficos X_f e Y_{max} em função do tempo, utilizou-se a mesma escala de tempo, como mostrado no gráfico 2.13. Porém, na sequência dos gráficos de Y_{max} vs tos pontos plotados estão limitados ao tempo, onde X_f é atingido a uma dada taxa de injeção, Φ , e um dado ângulo de inclinação α .

Os resultados numéricos mostram que a velocidade de propagação da frente da gota aumenta com a vazão de injeção. Analisando a parte linear no gráfico X_f vs t podemos deduzir a velocidade média de avanço, V_f , da gota injetada definida por $V_f = DX_f/Dt$. A velocidade média em função do parâmetro α para diferentes vazões de injeção é apresentada na Fig. 2.14. Podese observar que o mínimo valor de α utilizado foi 15° e que a velocidade V_f se incrementa conforme α aumenta até uma velocidade máxima atingida em $\alpha = 90°$ como esperado.



Figura 2.13: Comparação de resultados em função da vazão de injeção para um fluido com Bo = 174, 24; Ca = 0, 33; $H_f = 1, 67 \times 10^{-3}$; $R_f = 1, 67 \times 10^{-2}$ para diferentes $\alpha = 15^o$; 30^o ; 60^o ; 75^o e 90°. (a) 3, 45, (b) 6, 9, (c) 13, 8; (d) 20, 7

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana 54



Figura 2.14: Gráfico da velocidade media em função do parâmetro alpha para um fluido com Bo = 174, 24; Ca = 0, 33; $H_f = 1, 67 \times 10^{-3}$; $R_f = 1, 67 \times 10^{-2}$.

2.5.6 Efeito do Bo

Agora apresentaremos resultados para diferentes números de bond Bo, como mostrado na tabela 2.4 para valores representativos de $\alpha = 15^{\circ}$. Os resultados mostrados na figura 2.15 ilustram os perfis de evolução tanto na direção x quanto na direção y, para os casos quando as gotas formadas atingem o mesmo valor da frente de avanço X_f .

Tabela 2.4: Valores típicos utilizados para avaliar o efeito do número de Bond, Bo

| Bo | Ca | $\alpha(^{o})$ | Φ | $R_f(\times 10^{-2})$ |
|-------|------|----------------|-----|-----------------------|
| 3,924 | 0,33 | 15 | 2,2 | 1,67 |
| 39,24 | 0,33 | 15 | 2,2 | $1,\!67$ |
| 392,4 | 0,33 | 15 | 2,2 | $1,\!67$ |
| 39240 | 0,33 | 15 | 2,2 | $1,\!67$ |

Para valores pequenos de Bo nota-se que o fluido não apresenta tendência de escoamento na direção preferencial do plano inclinado, somente espalhamento radial, porque nestes casos a força capilar é dominante e tenta manter fixa a forma da gota que está sendo injetada. Porém, para Bo = 39,24 a forma da superfície da gota muda deixando de ter o espalhamento radial. Quando é aumentado o valor de Bo a força gravitacional começa a ser mais importante dando como resultado o escoamento na direção preferencial. Além disto, para altos números de Bo (forte efeito gravitacional) a forma da superfície da gota muda visivelmente deixando em evidência a posição da porta de injeção.



Figura 2.15: Gráfico de X_f e Y_{max} para 3 tipos de fluidos mantendo os mesmos parâmetros $H_f = 1,67 \times 10^{-3}$; $R_f = 1,67 \times 10^{-2}$; $\Phi = 2,2$ e $\alpha = 15^{\circ}$.

Os gráficos da figura 2.16 mostram a evolução de X_f e Y_{max} para diferentes valores de Bo. Pode-se verificar que para valores pequenos de Boo efeito da tensão superficial tende a espalhar o líquido na superfície e como resultado desse efeito o escoamento na direção preferencial é demorado.

Os resultados apresentados neste capítulo mostram que o modelo desenvolvido e o código implementado são capazes de reproduzir casos específicos encontrados na literatura, que analisam o escoamento de uma gota sobre um plano inclinado. Porém, na literatura ainda é difícil encontrar trabalhos que consideram a interação ou coalescência entre duas ou mais gotas em superfícies inclinadas. Recentemente, a coalescência entre duas gotas de mercúrio foram analisadas experimentalmente por Menacha Rocha et al.[38], e posteriormente, Andrieu et al.[39] aplicou a mesma análise para duas gotas de água. Ambos os

Capítulo 2. Formulação matemática e modelagem computacional do escoamento de filme fino sobre uma placa plana $56\,$



Figura 2.16: Perfis de espessura nas direções X_f e Y_{max} para 4 diferentes números de Bo, no instante em que atingem $X_f = 0,234$ mantendo constantes os outros parâmetros $H_f = 1,67 \times 10^{-3}$; $R_f = 1,67 \times 10^{-2}$; $\Phi = 2,2$ e $\alpha = 15^o$.

casos consideraram superfícies sólidas horizontais não molhantes e, portanto, significa que estes resultados não podem ser validados com o presente método numérico intrínseco às superfícies molhantes.

Este modelo é ampliado nos capítulos seguintes para o estudo da interação de duas gotas geradas a partir de duas portas de injeção e para o caso do escoamento que ocorre no processo de revestimento de um cilindro fotorreceptor.