

INFLUÊNCIA DO NÚMERO DE WEBER E DO PARÂMETRO DE IMPACTO NO FENÔMENO DE COALESCÊNCIA BINÁRIA DE GOTAS DE FLUIDOS DE VAN DER WAALS VIA O MÉTODO *SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS* (SPH)

Géssica Ramos da Silva, grsilva@iprj.uerj.br¹
Maicon de Paiva Torres, mpptorres@iprj.uerj.br¹
Helio Pedro Amaral Souto, helio@iprj.uerj.br¹

¹Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua Bonfim, 25 - Vila Amélia - 28625-570 Nova Friburgo, RJ, Brasil

Resumo: O fenômeno de coalescência, decorrente da colisão frontal e fora-de-centro de duas gotas de mesmo tamanho, têm inúmeras aplicações em processos naturais e industriais e, portanto, a sua modelagem é de grande importância prática. No decorrer das últimas décadas, o método numérico *Smoothed Particle Hydrodynamics* (SPH) vêm sendo aplicado na simulação de problemas envolvendo a formação de gotas empregando a equação de estado de van der Waals. Quando duas ou mais gotas estáveis encontram-se a menos de uma distância crítica, suas moléculas começam a interagir devido à força de atração molecular de longa distância. Dependendo do nível de energia da colisão e do arranjo espacial das gotas, diferentes cenários podem ocorrer. No presente trabalho, pretendeu-se estudar a influência do número de Weber e do parâmetro de impacto na ocorrência do fenômeno de coalescência.

Palavras-chave: coalescência, colisão binária, número de Weber, parâmetro de impacto, *Smoothed Particle Hydrodynamics*

1. INTRODUÇÃO

O fenômeno conhecido como coalescência binária, em que duas gotas líquidas se unem para gerar uma única gota através de uma colisão inelástica, é essencial em muitos processos naturais e industriais e, portanto, a sua predição e controle é de grande importância prática. Por exemplo, o sucesso nos processos de extração líquido-líquido depende da subsequente coalescência das gotas dispersas que foram deliberadamente formadas para aumentar a taxa de transferência de massa (Deshiikan and Papadopoulos, 1995). A colisão e a coalescência de gotas líquidas em pulverizadores de motores Diesel são também de grande interesse, já que a coalescência afeta o tamanho das gotas no cilindro do motor o que, por sua vez, pode interferir no desempenho e nas características de emissão do motor (O'Rourke and Bracco, 1980).

Quando duas gotas colidem em uma dispersão gás-líquido ou líquido-líquido, a interface separando as gotas da fase contínua se distorce para formar uma lamela plana, que deve ser drenada de modo a alcançar uma certa espessura crítica, antes de finalmente romper e levar à coalescência (Meleán and Sigalotti, 2005). Existem diversos resultados possíveis e esperados quando duas gotas colidem, dependendo da energia cinética da colisão, do tamanho e do arranjo espacial das gotas e das propriedades do fluido. Todos esses fatores podem ser parametrizados em termos do número de Weber (We) e do parâmetro de impacto (χ).

No presente trabalho, pretendeu-se estudar a influência do número de Weber e do parâmetro de impacto no fenômeno de coalescência decorrente da colisão frontal e fora-de-centro de duas gotas de mesmo tamanho, separadas por uma dada distância, utilizando o método numérico livre de malhas *Smoothed Particle Hydrodynamics*. Para isso, utiliza-se a equação de estado de van der Waals, bem como uma função *kernel* (W) e um comprimento de suavização (h) apropriados para o estudo da coalescência, conforme será visto na sequência.

2. *SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS*

De acordo com Liu and Liu (2010), existem basicamente dois passos na implementação da formulação do método SPH: a aproximação de *kernel* e a aproximação por partículas. A aproximação de *kernel* consiste na representação de uma função e de suas derivadas utilizando uma função conhecida como função de suavização (ou *kernel*). Já a aproximação por partículas, envolve a representação do domínio físico do problema por um conjunto de partículas e, posteriormente, a estimação das variáveis de campo nesse conjunto de partículas através da substituição da representação contínua pela sua correspondente discreta.

2.1 Aproximação de *kernel* de uma função

A aproximação de *kernel*, de uma função $f(x)$, usada no método SPH tem como ponto de partida a seguinte identidade:

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (1)$$

onde f é uma função da posição $\mathbf{x}$ e δ é a função delta de Dirac, dada por

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \begin{cases} 1, & \text{se } \mathbf{x} = \mathbf{x}' \\ 0, & \text{se } \mathbf{x} \neq \mathbf{x}' \end{cases} \quad (2)$$

Na Eq. (1), Ω é o volume do domínio de integração. Substituindo-se a função delta de Dirac pela função de suavização $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$, com suporte compacto, a igualdade é trocada pela aproximação de *kernel* (Liu and Liu, 2003):

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (3)$$

onde h é o comprimento de suavização que define a influência ou o suporte compacto da função de suavização W .

Já a aproximação da derivada espacial $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$ de uma função é obtida simplesmente pela substituição de $f(x)$ por $\nabla \cdot f(\mathbf{x})$ na Eq. (3), obtendo-se

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla \cdot f(\mathbf{x}')] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (4)$$

onde as derivadas na integral são com relação à coordenada principal. Considerando que

$$[\nabla \cdot f(\mathbf{x}')] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = \nabla \cdot [f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] - f(\mathbf{x}') \cdot \nabla [W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] \quad (5)$$

a seguinte igualdade é obtida

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \nabla \cdot [f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla [W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)] d\mathbf{x}' \quad (6)$$

A primeira integral do lado direito da Eq. (6) pode ser convertida, usando o Teorema da Divergência, em uma integral sobre a superfície S do domínio de integração Ω , de modo que

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}) = \int_S f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \cdot \mathbf{n} dS - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (7)$$

onde $\mathbf{n}$ é o vetor normal unitário à superfície S . Como a função de suavização W possui um suporte compacto, o valor de W na superfície da integral na Eq. (7) é zero, caso o domínio de influência da função de suavização não intercepte a fronteira do domínio. Consequentemente, a aproximação de *kernel* para a divergência pode ser escrita como

$$\nabla \cdot f(\mathbf{x}) = - \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \quad (8)$$

Uma representação análoga pode ser obtida para o operador gradiente (Liu and Liu, 2003).

2.2 Aproximação por partículas

Após a discretização do domínio computacional, incluindo as suas fronteiras, com um número finito de partículas, a forma contínua da aproximação de *kernel*, expressa pela Eq. (3), pode ser escrita numa forma discretizada como um somatório (Liu and Liu, 2003)

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (9)$$

onde N é o número total de partículas dentro da área de influência da partícula posicionada em $\mathbf{x}$. Esse procedimento do somatório sobre as partículas vizinhas é conhecido como aproximação por partículas. Ele determina o valor da função em uma dada partícula como sendo dado pela média dos valores da função em todas as partículas que estão dentro do suporte compacto da função de suavização. Seguindo o mesmo procedimento da aproximação de *kernel*, a aproximação por partículas do divergente de uma função vetorial pode ser obtido como

$$\langle \nabla \cdot f(\mathbf{x}) \rangle = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f(\mathbf{x}_j) \cdot \nabla W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j, h) \quad (10)$$

onde o gradiente ∇W é avaliado na partícula j . O mesmo procedimento pode ser feito com relação ao gradiente de uma função (Liu and Liu, 2003).

3. MODELAGEM MATEMÁTICA

As equações governantes, utilizadas na modelagem do problema da colisão frontal e fora-de-centro de duas gotas de mesmo tamanho, separadas por uma determinada distância, são as equações de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia, respectivamente,

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (11)$$

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{S} + \mathbf{f} \quad (12)$$

$$\frac{de}{dt} = \frac{1}{\rho} \mathbf{S} : \nabla \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{q} \quad (13)$$

onde t é o tempo, ρ é a massa específica, $\mathbf{v}$ é a velocidade, $\mathbf{S}$ é o tensor de tensão, $\mathbf{f}$ representa as forças de corpo por unidade de massa, e é a energia interna específica e $\mathbf{q}$ é o vetor do fluxo de calor.

O tensor de tensão pode ser escrito como

$$\mathbf{S} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\sigma} \quad (14)$$

onde p é a pressão interna, $\mathbf{I}$ é o tensor identidade e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor das tensões viscosas, dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = \eta(\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v}) + (\zeta - \eta)(\nabla \cdot \mathbf{v})\mathbf{I} \quad (15)$$

onde η e ζ são os coeficientes de cisalhamento e viscosidade em massa, respectivamente. Neste trabalho, considerou-se $\eta = 1, 0$ e $\zeta = 0, 1$ em todas as simulações.

O vetor fluxo de calor pode ser escrito, da lei de Fourier, como

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T \quad (16)$$

onde κ é o coeficiente de condutividade térmica e T é a temperatura do fluido.

O sistema de Eqs. (11)-(13) necessita de equações adicionais relacionando a pressão e a energia interna com a temperatura. Para um fluido de van der Waals, têm-se

$$p = \frac{\rho \bar{k} T}{1 - \rho \bar{b}} - \bar{a} \rho^2 \quad (17)$$

$$e = \bar{k} T - \bar{a} \rho \quad (18)$$

onde $\bar{k} = k_B/m$, $\bar{a} = a/m^2$ e $\bar{b} = b/m$. k_B é a constante de Boltzmann, m é a massa da partícula, a é o coeficiente relacionado à ação coesiva responsável pelas forças atrativas de curto alcance entre as moléculas vizinhas e b é um parâmetro constante devido ao tamanho finito das moléculas.

Utilizando a aproximação de *kernel* e a aproximação por partículas, o sistema de Eqs. (11)-(13) pode ser expresso no método SPH pelas seguintes relações

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \nabla_a W_{ab}^h \quad (19)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_a}{dt} = \sum_b m_b \left(\frac{\mathbf{S}_a}{\rho_a^2} + \frac{\mathbf{S}_b}{\rho_b^2} \right) \cdot \nabla_a W_{ab}^h + \mathbf{f}_a \quad (20)$$

$$\frac{de_a}{dt} = \frac{1}{2} \sum_b m_b \left(\frac{\mathbf{S}_a}{\rho_a^2} + \frac{\mathbf{S}_b}{\rho_b^2} \right) : (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \nabla_a W_{ab}^h - \sum_b \left(\frac{\mathbf{q}_a}{\rho_a^2} + \frac{\mathbf{q}_b}{\rho_b^2} \right) \cdot \nabla_a W_{ab}^h \quad (21)$$

com os subscritos a e b denotando os índices das partículas.

De acordo com Nugent and Posch (2000), o termo coesivo de pressão (p_c) na Eq. (17), $-\bar{a}\rho^2$, deve ser considerado separadamente. Portanto, a esse termo corresponderá uma aceleração na Eq. (20) dada por

$$\left. \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \right|_{p_c} = 2\bar{a} \sum_b m_b \cdot \nabla_a W_{ab}^H \quad (22)$$

Uma contribuição análoga aparecerá na equação de energia (Eq. (21)),

$$\left. \frac{de_a}{dt} \right|_{p_c} = -2\bar{a} \sum_b m_b (\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b) \cdot \nabla_a W_{ab}^H \quad (23)$$

A escolha do comprimento de suavização H , nas Eqs. (22) e (23), é determinada por considerações de estabilidade. Em particular, gotas circulares e estáveis são formadas quando $H \geq 2h$ (Meleán and Sigalotti, 2005), ou seja, quando assume-se que o alcance da interação das forças coesivas atrativas excede o de todas as outras forças que aparecem nas equações de movimento.

No método SPH, a determinação do padrão de interpolação é de extrema importância e isso deve ser feito com a utilização de uma função de suavização adequada para cada problema. Neste trabalho, foi-se utilizada a seguinte função de suavização

$$W_H(q, h) = \alpha \begin{cases} q^3 - 6q + 6, & 0 \leq q < 1 \\ (2 - q)^3, & 1 \leq q < 2 \\ 0, & 2 \leq q \end{cases} \quad (24)$$

com $q = \frac{\bar{r}}{h}$, sendo $\bar{r}$ a distância entre duas partículas, e α é o fator de normalização que, para um caso bidimensional, assume o valor $\frac{1}{3\pi h^2}$.

A função expressa pela Eq. (24) é conhecida como *kernel* hiperbólico. De acordo com Yang *et al.* (2014), para os problemas envolvendo a dinâmica da formação de gotas, o *kernel* hiperbólico evita a aglomeração de partículas e garante a formação de gotas mais uniformes.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados numéricos obtidos com a aplicação do método SPH na resolução do problema da colisão frontal e fora-de-centro entre duas gotas (de mesmo tamanho) de fluido de van der Waals serão apresentados nessa seção. Na Tab. 1 são listados os parâmetros adotados nas simulações, que correspondem aos mesmos valores que os utilizados por Nugent and Posch (2000).

Tabela 1: **Parâmetros adotados nas simulações.**

Parâmetro	Valor adotado
Massa das partículas (m)	1
Temperatura crítica do fluido (T_{cr})	$\frac{32}{27}$
Densidade crítica do fluido (ρ_{cr})	$\frac{2}{3}$
Pressão crítica do fluido (P_{cr})	$\frac{8}{27}$
Condutividade térmica (κ)	5
Constante de Boltzmann (k_B)	1
Comprimento de suavização (h)	2

Os valores críticos adotados levam a $\bar{a} = 2$ e $\bar{b} = 0,5$ na Eq. (17). As gotas utilizadas são fisicamente idênticas e encontram-se na situação de equilíbrio termo-mecânico. Conforme já mencionado, os parâmetros que influenciam os resultados decorrentes da colisão são o número de Weber (We) e o parâmetro de impacto (χ) que, para gotas de mesmo tamanho, são definidos pelas seguintes expressões:

$$We = \frac{\rho v_{rel}^2 D}{\gamma} \quad (25)$$

$$\chi = \frac{X}{D} \quad (26)$$

onde ρ e γ denotam a massa específica e a tensão superficial da gota, respectivamente. v_{rel} é a velocidade relativa entre as duas gotas, D é o diâmetro das mesmas e X é a projeção da distância de separação entre os centros das duas gotas normal ao vetor da velocidade relativa.

Na Fig. 1 é apresentada a distribuição espacial de partículas de uma das gotas, sendo circular e estável, e os perfis de temperatura, densidade e pressão variando com o raio.

Conforme pode ser observado na Fig. 1(b), a temperatura se mantém constante em toda a superfície da gota. Como no caso em questão não há atmosfera, o coeficiente convectivo de transferência de calor é desprezível e apenas o coeficiente de condutividade térmica (κ) exerce influência. Deste modo, não há gradiente de temperatura ao longo do raio no estado de equilíbrio.

A massa específica (Fig. 1(c)), diferentemente da temperatura, diminui ligeiramente próximo à superfície livre da gota. Como a massa específica é a razão entre massa e volume, conclui-se que há um distanciamento maior entre as partículas próximo à superfície.

Já a pressão, Fig. 1(d), apresenta um valor constante até uma certa distância do centro de massa da gota. Porém, ao atingir essa distância, a pressão diminui de forma exponencial até atingir o seu ponto mais baixo (na superfície da gota). Isso se deve ao fato da variação de pressão na interface da gota estar diretamente relacionada à tensão superficial e inversamente ao seu raio de curvatura.

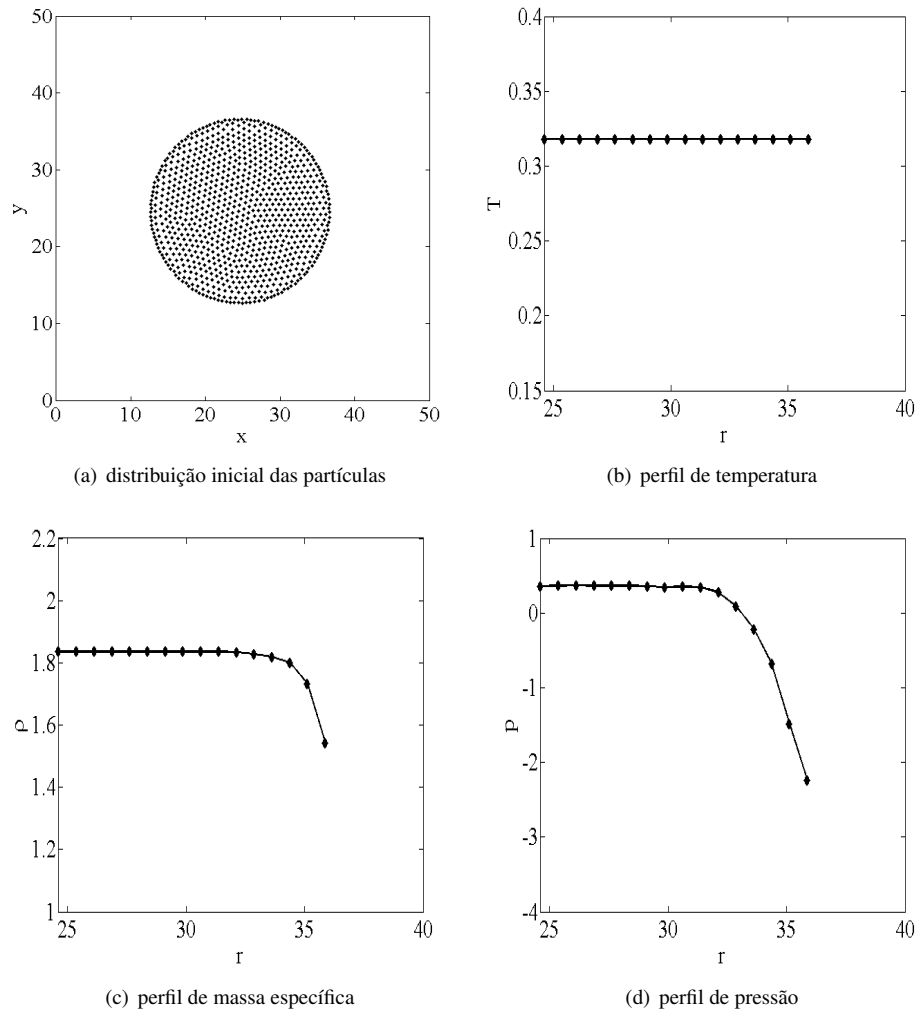


Figura 1: Configuração inicial de uma das gotas circular e estável.

4.1 Parâmetro de Impacto

O primeiro caso simulado foi o da colisão fora-de-centro de duas gotas, separadas por uma dada distância d , com velocidades iniciais iguais em módulo e com componentes do vetor velocidade apenas na direção x , porém com sentidos opostos (conforme esquematizado na Fig. 2(a)).

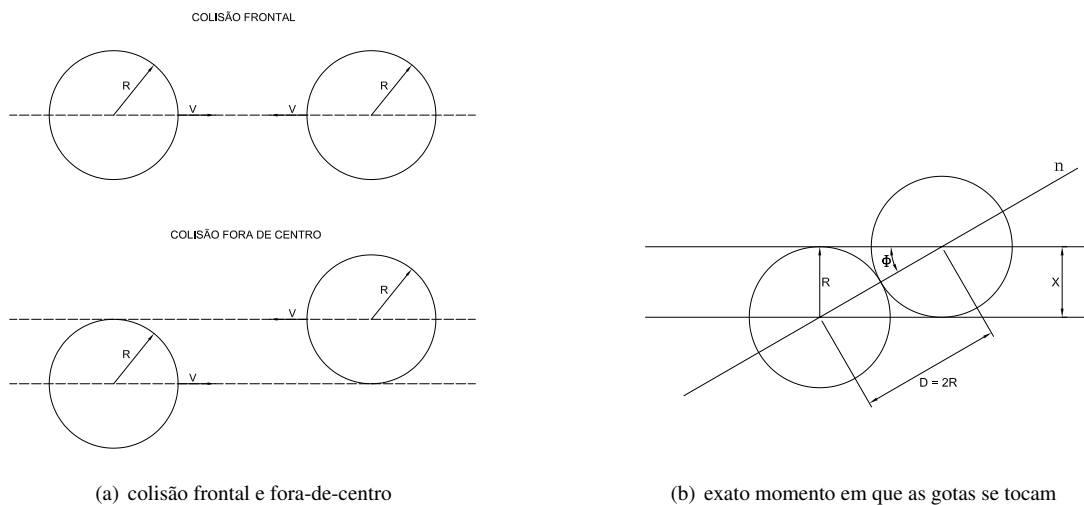


Figura 2: Representação esquemática do problema da colisão de duas gotas de mesmo tamanho.

Como o fenômeno aqui apresentado ocorre no vácuo, as gotas não perdem suas velocidades de translação até que o contato entre elas seja estabelecido (Meleán and Sigalotti, 2005). Consequentemente, elas se aproximam e experimentam

uma deformação hidrodinâmica insignificante após o contato, independentemente da inércia do impacto. Imediatamente antes das gotas se tocarem, as forças de tensão superficial induzem ao surgimento de um fluxo, formando uma pequena ponte de líquido (observável na Fig 3(b)).

Conforme pode ser visto na Fig. 1, a massa específica e a pressão no centro da gota são iguais a $\rho_{centro}=1,8354$ e $p_{centro}=0,3584$, respectivamente. O raio da gota, que foi determinado calculando-se a distância entre o centro de massa e a posição da partícula superficial mais externa, é igual a $R=11,9927$. Portanto, a tensão superficial pode ser calculada pela fórmula $\gamma = p_{centro}R$ (equação de Laplace), obtendo-se o valor 4,2970. Nugent and Posch (2000) determinaram, para o mesmo experimento numérico, um valor da tensão superficial igual a 4,2.

Na colisão fora-de-centro, o parâmetro de impacto é um fator importante e determinante no comportamento do fenômeno de coalescência. De acordo com Meleán and Sigalotti (2005), alguns tipos distintos de comportamento foram categorizados ao longo dos anos: 1) coalescência permanente, para números de Weber baixos e moderados; 2) separação reflexiva, para altos números de Weber e baixos parâmetros de impacto; e 3) separação por estiramento, para altos números de Weber e altos parâmetros de impacto. No presente trabalho, foram simulados quatro casos: $X=0$, R , $3R/2$ e $2R$, que correspondem aos parâmetros de impacto $\chi=0$, 0,5, 0,75 e 1,0, respectivamente, considerando uma velocidade inicial relativa igual a $v_{rel}=0,2$ ($We=0,41$). Vale destacar que $\chi=0$ corresponde ao caso da colisão frontal.

Na Fig. 3 é apresentada a distribuição de partículas, para alguns instantes de tempo, para o modelo de colisão fora-de-centro com um parâmetro de impacto $\chi=0,5$. Na Fig. 3(b) é mostrado o exato momento em que a ponte de líquido começa a se formar entre as gotas ($t=125$), seguido pelo comportamento oscilatório e rotacional ao longo dos eixos x e y da nova gota formada (quadros do meio). Conforme pode ser observado nas Figs. 3(g)-(i), a frequência de oscilação da gota vai diminuindo e ela vai tendendo ao estado de mais baixa energia (formato circular).

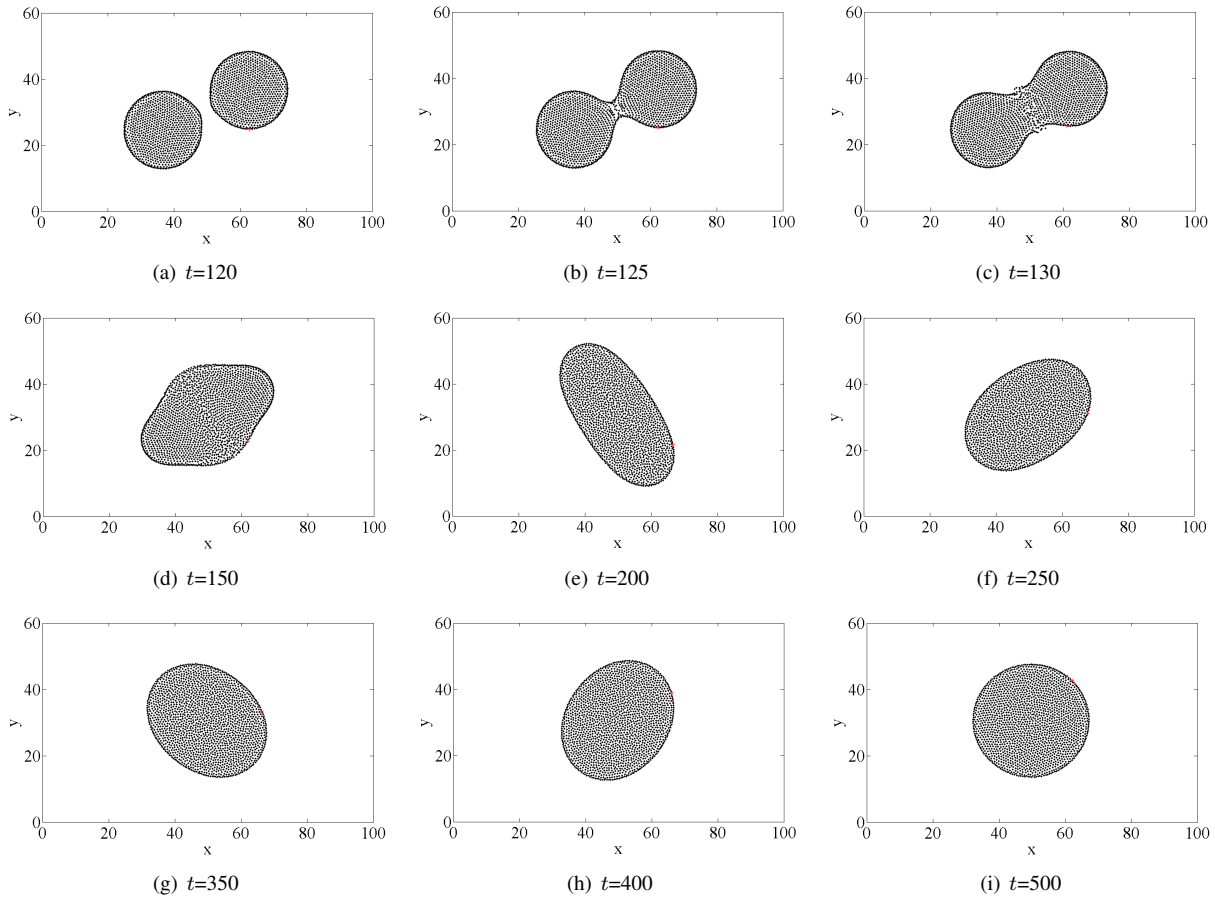


Figura 3: Distribuição de partículas para o modelo de colisão fora-de-centro com $\chi=0,5$.

No exato momento em que as gotas se tocam, a linha centro-a-centro das mesmas forma um ângulo com a direção do vetor velocidade relativa dado por $\sin\Phi = \chi$, vide a representação esquemática na Fig. 2(b). Como resultado, as componentes longitudinal (v_l) e transversal (v_t) do vetor velocidade, relativa à linha de centro das gotas, podem ser facilmente calculadas como $v_l = \sqrt{(1 - \chi^2)}v_{rel}$ e $v_t = \chi v_{rel}$, respectivamente. De acordo com as observações experimentais de Jiang *et al.* (1992), a componente longitudinal é responsável pela coalescência e subsequente deformação da gota formada após a colisão, enquanto que a componente transversal causa um movimento de deslizamento da mesma e impõe um movimento rotacional à gota como um todo.

Encontra-se na Fig. 4 o deslocamento espacial e temporal de uma partícula superficial, localizada na posição inferior da gota mais próxima do eixo y , para diferentes parâmetros de impacto. No gráfico à esquerda, Fig. 4(a), é possível

acompanhar a trajetória da partícula ao longo do tempo e no gráfico à direita, Fig. 4(b), tem-se uma melhor visualização do seu movimento no plano $x - y$. Nota-se, para os casos nos quais o parâmetro de impacto é diferente de zero, que a partícula apresenta não apenas um movimento translacional como também um movimento de rotação. Já para o caso em que $\chi=0$, é possível observar que a partícula, após o impacto, apresenta um comportamento oscilatório, mas não chega a rotacionar.

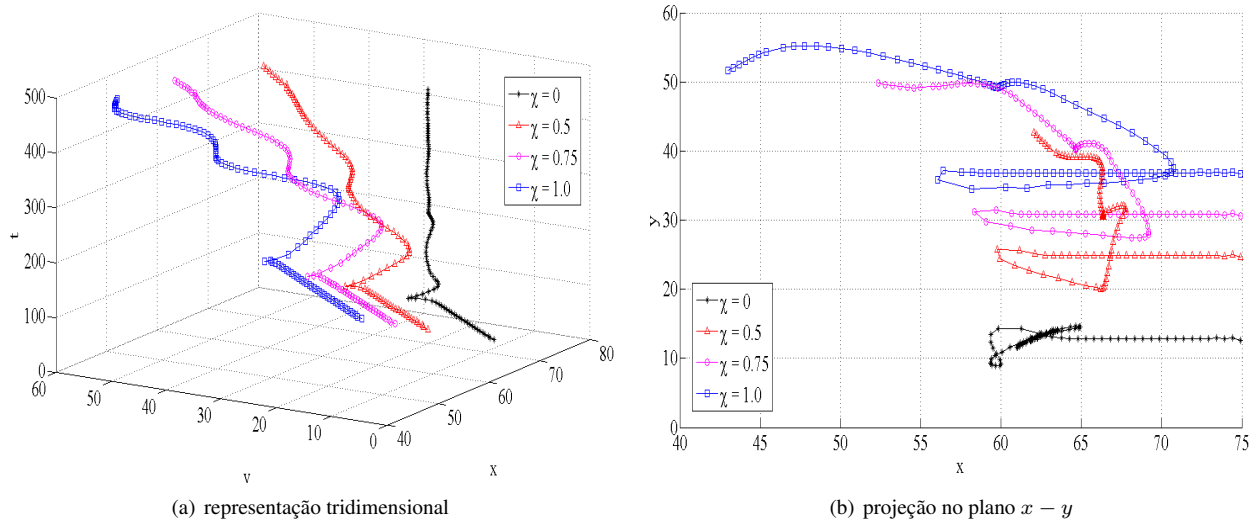


Figura 4: Deslocamento espacial e temporal de uma partícula localizada na superfície da gota para diferentes parâmetros de impacto.

4.2 Número de Weber

A colisão frontal de duas gotas de mesmo tamanho, em condições semelhantes à do primeiro caso, com velocidades iniciais relativas iguais a 0, 2, 0, 4, 0, 6, 0, 8 e 1, 0, que correspondem aos números de Weber na faixa $0,41 < We < 10,24$ para a menor e a maior velocidade relativa, respectivamente, foi o segundo caso considerado. De acordo com Meleán and Sigalotti (2005), aumentando-se o número de Weber nos modelos de colisão frontal, o impacto pode resultar em coalescência permanente ou temporária, seguida por uma separação reflexiva em duas ou mais gotas.

Na Fig. 5 é apresentada a evolução temporal do movimento de duas partículas localizadas na superfície da gota, sendo que uma delas encontra-se mais próxima ao eixo x e a outra ao eixo y , para diferentes velocidades iniciais relativas. Vale ressaltar que, como a mesma distância entre as gotas foi utilizada em todas as simulações, quanto maior for a velocidade inicial relativa do sistema, mais rápido irá ocorrer a colisão. Conforme pode ser visto no gráfico da Fig. 5(a), que representa o movimento da partícula em relação ao eixo- x , as colisões de energia mais altas, ou seja, com maiores velocidades iniciais relativas, atingem o estado de maior deformação em tempos menores e com amplitudes de oscilação maiores do que os modelos de energia mais baixas. O mesmo comportamento ocorre ao longo do eixo- y (gráfico da Fig. 5(b)), o que implica que, quanto mais energética é a colisão, mais fina é a forma da gota no momento de máxima deformação e mais alongada ela ficará após completar o primeiro período de oscilação.

Na Fig. 6, a variação da energia cinética e da energia interna com o tempo, para diferentes velocidades iniciais relativas, é apresentada. Conforme pode ser visto, a energia cinética do sistema, Fig. 6(a), se mantém constante até o momento da colisão, quando ela começa a oscilar. Percebe-se que a amplitude da oscilação diminui com o tempo e isso se deve à dissipação de energia por meio do termo de viscosidade contido no tensor de tensão, acarretando em um aumento da energia interna do sistema (Fig. 6(b)), consequência da conservação de energia.

Os casos apresentados até o momento consistiram de impactos conhecidos como colisões de baixa energia. Esses modelos, por apresentarem baixo número de Weber ($We \leq 10,24$), tiveram como resultado uma coalescência permanente. Agora, são apresentados mais dois casos, com o objetivo de demonstrar a coalescência temporária, num primeiro momento, e a separação reflexiva das gotas, posteriormente.

Na Fig. 7 é apresentado um caso de colisão frontal ($\chi = 0$), com número de Weber ($We = 40,97$) moderado, entre gotas que apresentam uma velocidade inicial relativa igual a 2,0. Nesse modelo, que não constitui mais uma colisão de baixa energia, as gotas formam uma ponte de líquido ao se aproximarem uma da outra (conforme nos casos anteriores), resultando numa coalescência temporária. O instante de tempo $t = 115$, mostrado na Fig. 7(a), corresponde ao momento de máxima deformação sofrido pela nova gota formada. Conforme pode ser visto, ela começa a se romper em $t = 120$, Fig. 7(b), resultando em duas novas gotas. Porém, nesse caso, elas chegam a se unir novamente, já que as forças atrativas de longo alcance, inerentes da física do problema, se sobressaem à energia cinética do sistema.

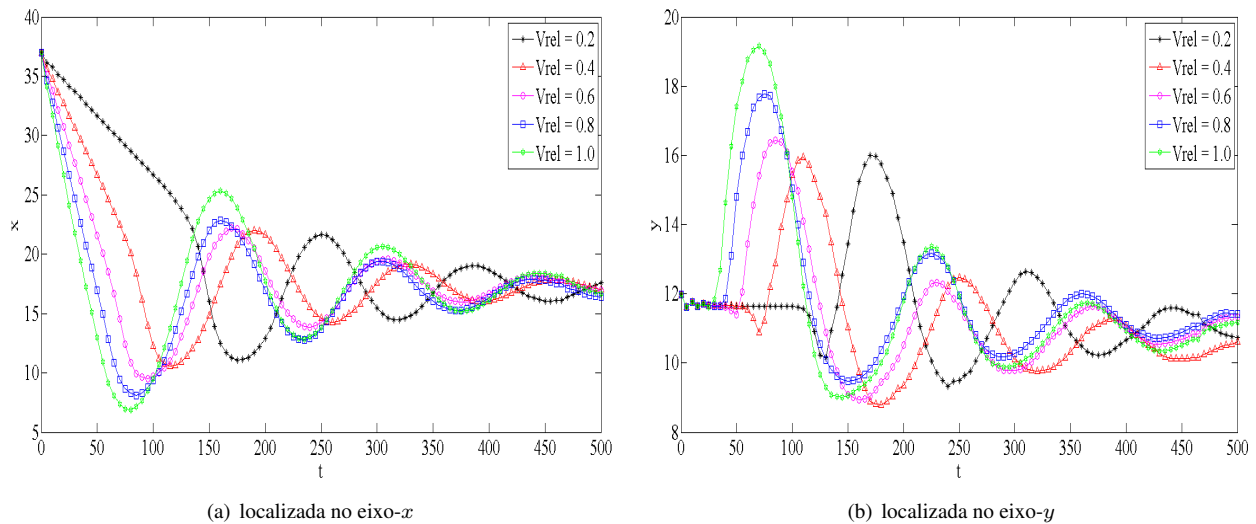


Figura 5: Movimento de uma partícula superficial para diferentes velocidades iniciais relativas.

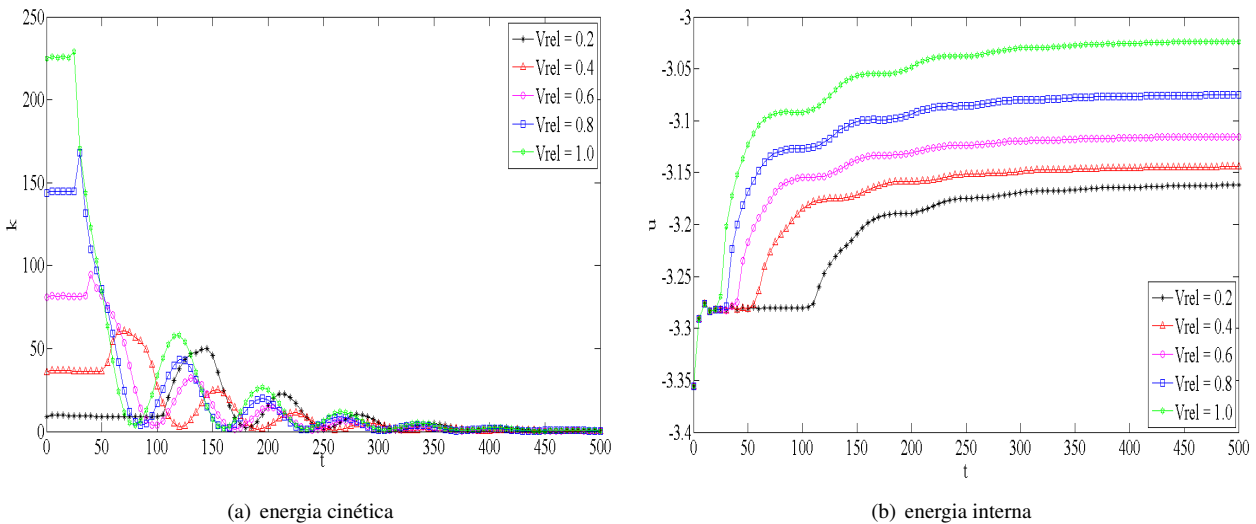


Figura 6: Variação temporal da energia do sistema para diferentes velocidades iniciais relativas.

Finalmente, na Fig. 8 é apresentado um caso de colisão fora-de-centro, com alto parâmetro de impacto ($\chi = 1, 0$) e, novamente, número de Weber ($We = 40, 97$) moderado, para gotas que apresentam uma velocidade inicial relativa igual a 2,0. Nota-se que a ponte de líquido formada, nesse caso, vai se afinando cada vez mais com o passar do tempo. Entre os instantes de tempo $t = 45$ e $t = 60$, Figs. 8(b) e 8(c), ela se rompe e as novas gotas formadas não voltam a se unir, já que uma delas está se deslocando para a direita (com $v_1 = 1, 0$) e a outra está se deslocando para a esquerda (com $v_2 = -1, 0$).

5. CONCLUSÕES

No presente trabalho, o método numérico lagrangiano e livre de malhas *Smoothed Particle Hydrodynamics* foi empregado na simulação da colisão frontal e fora-de-centro de duas gotas fisicamente idênticas. Dependendo dos valores adotados para a velocidade inicial relativa entre as gotas e do tamanho e do arranjo espacial das mesmas, diferentes tipos do fenômeno conhecido como coalescência, ou união das gotas, podem ocorrer.

Quatro valores distintos para o parâmetro de impacto foram estudados neste trabalho: $\chi = 0$, $\chi = 0, 5$, $\chi = 0, 75$ e $\chi = 1, 0$, para baixos valores do número de Weber. Os resultados obtidos foram condizentes com o esperado para as colisões de baixa energia que, normalmente, resultam em uma coalescência permanente.

A influência do número de Weber na coalescência foi estudada no caso da colisão frontal ($\chi = 0$). Diferentes velocidades foram empregadas e foi possível observar que quanto maior for o número de Weber, maior será a deformação sofrida pela nova gota formada ao longo dos eixos x e y .

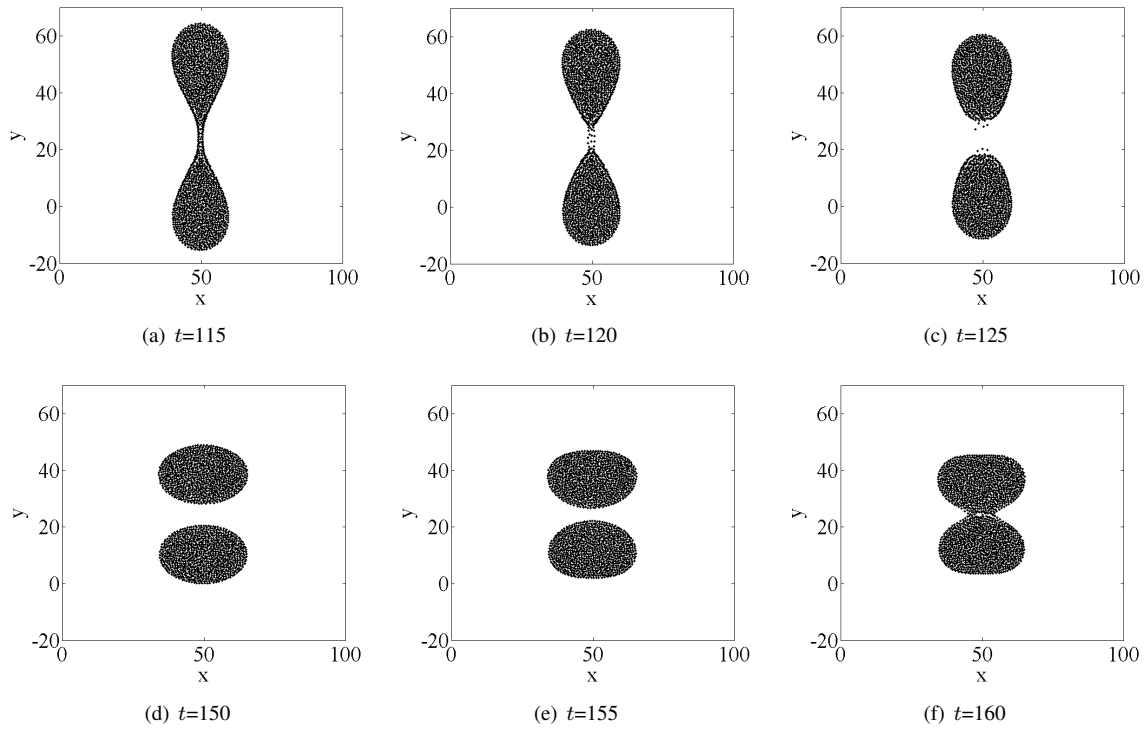


Figura 7: Distribuição de partículas para o modelo de colisão frontal com $\chi = 0$ e $We = 40, 97$.

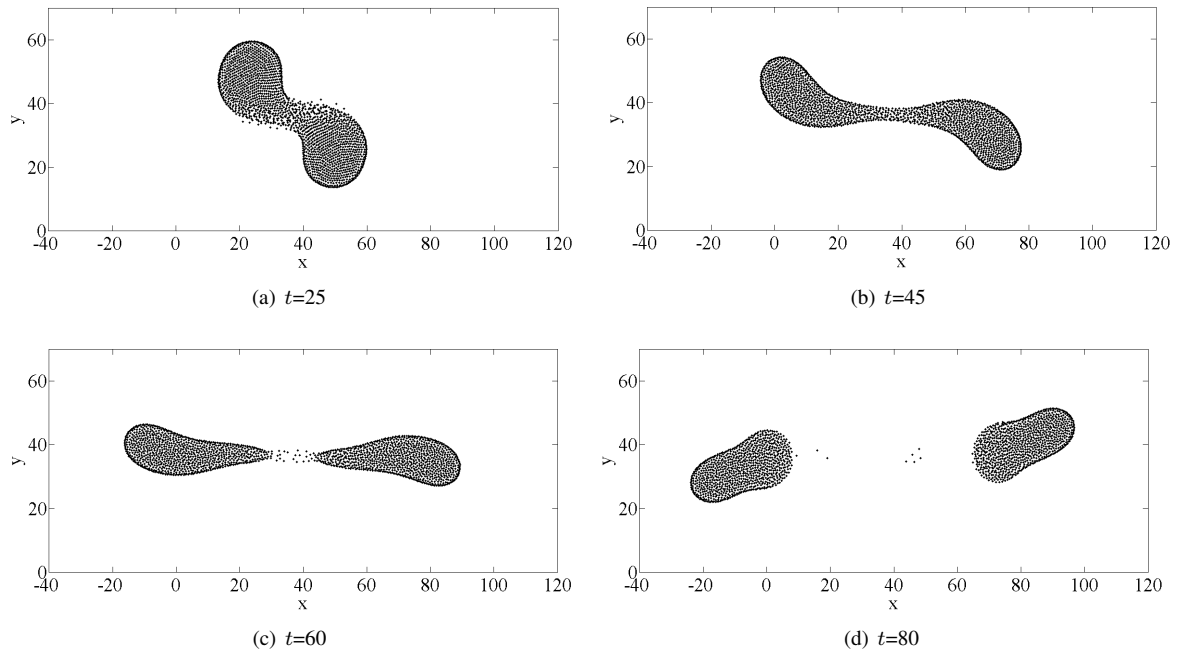


Figura 8: Distribuição de partículas para o modelo de colisão fora-de-centro com $\chi = 1, 0$ e $We = 40, 97$.

Por último, foram apresentados dois casos com um número de Weber moderado ($We = 40, 97$), sendo que no primeiro o parâmetro de impacto é igual a zero (colisão frontal), enquanto que no segundo o parâmetro de impacto assume o seu valor máximo ($\chi = 1, 0$). Nesses casos, foi possível constatar que um aumento significativo no parâmetro de impacto resulta na separação reflexiva da gota formada após a colisão. Por outro lado, no primeiro caso as gotas se separaram, mas tornaram a se unir novamente (coalescência temporária, seguida de coalescência permanente).

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio financeiro concedido pelas agências de fomento CAPES, CNPq e FAPERJ.

7. REFERÊNCIAS

- Deshiikan, S.R. and Papadopoulos, K.D., 1995. "London-van der waals and edl effects in the coalescence of oil drops: II. ionic strength and ph effects". *Journal of colloid and interface science*, Vol. 174, No. 2, pp. 313–318.
- Jiang, Y., Umemura, A. and Law, C., 1992. "An experimental investigation on the collision behaviour of hydrocarbon droplets". *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 234, pp. 171–190.
- Liu, G.R. and Liu, M.B., 2003. *Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method*. World Scientific.
- Liu, M. and Liu, G., 2010. "Smoothed particle hydrodynamics (sph): an overview and recent developments". *Archives of computational methods in engineering*, Vol. 17, No. 1, pp. 25–76.
- Meleán, Y. and Sigalotti, L.D.G., 2005. "Coalescence of colliding van der waals liquid drops". *International journal of heat and mass transfer*, Vol. 48, No. 19, pp. 4041–4061.
- Nugent, S. and Posch, H., 2000. "Liquid drops and surface tension with smoothed particle applied mechanics". *Physical Review E*, Vol. 62, No. 4, p. 4968.
- O'Rourke, P. and Bracco, F., 1980. "Modelling of drop interactions in thick sprays and a comparison with experiments". *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, Vol. 9, pp. 101–106.
- Yang, X., Liu, M. and Peng, S., 2014. "Smoothed particle hydrodynamics modeling of viscous liquid drop without tensile instability". *Computers & Fluids*, Vol. 92, pp. 199–208.

8. RESPONSABILIDADE AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo deste trabalho.

INFLUENCE OF WEBER NUMBER AND IMPACT PARAMETER IN THE BINARY COALESCENCE PHENOMENON OF VAN DER WAALS FLUIDS DROPS VIA SMOOTHED PARTICLE HYDRODYNAMICS (SPH) METHOD

Géssica Ramos da Silva, grsilva@iprj.uerj.br¹

Maicon de Paiva Torres, mptorres@iprj.uerj.br¹

Helio Pedro Amaral Souto, helio@iprj.uerj.br¹

¹Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua Bonfim, 25 - Vila Amélia - 28625-570 Nova Friburgo, RJ, Brasil

Resumo: Coalescence phenomenon, due to head-on and off-center collision between two drops of same size, has several applications in natural and industrial processes and, therefore, its modeling is of great practical importance. Over the past decades, the Smoothed Particle Hydrodynamics numerical method has been applied in simulation of problems involving droplet formation using van der Waals' state of equation. When two or more stable drops approach to each other under a critical distance, their molecules start to interact because of long-range molecular attraction forces. Depending on the collision level of energy and the spacial arrangement of drops, different sceneries may take place. In the present work, the influence of Weber number and impact parameter on the occurrence of coalescence phenomenon was studied.

Palavras-chave: coalescence, binary collision, Weber number, impact parameter, Smoothed Particle Hydrodynamics