

NICOLAO CERQUEIRA LIMA

Simulação de Escoamentos Eletrohidrodinâmicos de Fluidos Newtonianos e Viscoelásticos

14/2013

CAMPINAS, SP 2013



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

NICOLAO CERQUEIRA LIMA

Simulação de Escoamentos Eletrohidrodinâmicos de Fluidos Newtonianos e Viscoelásticos

Orientador: Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica na Área de Materiais e Processos de Fabricação.

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO NICOLAO CERQUEIRA LIMA E ORIENTADA PELO PROF. DR. MARCOS AKIRA D'ÁVILA.

ASSINATURA DO ORIENTADOR

CAMPINAS, 2013

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

L628s	Lima, Nicolao Cerqueira Simulação de escoamentos eletrohidrodinâmicos de fluidos newtonianos e viscoelásticos / Nicolao Cerqueira LimaCampinas, SP: [s.n.], 2013.
	Orientador: Marcos Akira d'Ávila. Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.
	1. Materiais viscoelasticos. 2. Fluidos. 3. Fluidodinâmica computacional (CFD). 4. Simulação de processos. I. d'Ávila, Marcos Akira, 1972 II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

Título em Inglês: Electrohydrodynamic flow simulation of newtonian and viscoelastic fluids Palavras-chave em Inglês: Viscoelastic materials, Fluids, Computational fluid dynamics (CFD), Process Simulation Área de concentração: Materiais e Processos de Fabricação Titulação: Mestre em Engenharia Mecânica Banca examinadora: Erick de Moraes Franklin, Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva Data da defesa: 25-02-2013 Programa de Pós Graduação: Engenharia Mecânica

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA DEPARTAMENTO DE MATERIAIS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO ACADÊMICO

Simulação de Escoamentos Eletrohidrodinâmicos de Fluidos Newtonianos e Viscoelásticos

Autor: Nicolao Cerqueira Lima

Orientador: Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Dissertação

Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila Unicamp

Prof. Dr. Erick de Moraes Franklin Unicamp

Prof. Dr. Luiz Fernando Lopes Rodrígues/Silva UFRJ

Campinas, 25 de Fevereiro de 2013

À minha mãe, por ter me ensinado a viver. Ao meu avô Lix, e à minha tia Luci, que descansem em paz. Sentirei saudades.

AGRADECIMENTOS

Inicialmente, gostaria de agradecer a todos os membros da minha família, por sempre apoiarem as minhas escolhas. Agradeço ao meu pai Eduardo, por sempre ter me dado forças para continuar e alcançar minhas metas. Ao meu melhor amigo, meu irmão Leo, por sempre ser companheiro e camarada em todos os momentos que precisei. À minha mãe Lucia, por ter sido a inspiração e o suporte de todas as conquistas da minha vida.

Agradeço à Ket, por ter estado do meu lado durante todo esse tempo. Pelo apoio e a ajuda em todos os momentos difíceis.

Às minhas companheiras de trabalho Rose, Gê e Taís, pelas ótimas conversas nas pausas para o café.

Agradeço a toda equipe da escola de verão NUMAP-Br, que, através de muita dedicação, me ensinaram o verdadeiro trabalho em grupo e me mostraram a paixão pelo CFD. Entre eles, gostaria de agradecer, principalmente, os professores Paulo Lage e Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, e o doutorando Jovani Favero. Sem eles, eu não teria sido capaz de concluir esse trabalho.

Agradeço também ao Dr. Leonardo Machado da Rosa, por ter me proporcionado o primeiro contato com CFD, e por estar sempre disposto a ajudar.

Agradeço a todos os meus amigos, por todos os ótimos momentos de lazer.

Ao meu orientador Prof. Dr. Marcos Akira d'Ávila, por mostrar o verdadeiro trabalho de um orientador. Por ter dado todo o suporte, incentivo e conhecimento necessários para a conclusão desse trabalho.

À CNPq por ter financiado a pesquisa para produção do presente trabalho.

"Por que acordar, se a melhor parte do meu dia é o sonho?" Nicolao Lima

RESUMO

A eletrohidrodinâmica trata basicamente dos efeitos de um campo elétrico em meios contínuos. Um fluido sob o efeito de um campo elétrico tende a se deformar devido a uma força elétrica que age sobre ele. Essa força elétrica é consequência de alguns fatores que têm como base as próprias propriedades do fluido. Entre elas estão a condutividade elétrica (capacidade do fluido de ionizar-se ou de conduzir corrente elétrica) e a permissividade elétrica (capacidade do fluido de polarizar-se). Diversos processos que utilizam efeitos elétricos em fluidos foram desenvolvidos nas últimas décadas. O fato de estes processos envolverem uma alta complexidade de parâmetros faz com que seja consumido bastante tempo e material durante a fase de testes. Por esse motivo, as simulações numéricas passaram a ser uma boa alternativa para otimizar tais processos, além de aumentar o conhecimento sobre eles. Nesse contexto, no presente trabalho foi implementado um código numérico (solver) no pacote de CFD OpenFOAM baseado no modelo para fluidos pouco condutores (leaky dieletric model) no intuito de descrever escoamentos eletrohidrodinâmicos. Entre eles estão o efeito de um campo elétrico em uma gota condutora e o afinamento de um jato na saída de um tubo capilar. Eventualmente, em processos eletrohidrodinâmicos, são utilizados polímeros. Entretanto, não há na literatura muitos estudos sobre a simulação de escoamentos eletrohidrodinâmicos utilizando fluidos viscoelásticos. Assim, um segundo código foi implementado, baseado em um código já existente. Este é capaz de simular efeitos elétricos em fluidos viscoelásticos, utilizando a equação constitutiva de Giesekus como modelo viscoelástico. Os resultados obtidos para a deformação da gota condutora foram comparados com resultados analíticos para fluidos newtonianos e com observações experimentais para fluidos viscoelásticos. Para o caso do jato na saída de um tubo capilar, ambos os tipos de fluidos (newtonianos e viscoelásticos) foram comparados com resultados experimentais e teóricos.

Palavras-chave: Eletrohidrodinâmica; CFD; Fluidos viscoelásticos; OpenFOAM; Simulação.

ABSTRACT

Electrohydrodynamics deals basically on the effects of an electric field on a continuum media. A fluid under the effect of an electric field tends to deform due to an electric force that acts on it. This electric force is a consequence of some factors which are based on the fluid properties, including the electric conductivity (ability of the fluid to ionize or to conduct electrical current) and the permittivity (ability of the fluid to polarize). Many processes using electrical effects in fluids have been developed in recent decades. The fact that these processes involve a high complexity of parameters, it consumes time and materials during the test phase. For that reason, the numerical simulations start being a good alternative to optimize such processes, and also to increase the knowledge about them. In this context, on the present work was implemented a solver on the open CFD software OpenFOAM, based on the leaky dielectric model, in order to describe electrohydrodynamic flows. Among them, is the effect of an electric field on a conducting droplet and the thinning of a jet on the exit of a nozzle. Eventually, in electrohydrodynamic processes, polymers are used. However, there aren't many studies about electrohydrodynamic flow simulation using viscoelastic fluids. So, a second solver was made, based on another existing solver. This second solver is able to simulate electric effects on viscoelastc fluids, using the Giesekus model as a constitutive equation. The results of the deformation of a conducting droplet were compared to analytical results, for Newtonian fluids, and with experimental observations, for viscoelastic ones. As for the jet, both types of fluids, Newtonians and viscoelastics, were compared to experimental and theoretical results.

Word-keys: Electrohydrodynamics; CFD; Viscoelastic fluids; OpenFOAM; Simulation.

CONTEÚDO

CON	NTEÚDOX	VII
LIS	TA DE TABELAS	XXI
LIS	TA DE FIGURASXX	XIII
NO	MENCLATURAX	XIX
1.	INTRODUÇÃO	1
1.	1 OBJETIVOS	3
2.	REVISÃO DA LITERATURA	5
3.	MODELAGEM	11
3.	1 MODELO PARA FLUIDOS NEWTONIANOS	11
3.	2 MODELO PARA FLUIDOS VISCOELÁSTICOS	13
3.	.3 MODELO ELETROHIDRODINÂMICO	15
3.	4 MÉTODO VOF	19
4.	METODOLOGIA COMPUTACIONAL	21
4.	1 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE FLUIDO-DINÂMICA	
CO	OMPUTACIONAL	21
4.	2 ALGORITMO UTILIZADO NA RESOLUÇÃO DE ESCOAMENTOS ELETROHIDRODINÂMICOS.	23
4.	.3 MÉTODOS UTILIZADOS PARA A RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES	25
4.	.4 CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO UTILIZADAS NOS CASOS	26
	4.4.1 Interface Horizontal	27
	4.4.2 Gota Condutora em um Campo Elétrico Uniforme	28
	4.4.3 Jato Condutor sob o efeito de um Campo Elétrico	30
4.	5 COMANDO SETFIELDS NO OPENFOAM	32
5.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	33

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS		
6. CC	DNCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	86
5.4	JATO VISCOELÁSTICO CONDUTOR EM UM CAMPO ELÉTRICO	81
5.3	JATO NEWTONIANO CONDUTOR EM UM CAMPO ELÉTRICO	64
5.2	GOTA VISCOELÁSTICA CONDUTORA EM UM CAMPO ELÉTRICO	
5.1	.2 Gota Newtoniana Condutora em um Campo Elétrico	
5.1	.1 Interface Horizontal	
5.1	Validação do código e Resultados	

LISTA DE TABELAS

TABELA 3.1: EQUAÇÕES QUE DESCREVEM O PROBLEMA ELETROHIDRODINÂMICO. 18
TABELA 4.1: CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA O CASO DA INTERFACE HORIZONTAL; VER FIGURA
4.1
TABELA 4.2: CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA O CASO DA GOTA CONDUTORA; VER FIGURA 4.230
TABELA 4.3: CONDIÇÕES DE CONTORNO PARA O CASO DO JATO CONDUTOR; VER FIGURA 4.331
TABELA 5.1: CARACTERÍSTICAS DAS MALHAS PARA O CASO DA INTERFACE HORIZONTAL
TABELA 5.2: ERRO RELATIVO MÁXIMO, EM PERCENTUAL, DAS MALHAS A E B EM RELAÇÃO À
MALHA C
TABELA 5.3: ERRO RELATIVO MÁXIMO, EM PERCENTUAL, DA SIMULAÇÃO COM RELAÇÃO À TEORIA.
TABELA 5.4: CARACTERÍSTICAS DAS MALHAS PARA O CASO DA GOTA CONDUTORA42
TABELA 5.5: ERRO RELATIVO MÁXIMO, EM PERCENTUAL, DAS MALHAS A E B COM RELAÇÃO A
malha C, para as curvas representadas na Figura 5.8 e na Figura 5.944
TABELA 5.6: CARACTERÍSTICAS DAS MALHAS PARA O CASO DO JATO CONDUTOR
TABELA 5.7: ERRO RELATIVO MÁXIMO, EM PERCENTUAL, DAS MALHAS A E B COM RELAÇÃO A
MALHA C, PARA AS CURVAS REPRESENTADAS NA FIGURA 5.32 E NA FIGURA 5.3369

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 4.1: ESBOÇO DO CASO DA INTERFACE HORIZONTAL
FIGURA 4.2: ESBOÇO DO CASO DA GOTA CONDUTORA EM UM CAMPO ELÉTRICO UNIFORME29
FIGURA 4.3: ESBOÇO DO CASO DO JATO CONDUTOR SOB O EFEITO DE UM CAMPO ELÉTRICO
FIGURA 5.1: ESBOÇO DA GEOMETRIA UTILIZADA PARA O CASO DA INTERFACE HORIZONTAL
FIGURA 5.2: MALHA COMPUTACIONAL (MALHA B) PARA O PROBLEMA DE INTERFACE HORIZONTAL
FIGURA 5.3: VARIAÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO ENTRE AS PLACAS PARALELAS NORMALIZADO PELO
CAMPO NA FASE LÍQUIDA PARA A MALHA A, B E C36
FIGURA 5.4: DISTRIBUIÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO NORMALIZADO PARA O CASO DA INTERFACE
HORIZONTAL
FIGURA 5.5: ESBOÇO DO PROBLEMA DA GOTÍCULA CONDUTORA EM UM CAMPO ELÉTRICO39
FIGURA 5.6: TIPOS DE DEFORMAÇÃO DE UMA GOTA CONDUTORA40
FIGURA 5.7: MALHA COMPUTACIONAL BIDIMENSIONAL SIMÉTRICA B PARA O CASO DA GOTA
CONDUTORA
FIGURA 5.8: SALTO DO CAMPO ELÉTRICO NA INTERFACE DA GOTA USANDO AS MALHAS A, B e C43
FIGURA 5.9: DEFORMAÇÃO DA GOTA VARIANDO O NÚMERO CAPILAR ELÉTRICO PARA AS MALHAS A,
B E C
FIGURA 5.10: CAMPO ELÉTRICO GERADO EM TORNO DE UMA GOTA CARREGADA46
FIGURA 5.11: SALTO DO CAMPO ELÉTRICO SIMULAÇÃO COMPARADA COM A TEORIA46
FIGURA 5.12: SALTO DO CAMPO ELÉTRICO VARIANDO O VALOR DA RAZÃO ENTRE AS
PERMISSIVIDADES Q
FIGURA 5.13: SALTO DO CAMPO ELÉTRICO VARIANDO O TEMPO T DE SIMULAÇÃO48
FIGURA 5.14: DISTRIBUIÇÃO DE DENSIDADE DE CARGA NA INTERFACE DA ESFERA CONDUTORA49
FIGURA 5.15: VISUALIZAÇÃO DA FORÇA ELÉTRICA EM UMA ESFERA CONDUTORA49
FIGURA 5.16: GRÁFICO DA DEFORMAÇÃO DA GOTA VARIANDO O NÚMERO CAPILAR ELÉTRICO CAE.
FIGURA 5.17: DEFORMAÇÃO DA GOTA VARIANDO O NÚMERO CAPILAR ELÉTRICO CA _E

FIGURA 5.18: GRÁFICO DA DEFORMAÇÃO DA GOTA VARIANDO A RAZÃO ENTRE AS
PERMISSIVIDADES Q
Figura 5.19: Deformação da gota variando a razão entre as permissividades $Q.53$
FIGURA 5.20: GRÁFICO DA DEFORMAÇÃO DA GOTA VARIANDO A RAZÃO ENTRE AS
CONDUTIVIDADES R
FIGURA 5.21: DEFORMAÇÃO DA GOTA VARIANDO A RAZÃO ENTRE AS CONDUTIVIDADES ELÉTRICAS
<i>R</i> 54
FIGURA 5.22: CIRCULAÇÃO DO FLUIDO INTERNO E EXTERNO A GOTA (TAYLOR, 1966)56
FIGURA 5.23: VISUALIZAÇÃO DOS VÓRTICES FORMADOS DENTRO E AO REDOR DA GOTA57
FIGURA 5.24: COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DA DEFORMAÇÃO DE UMA GOTA VISCOELÁSTICA
VARIANDO O VALOR DE C_{A_E} , para diferentes valores de λ , com os resultados obtidos
PARA UMA GOTA NEWTONIANA (FIGURA 5.16)60
Figura 5.25: Comparação da deformação da gota viscoelástica variando λ , para
DIFERENTES VALORES DE <i>CA_E</i> 61
FIGURA 5.26: VARIAÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO PARA O FLUIDO NEWTONIANO E OS FLUIDOS
VISCOELÁSTICOS62
FIGURA 5.27: FORMAÇÃO DO VÓRTICE NO INTERIOR DE UMA GOTA VISCOELÁSTICA
FIGURA 5.28: ESQUEMA ILUSTRATIVO DO PROCESSO DE ATOMIZAÇÃO/ELETROFIAÇÃO64
FIGURA 5.29: (A) CONE DE TAYLOR (HARTMAN ET AL., 1999); (B) REGIÃO DE GOTEJAMENTO; (C)
REGIÃO DE CHICOTEAMENTO (LIM, HUA, WANG E SMITH, 2010)65
FIGURA 5.30: ESQUEMA BIDIMENSIONAL DO PROCESSO DE ATOMIZAÇÃO/ELETROFIAÇÃO UTILIZADO
NAS SIMULAÇÕES66
FIGURA 5.31: MALHA COMPUTACIONAL SIMÉTRICA B UTILIZADA PARA O CASO DO JATO CONDUTOR.
FIGURA 5.32: AFINAMENTO DO JATO UTILIZANDO UMA DIFERENÇA DE POTENCIAL DE 20KV PARA AS
MALHAS A, B E C
FIGURA 5.33: CAMPO ELÉTRICO NO CENTRO DO JATO UTILIZANDO UMA DIFERENÇA DE POTENCIAL
20kV para as malhas A, B e C69
FIGURA 5.34: GRÁFICO DO AFINAMENTO DO JATO NEWTONIANO COM A VARIAÇÃO DA VOLTAGEM71
FIGURA 5.35: IMAGENS DA SIMULAÇÃO DO AFINAMENTO DO JATO NEWTONIANO COM A VARIAÇÃO
DA VOLTAGEM (VERMELHO – FLUIDO; AZUL - AR)

FIGURA 5.36: GRÁFICO DO AFINAMENTO DO JATO PARA DIFERENTES VOLTAGENS EM UM TEMPO DE
SIMULAÇÃO DE 0,0215
FIGURA 5.37: IMAGENS DA SIMULAÇÃO DO AFINAMENTO DO JATO NEWTONIANO COM A VARIAÇÃO
DA VOLTAGEM EM 0.021s (VERMELHO – FLUIDO; AZUL - AR)73
FIGURA 5.38: GRÁFICO DO AFINAMENTO DO JATO E DO CAMPO ELÉTRICO NO CENTRO DO MESMO74
FIGURA 5.39: IMAGENS DO CAMPO ELÉTRICO \boldsymbol{E} próximo ao cone para uma voltagem de 20kV
FIGURA 5.40: IMAGENS DA FORÇA ELÉTRICA (ESQUERDA) E DENSIDADE DE CARGA (DIREITA)
UTILIZANDO UMA VOLTAGEM DE 20KV76
FIGURA 5.41: CAMPO DE ESCOAMENTO NO INTERIOR DO CONE PARA UM FLUIDO NEWTONIANO
(FORMAÇÃO DO VÓRTICE)77
FIGURA 5.42: LINHAS DE CORRENTE; VISUALIZAÇÃO DO VÓRTICE FORMADO NO INTERIOR DO CONE.
FIGURA 5.43: (A) RESULTADO EXPERIMENTAL DO AFINAMENTO DE UM JATO DE GLICEROL NA SAÍDA
de um tubo capilar com um potencial elétrico de 30 kV e uma vazão de 1.0 mL/min
(Hohman et al., 2001). (B) Resultado teórico obtido pelo modelo unidimensional
desenvolvido por Hohman et al. (2001).(C) Resultado da simulação utilizando o
MODELO PARA FLUIDOS POUCO CONDUTORES
FIGURA 5.44: GRÁFICO DO AFINAMENTO DO JATO DE GLICEROL; COMPARAÇÃO DA SIMULAÇÃO COM
RESULTADOS TEÓRICOS E EXPERIMENTAIS OBTIDOS POR HOHMAN ET AL. (2001)
FIGURA 5.45: AFINAMENTO DO JATO DE UMA SOLUÇÃO DE 4% DE PEO; COMPARAÇÃO DA
SIMULAÇÃO REALIZADA NO PRESENTE TRABALHO, COM O RESULTADO OBTIDO PELO MODELO
do Feng (2003) e com os dados experimentais obtidos por Doshi e Reneker (1995)82
FIGURA 5.46: RESULTADO DA SIMULAÇÃO PARA O AFINAMENTO DE UM JATO VISCOELÁSTICO
UTILIZANDO UMA SOLUÇÃO DE 4% DE PEO
FIGURA 5.47: LINHAS DE CORRENTE PARA O AFINAMENTO DE UM JATO VISCOELÁSTICO UTILIZANDO
UMA VOLTAGEM DE 10 KV84
FIGURA 5.48: CAMPO ELÉTRICO (ESQUERDA); FORÇA ELÉTRICA (CENTRO); DENSIDADE DE CARGA
(DIREITA)85

NOMENCLATURA

Letras Latinas

Ca_E	Número capilar elétrico	_
D	Deformação total da gota condutora	_
Ε	Vetor campo elétrico	$[kg. m. s^{-3}. A^{-1}]$
$m{E}_{\infty}$	Vetor campo elétrico externo	$[kg. m. s^{-3}. A^{-1}]$
E ^g	Vetor campo elétrico no meio gasoso	$[kg. m. s^{-3}. A^{-1}]$
E^{l}	Vetor campo elétrico no meio líquido	$[kg. m. s^{-3}. A^{-1}]$
E_n	Vetor campo elétrico normal à superfície	$[kg. m. s^{-3}. A^{-1}]$
E_t	Vetor campo elétrico tangente à superfície	$[kg. m. s^{-3}. A^{-1}]$
F _e	Vetor força elétrica	$[kg.m^{-2}.s^{-2}]$
Fp	Vetor força devido à polarização	$[kg. m^{-2}. s^{-2}]$
Fq	Vetor força devido às cargas livres	$[kg. m^{-2}. s^{-2}]$
g	Vetor gravidade	$[m. s^{-2}]$
J	Densidade de volume de corrente	$[A. m^{-2}]$
l	Comprimento característico	[m]
М	Razão entre as densidades da fase 1 com a fase 2	_
p	Pressão	$[kg.m^{-1}.s^{-2}]$
q	Carga elétrica	[A. s]
Q	Razão entre as permissividades da fase 1 com a fase 2	_
R	Razão entre as condutividades da fase 1 com a fase 2	_
R_d	Raio da esfera condutora	[m]
S	Tensor taxa de deformação	$[s^{-1}]$
t	Tempo	[s]

U	Vetor velocidade	$[m. s^{-1}]$
v _r	Vetor velocidade radial	$[m.s^{-1}]$
$v_{ heta}$	Vetor velocidade angular	$[m. s^{-1}]$

Letras Gregas

α ₁	Fração volumétrica	-
α	Fator de mobilidade	_
β	Razão entre as viscosidades da fase 1 com a fase 2	_
γ	Tensão superficial	$[kg. s^{-2}]$
E	Permissividade elétrica	$[s^4. A^2. kg^{-1}. m^{-3}]$
η	Viscosidade newtoniana	$[kg.m^{-1}.s^{-1}]$
η_P	Viscosidade do polímero a taxa de deformação nula	$[kg.m^{-1}.s^{-1}]$
η_S	Viscosidade newtoniana do solvente	$[kg. m^{-1}. s^{-1}]$
λ	Tempo de relaxação	[s]
μ	Viscosidade dinâmica	$[kg.m^{-1}.s^{-1}]$
μ_M	Permeabilidade magnética	$[kg. m. s^{-2}. A^{-2}]$
ρ	Massa específica	[kg. m ⁻³]
$ ho_e$	Densidade de carga volumétrica	$[s. A. m^{-3}]$
σ	Condutividade elétrica	$[s^3.A^2.kg^{-1}.m^{-3}]$
$ au_{\mathcal{C}}$	Tempo elétrico característico	[s]
$ au^e$	Tensor tensão de Maxwell	$[kg.m^{-1}.s^{-2}]$
$ au_H$	Tempo hidrodinâmico característico	[s]
$ au_M$	Tempo magnético característico	[s]
$ au^m$	Tensor tensão viscoso	$[kg. m^{-1}. s^{-2}]$
$ au_P$	Tensor tensão da contribuição polimérica	$[kg. m^{-1}. s^{-1}]$
$ au_S$	Tensor tensão da contribuição do solvente	$[kg. m^{-1}. s^{-1}]$
ϕ	Potencial elétrico	$[kg. m^2. s^{-3}. A^{-1}]$

1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, será feita uma breve introdução a respeito de escoamentos eletrohidrodinâmicos, apresentando suas principais características. Também serão expostos os pontos que motivaram o desenvolvimento deste trabalho, assim como os objetivos do mesmo.

Ao longo das últimas décadas, os efeitos de um campo elétrico sobre fluidos vêm sendo estudados de forma teórica no intuito de desenvolver novos processos. A compreensão dos efeitos eletrohidrodinâmicos se iniciou com os trabalhos desenvolvidos por Taylor (1964), que observou a movimentação de uma gota condutora quando essa está inserida em um campo elétrico uniforme. Após estes estudos, diversos processos visando a utilização de efeitos elétricos em fluidos foram desenvolvidos. Entre eles estão a atomização eletrohidrodinâmica, a eletrofiação, a dispersão de um líquido em outro, a impressão a jato de tinta, entre outros (Saville, 1997).

Porém, existe certa dificuldade em aperfeiçoar tais processos devido ao alto número de parâmetros envolvidos nos mesmos e à complexidade de se compreender o que realmente ocorre no interior do fluido. Por esse motivo, passaram a ser necessários estudos mais aprofundados e teóricos a respeito do efeito dos parâmetros do fluido quando esses são submetidos a um campo elétrico. Assim, a simulação de tais processos passou a ser uma opção vantajosa, uma vez que essa evita gastos com materiais e permite uma visualização geral dos efeitos eletrohidrodinâmicos.

O modelo eletrohidrodinâmico consiste basicamente no acoplamento das equações da conservação de massa e quantidade de movimento com as equações de Maxwell. Na presença de um campo elétrico as moléculas de um fluido se polarizam e, no caso de um meio dielétrico homogêneo, a concentração de cargas se retém apenas na superfície do fluido. No caso de um fluido condutor, íons carregados ou cargas livres no interior do fluido migram instantaneamente para a superfície gerando uma densidade de carga na mesma, de modo que não restarão cargas no interior desse fluido. Devido a essa presença de cargas na superfície, é produzida uma tensão elétrica na interface do fluido. Essa irá deformar o mesmo ou colocá-lo em movimento até que a tensão superficial e a tensão viscosa forneçam o balanceamento necessário para que o fluido permaneça em equilíbrio.

A tensão elétrica produzida por fluidos pouco condutores (*leaky dieletrics*) é diferente da tensão produzida por fluidos puramente dielétricos ou perfeitamente condutores. Em fluidos perfeitamente condutores ou dielétricos a força elétrica é perpendicular a interface e alterações no formato da interface, assim como a tensão superficial, servem para balancear a tensão elétrica. Em fluidos pouco condutores a carga acumulada na interface modifica o campo elétrico. Além disso, tensões viscosas, provenientes do escoamento e tensões superficiais balanceiam a ação das componentes tangenciais do campo elétrico que estão agindo nas cargas acumuladas na interface (Saville, 1997). Um dos principais modelos matemáticos desenvolvidos para este tipo de problema é conhecido como "modelo para fluidos pouco condutores (*leaky dieletric model*), que descreve justamente o efeito do campo elétrico em fluidos pouco condutores.

Diversos autores implementaram o modelo para fluidos pouco condutores e fizeram simulações de casos eletrohidrodinâmicos (Feng, 2002, Tomar et al., 2007; Herrera, Popinet, Herrada, 2011). No entanto, pouco foi feito a respeito de simulações de escoamentos eletrohidrodinâmicos de fluidos viscoelásticos pela dificuldade que se tem em modelar escoamentos deste tipo. Porém, experimentos utilizando polímeros sob o efeito de um campo elétrico foram feitos e podem ajudar na análise dos resultados obtidos pela simulação. O processo de eletrofiação é um exemplo de processo que utiliza fluidos poliméricos inseridos em um campo elétrico.

Foi utilizado no presente trabalho o pacote livre de CFD OpenFOAM, que é um pacote aberto e, por isso, permite que sejam implementadas novas equações e novos modelos. Outro benefício é o fato de que já foi desenvolvido por Favero (2009) um código numérico (*solver*) capaz de simular escoamentos de fluidos viscoelásticos que possui diversos modelos constitutivos para fluidos poliméricos nesse mesmo pacote.

A implementação de um código numérico capaz de simular escoamentos eletrohidrodinâmicos de fluidos viscoelásticos é um grande avanço na área de simulação, e permitirá estudos mais aprofundados de processos como a eletrofiação, assim como estudos mais gerais dos efeitos dos parâmetros em escoamentos eletrohidrodinâmicos de fluidos viscoelásticos.

1.1 OBJETIVOS

O objetivo do presente trabalho é o desenvolvimento de um código numérico (*solver*), chamado *EHDInterFoam* (*EHD* - *electrohydrodynamic*; *Inter* – *multiphase*; *Foam* – *OpenFOAM solvers*), para escoamentos eletrohidrodinâmicos de fluidos Newtonianos e viscoelásticos utilizando o pacote livre e de código aberto OpenFOAM.

Entre os objetivos está a validação do código utilizando dois casos-base da literatura. O primeiro caso é o da interface horizontal (*planar layer*), que permitirá a validação de parte das equações do modelo. O segundo é o da gota condutora inserida em um campo elétrico uniforme, que é um caso muito mais complexo que o anterior, e consiste basicamente no estudo da deformação de uma gota newtoniana devido a tensões elétricas exercidas na sua superfície.

Após a validação do modelo será feito o estudo de um jato newtoniano na saída de um tubo capilar sob o efeito de um campo elétrico, processo esse conhecido como atomização eletrohidrodinâmica. Essa simulação já foi estudada por alguns pesquisadores (Yan, Farouk, Ko, 2002; Lastow, Balachandran, 2006) e será possível fazer uma comparação de resultados com os da literatura, porém não há resultados analíticos para o afinamento do jato.

Além disso, serão incluídas as equações referentes à eletrohidrodinâmica em um código (já existente) para escoamentos de fluidos viscoelásticos. A união destes dois códigos permitirá a simulação de efeitos elétricos em fluidos viscoelásticos. Assim, serão estudados no presente trabalho mais dois casos: o primeiro consiste em uma gota viscoelástica condutora sob o efeito de um campo elétrico uniforme, caso esse que possui apenas resultados experimentais na literatura; o segundo consiste no afinamento de um jato viscoelástico na saída de um tubo capilar.

2. REVISÃO DA LITERATURA

Neste capítulo, será feita uma revisão da literatura apontando os principais estudos a respeito de escoamentos e processos eletrohidrodinâmicos. Serão apresentados desde trabalhos experimentais, até simulações numéricas desenvolvidas para casos que se aproximam dos estudados no presente trabalho.

Os primeiros estudos fundamentais visando elucidar o comportamento eletrohidrodinâmico de fluidos foram feitos por Taylor (1964), que observou a deformação de uma gotícula de água, pousada sobre uma superfície plana seca, quando aproximado um material eletrificado. Este fenômeno estimulou estudos experimentais que mostraram o comportamento de diversos tipos de fluidos quando submetidos a um campo elétrico uniforme. Como exemplos, temos uma gota descarregada sob o efeito do mesmo se deforma em um formato esferoidal, ou o fato de um jato se tornar mais estreito na saída de um tubo capilar (Taylor, 1969).

Estudos teóricos, assim como modelos matemáticos que descrevem comportamentos eletrohidrodinâmicos, passaram a ser desenvolvidos e, posteriormente, o modelo para fluidos pouco condutores (*leaky dieletric*), foi desenvolvido por Taylor, completado por Melcher e revisado por Saville (Saville, 1997). Até então, a maior parte dos estudos tratavam apenas de fluidos perfeitamente condutores ou puramente dielétricos.

Nos processos eletrohidrodinâmicos, forças elétricas aparecem na superfície do fluido devido a efeitos de polarização e devido a indução de íons carregados e/ou elétrons livres. Fluidos perfeitamente condutores não sofrem efeitos de polarização e as cargas livres migram instantaneamente para a superfície. Já se tratando de fluidos puramente dielétricos apenas os efeitos de polarização estão presentes. Estes, quando homogêneos, geram também forças elétricas apenas na interface do fluido (Melcher, Taylor, 1969; Griffiths, 1999; Herrera, Popinet, Herrada, 2011). Fluidos pouco condutores possuem tanto efeitos de polarização quanto efeitos de migração de cargas. Neste último caso, as cargas acumuladas na interface do fluido modificam o campo elétrico (Saville, 1997).

Os efeitos da força elétrica aplicada aos fluidos mostraram ter uma influência significativa na estabilidade dos mesmos, que podem ser explorados no desenvolvimento de novos métodos de processamento. Neste contexto, diversas aplicações para os efeitos eletrohidrodinâmicos foram desenvolvidas. Foi observado, por exemplo, que a atuação do campo elétrico potencializa o grau de transferência de calor devido a forças elétricas aplicadas ao fluido (Welch, Biswas, 2007; Zhang, Yan, Zu, 2010). Também é possível fazer a separação de misturas pela utilização de efeitos elétricos (Tsori, Tournilhac, Leibler, 2004). Em alguns processos é necessária a utilização do fluido na forma de gotas. No caso da impressão a jato de tinta, onde um fluido é ejetado de um tubo capilar e transformado em gotículas (processo conhecido como atomização), quando é combinado com efeitos elétricos pode reduzir custos e melhorar a produtividade. Isso acontece devido a alta tensão elétrica aplicada ao fluido, é possível tornar as gotas com um diâmetro ainda menor do que o do tubo capilar que as formou (Yudistira *et al.*, 2010) e permite também a deposição de praticamente toda a tinta utilizada na peça a ser pintada (Hines, 1966).

A utilização de efeitos eletrostáticos aplicados em jatos vem sendo estudada há muito anos (Zeleny, 1914). Em processos como a atomização e a eletrofiação, onde um potencial elétrico é aplicado a um líquido condutor que sai de um tubo capilar a uma baixa vazão, pode ser observada a formação de um cone estável, de onde emerge um jato microscópico (Yan, Farouk, Ko, 2003). O afinamento do jato ocorre devido a uma alta força elétrica que é exercida na interface fluido-ar. Essa está associada aos efeitos de polarização das moléculas assim como às cargas livres acumuladas na superfície do fluido. Esses efeitos são conseqüências do elevado campo elétrico que é aplicado ao fluido (Saville, 1997; Tomar *et al.*, 2007; Herrera, Popinet, Herrada, 2011).

No caso do processo de atomização, o jato, eventualmente, é quebrado em pequenas gotículas. No entanto quando são utilizados fluidos viscoelásticos (que é o caso do processo de eletrofiação), esse jato se torna uma fibra de diâmetro nanométrico, que, posteriormente, é anexada a uma placa coletora. Existem diversas aplicações para processos deste tipo, entre elas está a aplicação em engenharia tecidual para a produção de estruturas conhecidas como *scaffolds* (Pham, Sharma, Mikos, 2006; Ifkovits, Sundararaghavan, Burdick, 2009).

Processos eletrohidrodinâmicos são processos com uma alta complexidade de parâmetros e, por esse motivo, acabam consumindo bastante tempo e material durante a fase de testes (Thompson *et al.*, 2007). Assim, as simulações computacionais e numéricas podem ser uma boa alternativa, uma vez que qualquer parâmetro pode ser facilmente alterado sem que haja qualquer custo adicional.

Devido à grande quantidade de estudos experimentais a respeito do efeito do campo elétrico sobre uma gota, esse acabou se tornando um problema clássico de eletrohidrodinâmica, de forma que diversos autores fizeram a simulação numérica e/ou computacional do mesmo. O próprio problema acabou se tornando um caso de validação para diversos modelos voltados para a explicação de efeitos elétricos em fluidos.

Sherwood (1988) estudou a deformação e a quebra de uma gota rodeada por um fluido de mesma densidade experimentalmente e por via de simulações numéricas. Ele apresentou um caso em que deformações se mantiveram estáveis sob o efeito de altos valores de campos elétricos. Feng e Scott (1996) fizeram estudos da deformação da gota variando a intensidade do campo elétrico. Eles obtiveram resultados coerentes com os experimentais utilizando o modelo matemático de fluidos pouco condutores. O método de *lattice Boltzmann (LBM)* foi utilizado por Li *et al.* (2011) para estudar o problema eletrohidrodinâmico da gota. Os resultados para três modelos diferentes (modelo de fluidos pouco condutores, puramente dielétricos e com uma densidade de carga constante) foram próximos aos analíticos, o que comprova a validade do método. Os mesmos três modelos foram utilizados também por Hua, Lim e Wang (2008), utilizando o *"front tracking method"* para tratamento de interface. Herrera, Popinet e Herrada (2011) fizeram a simulação tridimensional da gota, utilizando o método VOF (*Volume of Fluid*),

além de duas outras simulações eletrohidrodinâmicas para validação do modelo. Entre elas, foi feita a simulação da interface horizontal de dois fluidos puramente dielétricos. Eles obtiveram ótimos resultados quando comparados com os resultados analíticos obtidos por Taylor.

A interação entre duas gotas sob o efeito de um campo elétrico uniforme foi estudado inicialmente por Baygents, Rivette e Stone (1998). Eles obtiveram resultados numéricos tanto para gotas puramente dielétricas quanto condutoras. Para fluidos condutores, foram observadas atrações e repulsões entre as gotas que se deformavam juntamente tanto num formato oblato quanto num formato prolato. As soluções eram interrompidas pouco antes do contato das duas gotas. Tomar *et al.* (2007) também simularam a interação entre gotas utilizando o método VOF para tratamento de interface e obtiveram resultados condizentes com os resultados obtidos por Baygents, Rivette e Stone (1998). No entanto, foi possível observar a coalescência das gotas que mantiveram o formato prolato após coalescerem.

Na literatura não há registros de simulações computacionais de gotas condutoras viscoelásticas inseridas em um campo elétrico. No entanto, podem ser encontrados resultados experimentais. Ha e Yang (1999; 2000) avaliaram experimentalmente a deformação e a quebra de uma gota condutora de um fluido de segunda ordem inserida em um campo elétrico uniforme. Foram obtidas soluções analíticas para pequenas deformações utilizando baixos valores do número de *Deborah* (*De*) e do número capilar elétrico (*Ca_E*). Também foram avaliados os efeitos dos parâmetros não-Newtonianos na estabilidade da gota.

Outras simulações também foram alvo de estudo de diversos pesquisadores. Entre elas está o afinamento de um jato na saída de um tubo capilar. Fenômeno este conhecido como cone de Taylor (Taylor, 1969), que pode ser observado tanto no processo da atomização eletrohidrodinâmica como no processo de eletrofiação.

Diversas simulações da formação do cone de Taylor foram feitas. Gañan-Calvo (1997) obteve a solução analítica para o processo de atomização. Foi desenvolvido um modelo unidimensional em coordenadas esféricas e foram obtidos resultados que apresentaram boa concordância com resultados experimentais. Pela primeira vez foi possível calcular

analiticamente soluções para corrente elétrica, distribuição de cargas e para o formato do jato. Spivak e Dzenis (1998) também obtiveram resultados analíticos para o afinamento do jato. No entanto, foi utilizado um fluido com comportamento viscoso de acordo com o modelo de lei das potências. Thompson *et al.* (2007) avaliaram quantitativamente treze parâmetros do processo de eletrofiação que influenciam o afinamento do jato no intuito de observar quais são mais relevantes. Hua *et al.* (2010) utilizaram em sua simulação dois anéis carregados ao lado da saída do capilar como controle para o afinamento do jato e para o tamanho das gotas que se desprendiam do mesmo. Porém, foi utilizada uma densidade de carga superficial constante para simplificar o problema de transporte de carga na interface. Foi concluído que a utilização dos anéis ajuda no controle da formação do jato e no tamanho das gotas. Os resultados foram condizentes com resultados experimentais.

Lastow e Balachandran (2006) estudaram o processo bidimensional de atomização eletrohidrodinâmica utilizando um modelo bidimensional, onde a solução das equações governantes foi obtida utilizando o pacote comercial Ansys CFX (ANSYS Inc.), tendo como fluido de teste o heptano. A modelagem utilizada foi simples e foi considerado um fluido puramente dielétrico e com propriedades isotrópicas (o que não acontece na realidade). Pôde-se observar a formação de vórtices no interior do cone, que condiz com observações feitas experimentalmente por outros autores (Hayati, Bailey, Tadros, 1987; Shtern, Barrero, 1994).

A maior parte dos estudos nesta área foi desenvolvida para o processo de atomização devido à grande aplicabilidade do mesmo e por existir uma enorme dificuldade em se modelar escoamentos viscoelásticos juntamente com equações eletrohidrodinâmicas. Simulações para fluidos viscoelásticos, sem a adição dos efeitos eletrohidrodinâmicos, foram desenvolvidas e mostraram uma enorme capacidade de descrever os efeitos viscosos e elásticos dos mesmos. Favero *et al.* (2010) desenvolveram um código numérico para o pacote de CFD livre OpenFOAM capaz de simular escoamentos viscoelásticos. Os resultados para um escoamento de contração foram muito bons quando comparados com resultados experimentais e da literatura. Favero *et al.* (2010) também fizeram um código para o OpenFOAM, utilizando o método VOF, para escoamentos multifásicos viscoelásticos. A validação foi feita através de um problema clássico de extrusão,

onde ocorre o inchamento do polímero na saída do tubo capilar. Ambos os códigos mostraram ótima concordância com resultados experimentais e demonstraram ser muito úteis para simular escoamentos de polímeros.

Poucos pesquisadores fizeram a simulação de processos como a eletrofiação, devido à grande complexidade do conjunto de equações a serem resolvidas. Carroll e Joo (2006) obtiveram a solução numérica para um fluido pouco condutor e viscoelástico. As equações constitutivas Oldroyd-B e FENE-P foram utilizadas para descrever o comportamento do polímero. O modelo teórico utilizado é muito parecido com o modelo desenvolvido pelo Feng (2003), principalmente por se tratar de um modelo unidimensional e por ser utilizado o modelo para fluidos pouco condutores para descrever os efeitos eletrostáticos. No entanto, Feng (2003) utilizou a equação de Giesekus como modelo constitutivo para o seu polímero. Feng (2002, 2003) realizou simulações numéricas para fluidos newtonianos e para fluidos viscoelásticos. Suas simulações apresentaram bons resultados. Porém, sua modelagem é aplicada para escoamentos unidimensionais o que não possibilita uma maior compreensão do que ocorre no interior do fluido durante o processo.

3. MODELAGEM

Neste capítulo, será discutida a modelagem desenvolvida para descrever o comportamento eletrohidrodinâmico de fluidos newtonianos e fluidos viscoelásticos. Inicialmente será apresentado o modelo para fluidos newtonianos e em uma segunda parte será apresentado o modelo para fluidos. Em todos os casos foram considerados fluidos incompressíveis e isotérmicos.

3.1 MODELO PARA FLUIDOS NEWTONIANOS

Em geral, os problemas de mecânica de fluidos (considerando escoamentos isotérmicos) consistem em duas equações: uma que descreva a conservação de massa e outra que represente a conservação da quantidade de movimento. Em problemas eletrohidrodinâmicos é adicionado um termo de força elétrica na equação da quantidade de movimento de modo que as equações diferenciais que governam a eletrohidrodinâmica originam-se das equações da conservação de massa e momento, acopladas com as equações de Maxwell.

O modelo utilizado foi baseado no modelo para fluidos pouco condutores ("leaky dieletrics") (Saville, 1997). Esse consiste basicamente em um modelo que descreva escoamentos para esse tipo de fluido, generalizando ainda mais modelos que só eram capazes de descrever comportamentos de fluidos perfeitamente condutores ou puramente dielétricos.

Assumindo fluidos incompressíveis temos que a **Equação (3.1)** (equação da conservação de massa), assume a forma da **Equação (3.2)** (Fox, McDonald, Pritchard, 2004):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U}) = 0 \tag{3.1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{U} = 0 \tag{3.2}$$

A equação da quantidade de movimento em sua forma conservativa é representada pela **Equação (3.3)** (Fox, McDonald, Pritchard, 2004).

$$\frac{\partial(\rho \boldsymbol{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U} \boldsymbol{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{m}} + \boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{e}}) + \rho \mathbf{g}$$
(3.3)

onde ρ é a densidade do fluido, U é o vetor de velocidade, p é a pressão, τ^m é o tensor tensão relacionado a tensão viscosa por unidade de área, τ^e é o tensor tensão de Maxwell relacionado a tensão elétrica por unidade de área no fluido e **g** é o vetor que representa a aceleração da gravidade.

O termo referente à tensão viscosa pode ser substituído pela equação constitutiva para fluidos newtonianos incompressíveis, dado pela **Equação** (3.4):

$$\boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{m}} = 2\eta \boldsymbol{S} \tag{3.4}$$

onde η representa a viscosidade newtoniana e **S** representa o tensor taxa de deformação, que, por ser um tensor simétrico, pode ser decomposto na **Equação (3.5)**:

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2} (\nabla \boldsymbol{U} + [\nabla \boldsymbol{U}]^T)$$
(3.5)

Substituindo a Equação (3.5) na Equação (3.4) e posteriormente na Equação (3.3), obtemos o resultado final da equação da conservação de quantidade de movimento, Equação (3.6):

$$\frac{\partial(\rho \boldsymbol{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U} \boldsymbol{U}) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \boldsymbol{U} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}^e) + \rho \mathbf{g}$$
(3.6)

Desconsiderando o termo relativo à tensão elétrica, para escoamentos de fluidos Newtonianos e incompressíveis, têm-se o sistema de equações constituído pelas **Equações (3.2)** e (**3.6**), sendo a pressão p e a velocidade U as incógnitas.

3.2 MODELO PARA FLUIDOS VISCOELÁSTICOS

Para fluidos viscoelásticos e incompressíveis a **Equação** (3.2) mantém o seu formato, não necessitando de nenhuma alteração. Já se tratando da equação da conservação de quantidade de movimento (**Equação** (3.3)), o termo referente à tensão viscosa, τ^m , pode ser reescrito na forma:

$$\boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{m}} = \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{S}} + \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}} \tag{3.7}$$

onde τ_s representa a contribuição do solvente e τ_P a contribuição do polímero para o tensor das tensões. A **Equação** (3.7) representa a tensão viscosa para soluções poliméricas, uma vez que para as mesmas há presença de solventes na solução. Porém, para fluidos viscoelásticos ou até mesmo para polímeros fundidos, onde não há a presença de solventes a tensão viscosa é dada apenas pela contribuição polimérica.

O valor de τ_P é proveniente de equações constitutivas próprias para cada fluido polimérico. Existem diversas equações constitutivas que descrevem o comportamento reológico dos polímeros. Estas equações geralmente são equações diferenciais não-lineares e que não podem ser substituídas diretamente na **Equação** (3.3), de forma que elas passam a ser uma equação adicional no sistema de equações a serem resolvidas para o escoamento, sendo τ_P sua incógnita (Favero, 2009).

O solvente pode ser tratado como um fluido Newtoniano (Favero, 2009; Bird, Armstrong, Hassager, 1987), então sua expressão pode ser dada pela **Equação (3.8)**:

$$\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{S}} = 2\eta_{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{S} \tag{3.8}$$

sendo η_S a viscosidade do solvente.

O modelo constitutivo escolhido para descrever o comportamento viscoelástico no presente trabalho foi o modelo de Giesekus (1982) pelo fato de ser um dos modelos mais utilizados na literatura. Este modelo possui termos não-lineares dados pelos produtos entre o tensor das tensões. O modelo contém três parâmetros: o tempo de relaxação λ_K , a viscosidade polimérica η_{P_K} à taxa de deformação nula para cada modo de relaxação (com $1 \le K \le N$; sendo N o número de modos de relaxação (Favero, 2009)) e um fator adimensional de mobilidade α_K , que está associado a um arrasto hidrodinâmico anisotrópico das moléculas do polímero (Bird, Armstrong, Hassager, 1987). A **Equação (3.9)** representa a equação constitutiva citada acima.

$$\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}} + \lambda_{\boldsymbol{K}} \, \check{\boldsymbol{\tau}}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}} + \alpha_{\boldsymbol{K}} \frac{\lambda_{\boldsymbol{K}}}{\eta_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}}} (\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}}) = 2\eta_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}} \boldsymbol{S}$$
(3.9)

onde $\check{\tau}_{P_K}$ representa a derivada convectiva superior no tempo do tensor das tensões dada pela Equação (3.10):

$$\check{\boldsymbol{\tau}}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}} = \frac{D\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}}}{Dt} - \left[\nabla \boldsymbol{U}^{T} \cdot \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}}\right] - \left[\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}} \cdot \nabla \boldsymbol{U}\right]$$
(3.10)

sendo $D \tau_{P_K} / Dt$ a derivada material dada por:

~

$$\frac{D\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}}}{Dt} = \frac{\partial\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}}}{\partial t} + \boldsymbol{U} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{K}}}$$
(3.11)

A incógnita τ_p , na Equação (3.7) pode ser obtida pela soma das tensões calculadas em cada modo (Favero, 2009) pela Equação (3.12):

$$\boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}} = \sum_{K=1}^{N} \boldsymbol{\tau}_{\boldsymbol{P}_{K}} \tag{3.12}$$

A modelagem desenvolvida no pacote OpenFOAM para fluidos poliméricos foi feita por Favero (2009). Ele implementou um código numérico tanto para escoamentos viscoelásticos monofásicos como para escoamentos multifásicos (Favero et al., 2010). Como já dito, no presente trabalho foi escolhido o modelo constitutivo de Giesekus, mas o código desenvolvido por Favero (2009) permite a utilização de diversos outros tipos de modelos, o que torna possível o trabalho com diversos tipos de polímeros diferentes.

3.3 MODELO ELETROHIDRODINÂMICO

Para descrever o comportamento eletrohidrodinâmico do escoamento, são utilizadas as equações-base da eletrodinâmica, conhecidas como equações de Maxwell. Em escoamentos eletrohidrodinâmicos os efeitos elétricos e magnéticos podem ser comparados a partir de seus respectivos tempos característicos, sendo $\tau_C \equiv \epsilon/\sigma$ o tempo elétrico característico (onde ϵ é a permissividade e σ a condutividade) e $\tau_M \equiv \mu_M \sigma l^2$ o tempo magnético característico (onde μ_M é a permeabilidade magnética e l um comprimento característico).

Assim como apontado por Saville (1997), o tempo magnético característico é várias ordens de magnitude menor que o tempo elétrico característico, considerando que apenas fluidos pouco condutores são utilizados, conseqüentemente os efeitos magnéticos podem ser desconsiderados (Saville, 1997; Tomar et al., 2007; Herrera et al., 2011).

Outra relação é dada pelo tempo elétrico característico τ_c e pelo tempo hidrodinâmico característico τ_H , que dependem do problema que está sendo considerado. No caso de problemas de gotas condutoras e jatos condutores o tempo hidrodinâmico característico pode ser dado por $\tau_H = (\rho D^3 / \gamma)^{1/2}$, sendo *D* o diâmetro da gota e do jato (Herrera et al., 2011). Quanto menor o valor de τ_c , quando comparado com o valor de τ_H , os efeitos elétricos no fluido levam a uma migração instantânea de cargas para a superfície, de modo que não restem cargas dentro do fluido.

De fato, em eletrohidrodinâmica, considerando fluidos condutores, as cargas migram quase que instantaneamente para a superfície do fluido, podendo-se ignorar a geração de corrente elétrica, desconsiderando o campo magnético. Assim, o campo elétrico *E* é irrotacional ($\nabla \times E =$ **0**) e pode ser descrito pela **Equação** (3.13):

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho_e \tag{3.13}$$

onde ϵ é a permissividade, E o campo elétrico e ρ_e a densidade de carga volumétrica.

Uma vez que o campo elétrico é irrotacional ele pode ser descrito como o gradiente de um potencial (Griffiths, 1999), como mostrado na **Equação (3.14)**:

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi \tag{3.14}$$

em que ϕ repesenta o potencial elétrico. O sinal negativo atribuído à equação acima é puramente convencional.

O termo τ^e na Equação (3.3) é o termo referente ao tensor tensão de Maxwell. Um modo de avaliar sua relação com a força elétrica exercida é supor que a força nas cargas livres e nos dipolos formados devido à polarização das moléculas é transferida diretamente para o fluido (Saville, 1997). O tensor tensão de Maxwell para um fluido incompressível é dado pela Equação (3.15) (Melcher, 1981; Saville, 1997; Chen, 2011):

$$\boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{e}} = \epsilon \left(\boldsymbol{E} \boldsymbol{E} - \frac{1}{2} \boldsymbol{E}^2 \mathbb{I} \right) \tag{3.15}$$

onde I corresponde ao tensor identidade.

As duas forças que devem ser consideradas são a força em relação às cargas livres e a força devido à polarização das moléculas do fluido. A força por unidade de volume devido às cargas livres (força de Coulomb), é dada por $\mathbf{F_q} = \rho_e \mathbf{E}$, e a força exercida em N dipolos de carga q, considerando uma direção **d** é dada por $\mathbf{F_p} = (\mathbf{p} \cdot \nabla)\mathbf{E}$, onde $\mathbf{p} \equiv Nq\mathbf{d}$ (Griffiths, 1999). A partir dessas informações, da lei de Gauss (**Equação** (3.13)) e sabendo que a força elétrica total por unidade de volume é dada pelo divergente do tensor tensão de Maxwell (**Equação** (3.16)),

$$\boldsymbol{F}_{e} = \nabla \cdot \left[\epsilon \left(\boldsymbol{E} \boldsymbol{E} - \frac{1}{2} \boldsymbol{E}^{2} \mathbb{I} \right) \right]$$
(3.16)

podemos obter uma relação para a força elétrica total por unidade de volume, dada pela **Equação** (3.17):

$$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{e}} = \rho_{\boldsymbol{e}} \boldsymbol{E} - \frac{1}{2} \boldsymbol{E}^2 \nabla \boldsymbol{\epsilon} \tag{3.17}$$

O primeiro termo na **Equação** (3.17) é referente à força de Coulomb devido às cargas livres e o segundo termo é referente à polarização das moléculas do fluido.

Para fluidos compressíveis, é incluído um termo na força elétrica, chamado força de eletrotrição, que relaciona a variação da permissividade com a variação da densidade do fluido. Esse termo entraria como uma contribuição isotrópica no termo da pressão. No presente trabalho, assim como em outros trabalhos da literatura (Lastow, Balachandran, 2006; Tomar et al., 2007; Herrera, Popinet, Herrada, 2010), esse termo não foi incluído no modelo, uma vez que estamos tratando de fluidos incompressíveis. Em trabalhos futuros pode-se considerar a possibilidade de inseri-lo no modelo eletrohidrodinâmico.

Finalmente, é necessária uma equação que descreva a conservação de carga. Esta é representada pela **Equação (3.18)**:

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J} = 0 \tag{3.18}$$

sendo *J* a densidade de volume de corrente que representa o fluxo de carga elétrica, e é dado pela **Equação (3.19)**:

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{E} + \rho_e \boldsymbol{U} \tag{3.19}$$

O primeiro termo do lado direito da equação, conhecido como Lei de Ohm, está relacionado à condução de cargas. O segundo termo representa a corrente por unidade de área perpendicular ao fluxo de cargas, devido à convecção de cargas.

A **Tabela 3.1** mostra as principais equações que descrevem um problema eletrohidrodinâmico, podendo-se utilizar as equações referentes a fluidos viscoelásticos ou as equações referentes a fluidos Newtonianos.

Conservação da massa	$\nabla \cdot \boldsymbol{U} = 0$
Conservação da quantidade de movimento	$\frac{\partial(\rho \boldsymbol{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U} \boldsymbol{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{m}}) + \boldsymbol{F}_{e} + \rho \mathbf{g}$
Lei de Gauss	$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = -\rho_e$
Força elétrica	$\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{e}} = \rho_{\boldsymbol{e}}\boldsymbol{E} - \frac{1}{2}\boldsymbol{E}^2\nabla\boldsymbol{\epsilon}$
Conservação de carga	$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot (\sigma \boldsymbol{E} + \rho_e \boldsymbol{U}) = 0$

Tabela 3.1: Equações que descrevem o problema eletrohidrodinâmico.

3.4 MÉTODO VOF

O método VOF (*Volume of Fluid*) é um método de tratamento de superfícies livres desenvolvido por Hirt e Nichols (1981). Ele consiste na definição de uma função indicadora que nos permite saber se o volume de controle está ocupado por um primeiro fluido, por um segundo fluido ou por uma mistura de ambos.

A fração volumétrica em cada volume de controle é representada pela variável α_1 . O valor de α_1 varia entre os valores $0 \le \alpha_1 \le 1$. Uma região totalmente preenchida por um fluido apresenta o valor de $\alpha_1 = 0$, e uma região totalmente preenchida pelo segundo fluido apresentará o valor de $\alpha_1 = 1$. A representação da interface entre os dois fluidos é dada por valores intermediários entre zero e um. Estes devem satisfazer a seguinte equação (**Equação (3.20**)) (Rusche, 2002):

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_1 \boldsymbol{U}) + \nabla \cdot (\alpha_1 (1 - \alpha_1) \boldsymbol{U}_r) = 0$$
(3.20)

onde $\boldsymbol{U}_r = \boldsymbol{U}_1 - \boldsymbol{U}_2$ representa o vetor de velocidade relativa entre os dois fluidos.

O último termo da **Equação (3.20)** é ativado apenas na região de interface devido ao termo $\alpha_1(1 - \alpha_1)$, portanto ele não afeta a solução fora desta região. Assim, o método VOF permite que o escoamento bifásico seja solucionado para ambas as fases separadamente, ou seja, as mesmas equações são solucionadas para ambos os fluidos. A única diferença é se tratando das propriedades físicas dos fluidos. As propriedades físicas do problema são calculadas como uma média baseada na distribuição da fração volumétrica, sendo igual a propriedade de cada fluido em sua respectiva região ocupada, variando apenas na região de interface. Desta forma, para uma propriedade genérica θ , temos a seguinte relação:

$$\theta = \alpha_1 \theta_{fase\,1} + (1 - \alpha_1) \theta_{fase\,2} \tag{3.21}$$

Neste trabalho, as propriedades utilizadas na Equação (3.21) são ρ , μ , $\epsilon \in \sigma$.
Um último termo no lado direito da equação da quantidade de movimento (**Equação (3.3**)) é preciso ser inserido para lidar com problemas bifásicos, de modo que se possa calcular os valores da velocidade e pressão em cada fluido. Esse termo é dado pela seguinte expressão:

$$\gamma\kappa\nabla\alpha_1$$
 (3.22)

Este é o termo referente à tensão superficial, que é valido somente para valores constantes da mesma, como considerado no presente trabalho. A tensão superficial na interface gera um gradiente de pressão adicional resultando em uma força, que é avaliada por unidade de volume utilizando o modelo CSF (*continuum surface force*). Neste termo γ representa o valor da tensão superficial, κ representa a curvatura da superfície livre dada pela **Equação** (3.23) e α_1 representa a fração volumétrica das fases referente ao método VOF.

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_1}{|\nabla \alpha_1|}\right) \tag{3.23}$$

O pacote livre de CFD OpenFOAM já possui um código capaz de simular escoamentos bifásicos utilizando o método VOF. Basicamente, a equação de transporte para uma função indicadora representando a fração volumétrica de uma fase é solucionada simultaneamente com as equações de continuidade e de momento.

4. METODOLOGIA COMPUTACIONAL

Neste capítulo, serão apresentados alguns métodos numéricos utilizados para solucionar problemas de CFD. Posteriormente, será apresentado o algoritmo utilizado no solver para a resolução das equações de eletrohidrodinâmica, assim como o método numérico empregado para as suas soluções. Finalmente, será feita uma breve descrição dos casos simulados com suas respectivas condições de contorno.

4.1 MÉTODOS NUMÉRICOS PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE FLUIDO-DINÂMICA COMPUTACIONAL

No capítulo anterior foi apresentado o conjunto de equações que descrevem um problema típico de eletrohidrodinâmica. Para a solução deste problema, um sistema de equações diferenciais parciais não-lineares deve ser resolvido. Porém, em geral, não é possível obter a solução analítica de tais equações, de forma que se torna necessário a utilização de métodos numéricos para que seja obtida uma solução aproximada das mesmas.

Os métodos numéricos mais tradicionais utilizados para a solução numérica de equações diferenciais são os métodos de diferenças finitas, elementos finitos e volumes finitos. Estes consistem basicamente na discretização das equações diferenciais parciais, aproximando-as por um sistema de equações algébricas para um número discreto de pontos no espaço. O método dos volumes finitos é um dos mais utilizados em mecânica dos fluidos computacional devido ao seu bom desempenho computacional (pouca quantidade de memória e pouco tempo computacional

para soluções) e também por possuir uma boa estabilidade numérica (Xue, Phan-Thien, Tanner, 1995).

O método dos volumes finitos pode ser aplicado de duas formas: a primeira forma é a realização do balanço das propriedades em cada volume elementar; e a segunda consiste na integração, no espaço e no tempo, de cada termo das equações (em suas formas conservativas) sobre um volume elementar. Após a realização da integração para todos os volumes, obtêm-se as equações discretizadas para um conjunto de pontos de uma determinada malha computacional, definindo um sistema de equações algébricas a ser resolvido. No entanto, para que seja realizada a integração, é necessário que seja escolhida uma função que descreva o comportamento do fluxo das variáveis através das superfícies do volume elementar. Estas funções são conhecidas como funções de interpolação. A escolha das mesmas é de extrema importância para que haja uma aproximação dos valores das variáveis nos volumes de controle com maior precisão, assim como da representação dos fluxos advectivos e difusivos através das superfícies destes volumes.

Geralmente são utilizados esquemas de interpolação de baixa ordem, como o UDS (*Upwind Differencing Scheme*) de 1ª ordem ou o CDS (*Central Differencing Scheme*) de 2ª ordem. É possível, em certos casos, obter melhores precisões com esquemas de alta ordem, porém, em problemas de advecção dominante, estes esquemas podem gerar oscilações causando instabilidade numérica e soluções irreais. Já para problemas puramente difusivos, aproximações de alta ordem como por diferenças centrais, por exemplo, são mais aconselháveis (Maliska, 2004).

Os métodos numéricos para a solução dos sistemas lineares podem ser classificados em diretos ou iterativos. Os métodos diretos trabalham com todos os elementos da matriz do sistema, fazendo a inversão completa da matriz, não levando em conta sua esparsidade, o que os torna não muito viáveis, uma vez que o sistema de equações é geralmente muito grande. Os métodos diretos mais conhecidos são a eliminação gaussiana e a decomposição LU. Os métodos iterativos necessitam de um custo computacional muito menor do que os métodos diretos e, por este motivo, são os métodos mais utilizados em CFD. Eles são baseados em procedimentos iterativos que, a partir de uma estimativa inicial, conduzem à solução desejada. Entre os métodos iterativos

estão o método de Gauss-Seidel, o método do Gradiente Conjugado (CG) e seus derivados, como o método dos resíduos generalizado (GMRES), o método das malhas múltiplas (AMG) e o método das malhas múltiplas generalizado (GAMG) (Patankar, 1980; Maliska, 2004; Favero, 2009).

Para a solução do sistema de equações, podem ser utilizadas duas maneiras distintas: ou o sistema será resolvido de forma acoplada, onde todas as equações são resolvidas simultaneamente; ou o sistema pode ser resolvido de forma segregada, onde os sistemas são resolvidos separadamente e com a atualização dos coeficientes. Porém, em problemas em que um escoamento é considerado, ainda há o acoplamento pressão-velocidade para ser resolvido, que é solucionado utilizando-se métodos de correção de pressão. Os principais métodos para a correção da pressão utilizados pelo pacote de CFD OpenFOAM são os métodos SIMPLE (*Semi Implicit Linked Equations*), desenvolvido por Patankar e Spalding (1972), e PISO (*Pressure Implicit Splitting of Operators*) desenvolvido por Issa (1986).

4.2 ALGORITMO UTILIZADO NA RESOLUÇÃO DE ESCOAMENTOS ELETROHIDRODINÂMICOS

Antes de apresentar o algoritmo para a solução de escoamentos eletrohidrodinâmicos, é necessário ressaltar que inicialmente, antes do cálculo do campo elétrico, não há densidade de carga na superfície do fluido ($\rho_e = 0$), pois este ainda não foi afetado pelo campo elétrico. Assim, o primeiro passo antes de o fluido entrar em movimento é fazer o cálculo do potencial e do campo elétrico no domínio. O procedimento para a resolução das equações de eletrohidrodinâmica é o seguinte:

1. Partindo de valores iniciais de ϕ e ρ_e , a equação de Laplace (**Equação (3.13**) para $\rho_e = 0$) é resolvida implicitamente para o potencial elétrico resultando em ϕ^* . Em seguida, o valor do campo elétrico *E* é calculado explicitamente pelo gradiente do potencial elétrico calculado anteriormente (**Equação (3.14**)).

- Utilizando o valor calculado de *E*, as equações da conservação de carga, Equações (3.18) e (3.19), são resolvidas implicitamente para o valor da densidade de carga, obtendo-se ρ_e^{*}, que será utilizado posteriormente para um novo cálculo do potencial elétrico φ^{**}.
- 3. Com os valores obtidos de $E e \rho_e^*$, a força elétrica F_e é calculada a partir da **Equação (3.17)** e substituída na equação da conservação da quantidade de movimento.
- 4. Conhecendo os valores iniciais da velocidade U e da pressão p, a equação da conservação de quantidade de movimento é resolvida implicitamente para a velocidade, resultando em um novo valor U^* . O gradiente da pressão e o divergente da tensão τ são calculados explicitamente utilizando os valores do passo anterior.
- 5. O novo campo de pressão p^* é calculado usando os novos valores da velocidade, U^* . É feita a correção do campo de velocidades explicitamente obtendo U^{**} , de tal forma que U^{**} satisfaça a equação da conservação da continuidade.
- 6. Um novo valor para cada componente do tensor das tensões τ^* é calculado.

A correção da velocidade e os cálculos da pressão (itens 4 e 5) são feitos utilizando o algoritmo PISO, que é mais aconselhável para problemas transientes. No algoritmo PISO, também é possível especificar o número de correções feitas para a pressão. Em problemas transientes é possível, dentro de um mesmo passo de tempo, iterar mais vezes os itens 4 e 5 para obter soluções com uma melhor aproximação (Favero, 2009).

A equação referente à fração volumétrica (**Equação** (3.20)) é a primeira equação a ser incluída no ciclo de tempo. Portanto, além das correções feitas para a equação da quantidade de

movimento, o algoritmo PISO também faz correções para a fração volumétrica α_1 . É possível determinar quantas correções serão feitas em cada passo de tempo, no intuito de tornar as soluções mais estáveis.

4.3 MÉTODOS UTILIZADOS PARA A RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES

Os mesmos esquemas de interpolação foram utilizados em todos os casos, pois estes não mostraram nenhum problema de instabilidade e nem oscilações com relação aos resultados de interesse em cada caso. De fato, os termos mais importantes das equações apresentadas anteriormente são os termos advectivos da equação da conservação de quantidade de movimento e da equação da conservação de carga. Com relação ao termo advectivo da equação da quantidade de movimento, foi mantido o esquema de interpolação original do código já existente para escoamentos multifásicos (*interFoam*). O esquema utilizado foi o *limitedLinearV*, que é baseado no esquema TVD (*total variation diminishing*) de primeira/segunda ordem (Harten, 1983). A letra *V* representa uma versão melhorada do esquema que considera a direção do campo, sendo assim utilizada para campos vetoriais.

Para o termo advectivo (parabólico) da equação da conservação de carga ($\nabla \cdot (\rho_e U)$) foram testados três esquemas de interpolação. Entre eles estão: o *upwind*, esquema de primeira ordem; o *Vanleer*, esquema de maior ordem, também baseado no esquema TVD (van Leer, 1974); e o *limitedLinear*, já citado anteriormente. Porém, os três esquemas apresentados mostraram resultados praticamente idênticos para as variáveis avaliadas e, por esse motivo, não serão mostrados os resultados. O esquema escolhido, nesse caso, foi o *upwind* por ser um dos mais utilizados para os termos advectivos.

O esquema utilizado para o termo difusivo (elíptico) da **Equação (3.13)** foi o *linear corrected*, utilizado para interpolações lineares baseado no esquema de diferenças centrais de segunda ordem, mais apropriado para termos difusivos.

Para a solução dos sistemas lineares discretizados são utilizados métodos-base e um précondicionador, pois, dependendo do procedimento iterativo aplicado, a matriz final pode não ser diagonalmente dominante, sendo esta a condição necessária para a convergência do método (Jasak, 1996; Favero, 2009). Assim, foi utilizado o método CG (*Conjugate Gradient*) com um pré-condicionamento AMG (*algebraic multi-grid*) para a pressão. Para a velocidade, utilizou-se o método PBiCG (*Preconditioned Bi-Conjugate Gradient*) com um pré-condicionamento em DILU (*Diagonal incomplete-LU*). Para o potencial elétrico, foi utilizado o PCG (*Preconditioned Cojugate Gradient*) com um pré-condicionamento em DIC (*Diagonal incolmplete-Cholesky*) e para a densidade de carga volumétrica, foi utilizado o PBiCG com um pré-condicionamento em DILU. Em problemas viscoelásticos, foi mantido o método BiCGStab (*Stabilized Bi-Conjugate Gradient*) com um pré-condicionamento em Cholesky para a tensão. As tolerâncias absolutas para a pressão, potencial elétrico e densidade de carga foram de 10^{-7} , e para a velocidade e tensão foram de 10^{-6} . A tolerância representa o nível em que o resíduo médio seja pequeno o bastante para que a solução possa ser considerada precisa.

Os métodos utilizados, descritos acima, foram selecionados, pois estes são os que melhor funcionaram para que houvesse a convergência das soluções. Para mais informações com relação aos esquemas que podem ser utilizados no programa, sugere-se ao leitor consultar o manual do usuário (*User Guide*) do OpenFOAM (seções 4.4 e 4.5).

4.4 CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO UTILIZADAS NOS CASOS

Nesta seção, serão apresentados brevemente os casos que foram estudados no presente trabalho com suas respectivas condições iniciais e de contorno. Mais informações à respeito dos parâmetros utilizados e da descrição do problema serão apresentadas no próximo capítulo.

4.4.1 Interface Horizontal

Neste problema, dois fluidos imiscíveis são considerados. Os fluidos são tidos como puramente dielétricos e estão inseridos entre duas placas paralelas, onde um potencial elétrico está sendo aplicado. Uma interface horizontal (paralela às placas) é definida entre os dois fluidos, de tal forma que ela esteja localizada exatamente a mesma distância de ambas as placas. Um esboço da geometria está apresentado na **Figura 4.1**, onde a linha central representa a interface entre os dois fluidos:



Figura 4.1: Esboço do caso da interface horizontal.

As condições de contorno utilizadas para o caso podem ser observadas na **Tabela 4.1**. As fronteiras c e d (lados esquerdo e direito do domínio) foram definidas com a condição de simetria (*symmetry*). Esta condição implica que a componente do gradiente normal à fronteira seja sempre fixada igual a zero, e que as componentes paralelas à mesma sejam dadas pela projeção das componentes internas ao domínio (Jasak, 1996).

C. C.	p	U	$lpha_1$	$ ho_e$	ϕ
a	$\nabla p = 0$	$\boldsymbol{U}=(0,0,0)$	$\nabla \alpha_1 = 0$	$\nabla \rho_e = 0$	$\phi = \phi_0$
b	abla p = 0	$\boldsymbol{U}=(0,0,0)$	$\nabla \alpha_1 = 0$	$\nabla\rho_e=0$	$\phi = 0$

Tabela 4.1: Condições de contorno para o caso da interface horizontal; ver Figura 4.1.

As condições para a velocidade é a de não-escorregamento nas paredes e, para o potencial elétrico, é definida uma voltagem na placa superior e uma voltagem nula na placa inferior. O passo de tempo utilizado foi $\Delta t = 10^{-4}$ s, e o número de Courant, definido para uma célula pela **Equação (4.1)**, foi mantido igual a *Co* = 0.1. Esses valores foram mantidos no intuito de manter a convergência da solução. Em todos os problemas, para valores de *Co* = 0.1, houve a convergência da solução. Em alguns casos, foram testados valores maiores do número de Courant, porém, eventualmente, a solução divergia.

$$Co = \frac{\delta t |\boldsymbol{U}|}{\delta x} \tag{4.1}$$

onde δt é o passo de tempo utilizado, $|\boldsymbol{U}|$ é a magnitude da velocidade através de um volume de controle específico e δx é o comprimento da célula na direção da velocidade.

4.4.2 Gota Condutora em um Campo Elétrico Uniforme

Uma gota condutora imersa em um fluido (ambos imiscíveis) está inserida entre duas placas paralelas, onde um potencial elétrico está sendo aplicado. Assim como o problema anterior, este é considerado um problema bidimensional e simétrico, com o eixo de simetria passando pelo centro da gota. Um esboço do problema pode ser observado na **Figura 4.2**:



Figura 4.2: Esboço do caso da gota condutora em um campo elétrico uniforme.

A fronteira *d* foi definida como o eixo de simetria, cujas condições já foram explicadas anteriormente. A fronteira *c* foi definida como uma abertura, de forma que, tanto o fluido interno ao domínio, quanto o fluido externo, possam escoar livremente através dela. Esta condição de abertura necessita de condições de contorno específicas. Entre elas estão: a pressão, definida pelo comando *totalPressure*, que consiste em uma condição de valor fixo (*fixedValue*) calculada a partir de uma pressão p_0 (especificada previamente) e uma velocidade local; a velocidade, definida pelo comando *pressureInletOutletVelocity*, que aplica o valor do gradiente igual a zero para todas as componentes, exceto em locais onde há entrada de fluido, onde, nesse caso, uma condição de valor fixo é aplicada à componente tangencial; e a fração volumétrica α_1 , definida pelo comando *inletOutlet*, que é dado por um valor nulo para o gradiente, quando o fluido está escoando para fora do domínio e definido como um valor fixo quando o fluido está entrando.

Na abertura, tanto o potencial elétrico como a densidade de carga, foram definidos pela condição de gradiente nulo. As outras condições de contorno referentes ao problema podem ser visualizadas na **Tabela 4.2**.

C. C.	p	U	$lpha_1$	$ ho_e$	φ
а	$\nabla p = 0$	$\boldsymbol{U}=(0,0,0)$	$\nabla \alpha_1 = 0$	$\nabla \rho_e = 0$	$\phi = \phi_0$
b	abla p = 0	$\boldsymbol{U}=(0,0,0)$	$\nabla \alpha_1 = 0$	$ abla ho_e = 0$	$\phi = 0$

Tabela 4.2: Condições de contorno para o caso da gota condutora; ver Figura 4.2.

Problemas em que fluidos viscoelásticos são considerados foram definidos, para o valor da tensão, as condições de gradiente nulo nas paredes (placas), e um valor fixo igual a zero para todas as outras entradas. O passo de tempo foi mantido constante, $\Delta t = 10^{-4}$ s, durante toda a simulação, tanto para fluidos newtonianos, quanto para fluidos viscoelásticos. O número de Courant utilizado foi *Co* = 0.1.

4.4.3 Jato Condutor sob o efeito de um Campo Elétrico

Um jato é estirado na saída de um tubo capilar devido ao efeito de um campo elétrico. O jato possui uma vazão constante na saída do tubo. Um potencial elétrico é aplicado ao tubo e à placa superior, sendo considerado seu valor nulo na abertura inferior. O problema é construído de tal forma que permita que o fluido escoe pela abertura inferior para não afetar o valor do campo elétrico dentro do domínio. O problema é considerado bidimensional e simétrico. O esboço da geometria utilizada pode ser visualizado na **Figura 4.3**:



Figura 4.3: Esboço do caso do jato condutor sob o efeito de um campo elétrico.

Algumas condições específicas foram definidas, como a fronteira f, que foi definida como o eixo de simetria, e d, que foi definida como uma abertura lateral (utilizando as condições citadas anteriormente). A **Tabela 4.3** mostra as outras condições utilizadas no problema:

C. C.	р	U	$lpha_1$	$ ho_e$	φ
а	$\nabla p = 0$	$\boldsymbol{U}=(0,0,0)$	$\nabla \alpha_1 = 0$	$\nabla \rho_e = 0$	$\phi = \phi_0$
b	p = 0	$\nabla \boldsymbol{U} = 0$	$\nabla \alpha_1 = 0$	$ abla ho_e = 0$	$\phi = 0$
С	abla p=0	$\boldsymbol{U}=(0,0,0)$	$\nabla \alpha_1 = 0$	$ abla ho_e = 0$	$\phi = \phi_0$
e	abla p = 0	$\boldsymbol{U}=(0,-\boldsymbol{v},0)$	$\alpha_1 = 1$	$ ho_e=0$	$\phi = \phi_0$

Tabela 4.3: Condições de contorno para o caso do jato condutor; ver Figura 4.3.

A fronteira *e* representa a entrada do tubo (*inlet*), por isso foi determinada uma velocidade v no local e um valor de α_1 igual a um, uma vez que apenas o fluido da fase representada pelo índice 1 está entrando. Também é necessário definir um valor de densidade de carga igual a zero ($\rho_e = 0$) na entrada, pois, neste local, o fluido ainda não foi afetado pelo campo elétrico, consequentemente ele ainda não possui cargas acumuladas em sua superfície. O potencial elétrico foi definido na placa superior, na entrada e no tubo, condições estas também utilizadas por outros autores (Lastow, Balachandran, 2006; Tomar *et al.*, 2007). Na placa inferior (fronteira *b*), foram utilizadas condições, de modo que o fluido escoasse para fora do domínio. Estas condições foram necessárias para que o acúmulo de fluido na parte inferior do domínio não afetasse o campo elétrico. Lastow e Balachandran (2006) utilizaram a mesma condição para a placa inferior. No caso da utilização de fluidos viscoelásticos, as mesmas condições citadas na seção anterior foram utilizadas. O passo de tempo utilizado foi variado entre 10^{-6} s e 10^{-7} s, e foi utilizado um Co = 0.1.

4.5 COMANDO SETFIELDS NO OPENFOAM

Em todos os casos citados acima foi necessário especificar uma condição inicial nãouniforme para a fração volumétrica. Por exemplo, a gota (no caso da gota condutora sob o efeito de um campo elétrico uniforme) precisa ser gerada no interior do domínio, antes que a solução das equações se inicie. Então, se torna essencial a criação da mesma por meio de uma condição inicial, que define o local em que a gota deve estar assim como o seu formato inicial.

No OpenFOAM essa condição é incluída por meio de um comando chamado *setFields*, comando este que requer um dicionário chamado *setFieldsDict*. Esse dicionário permite que sejam especificadas as células onde a fração volumétrica α_1 seja igual a 1, ou seja, onde a fase 1 deve estar localizada e os locais onde $\alpha_1 = 0$. É possível, também, que sejam criadas formas específicas, como por exemplo caixas ou esferas.

Assim, no problema da interface horizontal foi criada uma caixa (com $\alpha_1 = 1$) na parte superior do domínio gerando a interface horizontal no centro entre as placas. No caso da gota condutora, foi criada uma esfera com centro sobre o eixo de simetria e equidistante das placas paralelas. Já para o problema do jato condutor, foi criada uma caixa de fluido partindo da entrada *e* (ver **Figura 4.3**) até a abertura inferior *b*.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, serão discutidos os casos utilizados para a validação do código numérico desenvolvido, assim como serão apresentados os resultados obtidos pelo mesmo. Os resultados serão comparados com resultados teóricos e experimentais da literatura. Além disso, serão apresentados outros casos simulados que serão analisados qualitativamente e quantitativamente.

5.1 VALIDAÇÃO DO CÓDIGO E RESULTADOS

Dois casos foram estudados no intuito de mostrar o funcionamento do código desenvolvido. Estes foram analisados e comparados com resultados da literatura e resultados teóricos. A escolha dos casos foi baseada no fato de diversos autores os terem escolhido como casos de validação de soluções numéricas de modelos de escoamentos eletrohidrodinâmicos (Tomar *et al.*, 2007; Poppel, 2010; Herrera, Popinet, Herrada, 2011). Para situações em que apenas fluidos puramente dielétricos são considerados, é fixado um valor zero para a condutividade de ambos, mostrando a versatilidade do código numérico proposto.

O primeiro caso analisado se trata de um caso simples, que é utilizado para mostrar o salto do campo elétrico em uma interface horizontal entre dois fluidos puramente dielétricos. Este problema é utilizado basicamente para validar a equação de Laplace (**Equação (3.13)** sem o termo de densidade de carga), uma vez que para fluidos puramente dielétricos não há íons livres, conseqüentemente não há densidade de carga na interface e, portanto, apenas efeitos de polarização são considerados (Griffiths, 1999).

O segundo caso de estudo foi o caso da gota, já citado anteriormente. Ele consiste basicamente de uma gota imersa em um fluido (fluidos imiscíveis), onde um potencial é aplicado entre duas placas e esse, devido à polarização e à ionização, gera uma força elétrica na interface dos dois fluidos deformando a gota em questão. É um caso muito mais complexo e completo do que o caso anterior e serve, justamente por este motivo, para a validação do código.

5.1.1 Interface Horizontal

No intuito de validar a equação de Poisson, dois fluidos puramente dielétricos são considerados. Estes fluidos se localizam entre placas paralelas, onde um potencial elétrico ϕ é aplicado na parede superior e zero na parede inferior. A **Figura 5.1** mostra um esquema da geometria utilizada, assim como a localização do potencial que está sendo aplicado.



Figura 5.1: Esboço da geometria utilizada para o caso da interface horizontal

As permissividades $\epsilon_l \in \epsilon_g$ correspondem às permissividades do líquido e do gás, respectivamente. A interface está localizada a uma altura **H** da parede inferior e a parede superior está localizada a uma altura **L** da mesma. Na simulação foi utilizada uma relação **L/H = 2** e a relação entre as permissividades $\epsilon_r = \epsilon_l/\epsilon_g = 70$. O potencial elétrico aplicado foi de $\phi =$ **100 V**. Os efeitos gravitacionais no problema foram desconsiderados. Os dados utilizados foram os mesmos utilizados no trabalho de Tomar *et al.* (2007).

A solução analítica para os campos elétricos acima e abaixo da interface (considerando fluidos puramente dielétricos) é dada por (Tomar *et al.*, 2007; Poppel, 2010):

$$E^{l} = \frac{\phi}{(L-H) + \left(\frac{\epsilon_{l}}{\epsilon_{g}}\right)H}$$
(5.1)

$$E^{g} = \frac{\phi}{\left(\frac{(L-H)}{(\epsilon_{l}/\epsilon_{g})} + H\right)}$$
(5.2)

onde E^l e E^g são o campo elétrico na fase liquida e na fase gasosa, respectivamente.

Para os testes de convergência de malha, foram utilizadas três malhas diferentes. A descrição de cada malha está relacionada na **Tabela 5.1**. O refinamento da malha foi feito no centro do domínio, como mostrado na **Figura 5.2**, no intuito de reduzir o tamanho da interface entre os dois fluidos. A comparação entre as malhas deve ser feita para que se possa escolher qual delas reduzirá o custo computacional da simulação (malha com o menor número de volumes de controle), mas que também mantenha a qualidade dos resultados.



Figura 5.2: Malha computacional (Malha B) para o problema de interface horizontal

Por se tratar de um problema unidimensional não haveria a necessidade de construir malhas tão refinadas como as que foram feitas. No entanto, os resultados da simulação foram avaliados no primeiro passo de tempo (problema em regime permanente). Assim, não houve um alto custo computacional e o refinamento na região da interface pôde ser mantido.

 $\Delta x_{min}/L^*$ $\Delta y_{min}/L^*$ Malha Número de células (VC) 5000 0.02 0,00258 Α B 20000 0.01 0,00127 С 45000 0,0067 0,00085

Tabela 5.1: Características das malhas para o caso da interface horizontal

* Os valores de $\Delta x_{min}/L$ e $\Delta y_{min}/L$ correspondem aos menores volumes de controle (VC) divididos pela diferença de altura entre as placas *L*.

Os resultados para as três diferentes malhas da variação do campo elétrico entre um fluido e o outro (para qualquer posição de *x*) pode ser visualizado na **Figura 5.3**. Pode-se observar que há pouca variação entre os resultados das três diferentes malhas.



Figura 5.3: Variação do campo elétrico entre as placas paralelas normalizado pelo campo na fase líquida para a malha A, B e C.

Pode-se analisar o erro estimado das malhas comparando as menos refinadas (Malhas A e B) com a mais refinada (Malha C). Temos o erro relativo máximo de cada uma delas com relação à malha C dado na **Tabela 5.2**. Lembrando que neste caso o interesse é avaliar apenas a variação do campo elétrico em cada fluido, então não há necessidade de avaliar os erros para outro parâmetro do problema.

Malha	Erro relativo máximo (%)		
	E/E^l		
Α	0,1596		
В	0,0476		

Tabela 5.2: Erro relativo máximo, em percentual, das malhas A e B em relação à malha C.

O erro relativo máximo, em percentual, é dado por:

$$\% ERMax = max_{j=1}^{N} \left(\frac{|X_{j}^{i} - X_{j}^{ref}|}{max(|X^{ref}|)} \right) \times 100$$
(5.3)

onde X_j^i representa os pontos da curva em questão, o índice *i* representa as malhas A ou B e *j* corresponde aos pontos da curva que vão de 1 a *N*. O termo X_j^{ref} corresponde aos pontos da malha de referência, que neste caso é a malha C. O termo $max(|X^{ref}|)$ seleciona o módulo do valor máximo da malha de referência e o termo $max_{j=1}^N$ retorna o maior desvio dentre todos os pontos analisados.

Analisando a **Tabela 5.2** podemos observar que as duas malhas, quando comparadas com a malha de referência, possuem um erro relativo máximo menor que 1%. Assim, pode-se utilizar qualquer uma das malhas para analisar o problema. Sendo assim, a malha A, que corresponde a malha com menos volumes de controle, foi utilizada para comparar com os resultados teóricos dados pelas **Equações (5.1)** e (**5.2**).

A **Figura 5.4** mostra os resultados da simulação comparados com a solução analítica. Podemos observar que os resultados da simulação apresentaram praticamente o mesmo resultado previsto pela solução analítica.



Figura 5.4: Distribuição do campo elétrico normalizado para o caso da interface horizontal

O erro relativo máximo, em porcentagem, da simulação comparada com a solução analítica é apresentado na **Tabela 5.3**. Podemos observar que a porcentagem do erro é menor que 1% comprovando a validade da solução computacional.

Tabela 5.3: Erro relativo máximo, em percentual, da simulação com relação à solução analítica.

Malha	Erro relativo máximo (%)		
	E/E^l		
Α	0,24		

Em fluidos puramente dielétricos, o campo elétrico tende a permanecer constante no interior de cada fluido, diferentemente de fluidos pouco condutores, onde o acúmulo de densidade de carga na interface modifica o campo elétrico. Portanto, este era um resultado já esperado considerando que o campo elétrico, neste caso, é constante em cada fluido.

5.1.2 Gota Newtoniana Condutora em um Campo Elétrico

O segundo caso, como dito anteriormente, é o estudo de uma gotícula imersa em um fluido imiscível sob o efeito de um campo elétrico. Esse é um caso muito mais complexo do que o anterior por se tratar de um fluido dielétrico e condutor. A **Figura 5.5** mostra o esquema do problema.



Figura 5.5: Esboço do problema da gotícula condutora em um campo elétrico

Uma gota é colocada entre duas placas paralelas que possuem uma diferença de potencial elétrico. Essa diferença de potencial gera um campo elétrico uniforme entre as placas que polarizará e/ou ionizará a gota em questão, gerando, assim, uma força elétrica na superfície da mesma. Se a gota for pequena o bastante quando comparada com o campo elétrico aplicado, ela não modificará significativamente o mesmo, do contrário, o próprio campo irá ser alterado.

Experimentalmente, foi observado que um campo elétrico uniforme é capaz de alongar uma gota condutora imersa em um fluido não-condutor em um formato próximo a um esferóide prolato (Taylor, 1964). Quando ambos os fluidos forem puramente dielétricos também há deformação e sempre em um formato prolato. Em alguns casos, devido à existência de

condutividade nos fluidos, pode ser observada a deformação da gota em um esferóide oblato (Taylor, 1966).

No problema descrito acima, alguns parâmetros têm grande relevância nos resultados da deformação da gota. Esses quando definidos com o índice 1 representam as propriedades da gota e quando definidos pelo índice 2 representam propriedades do fluido ao redor. Entre eles estão: o valor $Q = \epsilon_1/\epsilon_2$, que representa a razão entre as permissividades; o valor $R = \sigma_1/\sigma_2$, razão entre as respectivas condutividades; o valor $\beta = \mu_1/\mu_2$, razão entre as viscosidades dinâmicas; e o valor $M = \rho_1/\rho_2$, razão entre as densidades. Em todos os problemas considerados daqui em diante (quando não citado) foram utilizados os parâmetros $\beta = 1$ e M = 1, de forma que queremos avaliar apenas a influência dos parâmetros elétricos na deformação. A maior parte dos trabalhos utiliza esses valores para β e M, entre eles estão: Ha, Yang, 1995; Hua, Lim, Wang, 2008; Herrera, Popinet, Herrada, 2011. O raio da gota foi determinado como $R_d = 0.005$ m e a distância entre as placas é de L = 0.1 m, que correspondem às mesmas dimensões utilizadas por Hua, Lim e Wang (2008).

A gota pode se deformar de duas maneiras distintas: em um esferóide prolato ou em um esferóide oblato. A **Figura 5.6** mostra os dois tipos de deformação possíveis para a gota.



Figura 5.6: Tipos de deformação de uma gota condutora

Taylor (1966) caracterizou a deformação total da gota por meio do parâmetro *D* definido pela expressão:

$$D = \frac{a-b}{a+b} \tag{5.4}$$

onde *a* e *b* representam o tamanho da deformação na direção paralela e perpendicular ao campo elétrico, respectivamente. Dessa forma, D > 0 representa uma deformação da gota em um formato esferoidal prolato, e D < 0, um formato esferoidal oblato.

Foi sugerida uma formulação matemática que indica a existência de condições em que a gota permanece sem deformação (Taylor, 1966). Taylor (1966) expressou outra equação para a deformação da gota, no entanto, essa era válida apenas para pequenas deformações (Ha, Yang, 1995; Feng, Scott, 1996). Posteriormente, Feng e Scott (1996) derivaram, a partir da equação definida por Taylor, uma equação para a deformação total da gota (assumindo que ambos os fluidos são condutores) em função de suas propriedades e da intensidade do campo elétrico. Essa equação, porém, não é válida para grandes deformações (Feng, Scott, 1996; Ha, Yang, 2000) e é dada por:

$$D = \frac{9}{16} \frac{Ca_E}{(2+R)^2} \left[1 + R^2 - 2Q + \frac{3}{5}(R-Q)\frac{2+3\beta}{1+\beta} \right]$$
(5.5)

Nessa equação o número de capilar elétrico é definido por $Ca_E = E_{\infty}^2 R_d \epsilon_2 / \gamma$, em que $E_{\infty} = \Delta \phi / L$ é o campo elétrico externo (valor do campo elétrico em pontos distantes da gota), R_d é o raio inicial da gota, ϵ_2 a permissividade do fluido externo e γ é a tensão superficial. R é a razão entre as condutividades, Q a razão entre as permissividades e β a razão entre as viscosidades, que foi definida sempre igual a 1. O número capilar elétrico representa a razão entre as forças elétrica e interfacial na gota. Dessa forma, mantendo dois dos três parâmetros fixos (Ca_E , R ou Q) podemos avaliar o efeito de alguma das propriedades na deformação da gota.

O teste de convergência de malha foi feito utilizando três malhas diferentes, e, como anteriormente, foram comparadas as duas malhas menos refinadas (malhas A e B) com a malha mais refinada (malha C). A **Tabela 5.4** mostra as características das três malhas, com seus respectivos volumes de controle e com as comparações entre eles e o tamanho do domínio. As

malhas construídas foram todas hexaédricas com refinamento próximo à gota, devido ao tamanho da mesma com relação ao domínio todo (como mostra a **Figura 5.7**). Poderia ter sido feito um refinamento maior na interface entre os dois fluidos, porém o custo computacional aumentaria significativamente. Além disso, foi utilizada uma malha simétrica bidimensional, justamente para reduzir o mesmo. Simulações utilizando o domínio completo também foram feitas para que fossem extraídas imagens ilustrativas do problema.

Tabela 5.4: Características das malhas para o caso da gota condutora

Malha	Número de células (VC)	$\Delta x_{min}/(L/2)^*$	$\Delta y_{min}/L^*$
Α	7700	0,0066	0,0033
В	13500	0,0040	0,0020
С	18200	0,0024	0,0012

* Os valores de $\Delta x_{min}/(L/2)$ e $\Delta y_{min}/L$ correspondem aos menores volumes de controle

(VC) divididos pela diferença de altura entre as placas L.



Figura 5.7: Malha computacional bidimensional simétrica B para o caso da gota condutora

Para observar quantitativamente os resultados das três malhas, foram analisados dois gráficos. O primeiro gráfico, **Figura 5.8**, mostra a variação do campo elétrico desde o centro da

gota, L = 0.05m, até a placa superior, L = 0.1m (no eixo de simetria). O segundo gráfico, Figura 5.9, representa a análise da deformação da gota para a variação do Ca_E .



Figura 5.8: Salto do campo elétrico na interface da gota usando as malhas A, B e C.

O campo elétrico E foi normalizado com o campo elétrico $E_{inf} = E_{\infty} = \Delta \emptyset / L$ e a distância do centro da gota até a placa superior foi normalizada pela distância entre as placas.



Figura 5.9: Deformação da gota variando o número capilar elétrico para as malhas A, B e C

A **Tabela 5.5** mostra o erro relativo máximo, em porcentagem, para o campo elétrico e para a deformação da gota utilizando as malhas A e B comparadas com a malha C.

Malha	Erro relativo máximo (%)		
	E/E_{∞}	D	
Α	10,32	1,54	
В	7,86	1,38	

Tabela 5.5: Erro relativo máximo, em percentual, das malhas A e B com relação a malha C,para as curvas representadas na Figura 5.8 e na Figura 5.9.

Podemos observar que o erro relativo máximo para a variação do campo elétrico, tomando como padrão a malha C com relação à malha A, é de mais de 10%, enquanto que para a malha B não chega a 8%, o que não deixa de ser um erro razoavelmente grande. Já para a deformação da gota, o erro foi muito baixo para ambas as malhas, porém o erro da malha B foi ainda menor que o da A, o que nos mostra que o refinamento feito da malha A para a B reduziu o erro dos resultados. No entanto a malha C possui um número alto de volumes de controle, que exige um elevado tempo de simulação. Dessa maneira, a malha B passa a ser a com o melhor custo benefício, uma vez que ela fornece resultados relativamente bons e com um baixo custo computacional.

Para a análise do problema, foram variados alguns parâmetros e em seguida avaliados os respectivos resultados com relação à teoria. Segundo Taylor (1966), os potenciais elétricos ϕ_1 e ϕ_2 , dentro e fora da esfera, respectivamente, variam em coordenadas polares segundo as **Equações (5.6)** e (5.7):

$$\phi_1 = E_\infty \frac{3r\cos\theta}{2+R} \tag{5.6}$$

$$\phi_2 = E_{\infty} \cos \theta \left(r + \frac{1-R}{2+R} \frac{R_d^3}{r^2} \right)$$
(5.7)

onde r representa a variação da distância do centro da esfera até a placa superior, R representa a razão entre as condutividades, R_d o raio da esfera e E_{∞} o campo elétrico externo. O campo

elétrico nos meios 1 e 2 pode ser calculado utilizando-se a **Equação** (**3.14**). Portanto, obtemos os seguintes resultados para os campos elétricos normais e tangentes à superfície, para os fluidos interno 1 e externo 2 à esfera:

$$\boldsymbol{E_{1n}} = \frac{\partial \phi_1}{\partial r} = \frac{3E_\infty \cos \theta}{2+R} \tag{5.8}$$

$$\boldsymbol{E}_{1t} = \frac{\partial \phi_1}{\partial \theta} = -E_{\infty} \sin \theta \frac{3r}{2+R}$$
(5.9)

$$\boldsymbol{E_{2n}} = \frac{\partial \phi_2}{\partial r} = E_{\infty} \cos \theta \left[1 + \frac{2(R-1)}{2+R} \frac{R_d^3}{r^3} \right]$$
(5.10)

$$\boldsymbol{E_{2t}} = \frac{\partial \phi_2}{\partial \theta} = -E_{\infty} \sin \theta \left[r + \frac{1 - R}{2 + R} \frac{R_d^3}{r^2} \right]$$
(5.11)

os índices n e t representam as componentes normais e tangenciais do campo elétrico respectivamente.

Podemos observar pelas **Equações** (5.8) e (5.10), que o campo elétrico normal dentro da esfera permanece constante para um valor constante de *R*. Já o campo elétrico normal fora da esfera varia com a distância *r* da mesma. Estas previsões teóricas são coerentes, uma vez que quanto mais longe da gota condutora menos o campo elétrico é afetado pela mesma, dessa forma quando $r \rightarrow \infty$ temos que $E_{2n} \rightarrow E_{\infty}$, que é justamente o campo elétrico externo.

Para as componentes tangenciais do campo elétrico (**Equações (5.9) e (5.11**)), quando avaliados na superfície, ou seja, quando $r = R_d$, temos que ambos os valores de dentro e fora da superfície são iguais. Resultado que já era esperado, uma vez que em qualquer superfície os campos elétricos tangentes de dentro e fora da mesma serão sempre iguais (Griffiths, 1999).

A **Figura 5.10** mostra o resultado da simulação para o campo elétrico. Para essa simulação, foi determinado R = 2,5, Q = 2 e o potencial elétrico foi definido como $\emptyset = 10$ kV.



Figura 5.10: Campo elétrico gerado em torno de uma gota carregada.

A partir da imagem, foram extraídos os valores absolutos do campo elétrico e comparados com os valores teóricos descritos pelas **Equações** (5.8) e (5.10). Os dados retirados correspondem a uma angulação equivalente a $\theta = 180^\circ$, com r variando entre $0,05m \le r \le$ 0,1m, ou seja, do centro da esfera até a placa superior. Os valores foram normalizados pelo valor do campo elétrico externo E_{∞} . A Figura 5.11 mostra os resultados comparados com a teoria.



Figura 5.11: Salto do campo elétrico simulação comparada com a teoria

É possível observar que exatamente na interface entre os dois fluidos há um grande aumento do valor do campo elétrico. Isso se explica pelo fato de ser o ponto exato onde o valor da densidade de carga é maior. Esse acúmulo de densidade de carga na interface modifica e intensifica o campo elétrico no local. Assim, com um maior valor de densidade de carga, observa-se um maior valor do campo elétrico (**Equação (3.13**)), por isso, quanto mais distante da gota mais o campo elétrico tende ao campo externo.

Apesar de o salto do campo elétrico poder ser observado na interface dos dois fluidos para ambos os gráficos (ponto mais alto dos gráficos), a simulação não está completamente coerente com o resultado analítico nessa região. Taylor (1966) afirma (por meio de uma solução analítica) que, afim de que as **Equações (5.8)** e (**5.10**) existam, deve haver uma densidade de carga ρ_e tal que a **Equação (5.12)** seja satisfeita.

$$\rho_e = -\frac{3E_{\infty}\cos\theta}{4\pi} \left(\frac{\epsilon_2 R - \epsilon_1}{2 + R}\right) \tag{5.12}$$

Assim, vemos que o valor do campo elétrico na interface também depende das permissividades dos fluidos. Portanto, quando se altera o valor das permissividades, se altera o valor do campo elétrico, que por sua vez altera o valor da densidade de carga e assim por diante. Dessa forma, não é fácil obter condições de simulação onde a relação entre as permissividades de ambos os fluidos faça com que a **Equação (5.12)** seja satisfeita. A **Figura 5.12** mostra os diferentes saltos do campo elétrico para diferentes valores de Q (razão entre a permissividade do fluido 1 com o fluido 2).



Figura 5.12: Salto do campo elétrico variando o valor da razão entre as permissividades Q.

Pode-se observar que quanto maior o valor de Q, o salto do campo elétrico passa a ser maior também, no entanto, o valor do campo elétrico no interior da esfera diminui significativamente. Então, enquanto o ponto máximo do campo se aproxima da teoria, os valores constantes no interior da gota se afastam. De fato, a capacidade de um fluido se polarizar depende do valor da permissividade, esta quando toma valores muito altos tende a reduzir os efeitos do campo elétrico no interior do fluido e, da mesma forma, tende a aumentar os efeitos em sua superfície. Outro parâmetro que pode ser avaliado é o tempo de simulação. Conforme a gota permanece sob o efeito do campo elétrico, o valor da densidade de carga é alterado, conseqüentemente o campo elétrico é feita apenas para a gota não deformada. A gota permanece sem deformação apenas nos instantes iniciais em que ela permanece sob o efeito do campo elétrico. Quanto maior o valor do campo, mais rapidamente a gota se deformará. A **Figura 5.13** mostra a variação do campo elétrico utilizando Q = 2 de 0,01 - 0,04 segundos em que a esfera permanece sob o efeito do campo elétrico.



Figura 5.13: Salto do campo elétrico variando o tempo t de simulação

O fato de estes parâmetros influenciarem os valores da magnitude do campo elétrico mostra a dificuldade que se tem em alcançar o valor exato da teoria. Porém, a simulação prevê o aumento do campo elétrico, assim como o decaimento do mesmo até o valor do campo externo, o que representam bons resultados. A **Figura 5.14** mostra a distribuição de densidade de carga na gota. Pode-se observar que as cargas positivas migraram instantaneamente para a parte inferior da gota devida à direção imposta pelo o campo elétrico. Por conseqüência, as cargas negativas migraram para a parte superior, e, como esperado, com os mesmos valores das cargas positivas, porém com sinais trocados.



Figura 5.14: Distribuição de densidade de carga na interface da esfera condutora

É justamente nos locais da interface onde estão localizadas as cargas que podemos observar os maiores valores do campo elétrico. A **Figura 5.15** mostra a força elétrica aplicada na interface entre os dois fluidos. Essa não existe apenas pela presença de densidade de carga, pois mesmo para fluidos puramente dielétricos, é possível observar a presença de uma força atuante na superfície.



Figura 5.15: Visualização da força elétrica em uma esfera condutora.

A **Equação** (3.17) mostra que a magnitude e a direção da força elétrica dependem tanto da permissividade quanto da condutividade. A primeira devido ao seu gradiente e a segunda devido ao acúmulo de densidade de carga na interface.

Para analisarmos os efeitos dos diversos parâmetros sobre um fluido condutor, podemos observar como a gota se deforma quando alteramos o número capilar elétrico Ca_E , o valor de R e o valor de Q. Cada um destes parâmetros irá influenciar na magnitude e na direção da força, que, por sua vez, deformará a gota em um formato esferoidal prolato ou oblato. Os resultados analíticos para a deformação podem ser obtidos a partir da **Equação** (5.5). A deformação da gota, quando variado o número capilar elétrico, pode ser observada na **Figura 5.16**. Quando há uma variação no potencial elétrico \emptyset , há uma variação no campo elétrico externo E_{∞} , que por sua vez varia o valor de Ca_E .



Figura 5.16: Gráfico da deformação da gota variando o número capilar elétrico Ca_E.

Esses valores foram obtidos mantendo $R \in Q$ constantes, sendo R = 2,5, $Q = 2,0 \in \beta = 1,0$. Também foram obtidos os valores de D para a máxima deformação da gota.

Podemos observar que, para baixos valores de Ca_E , os valores simulados apresentaram excelente concordância com a **Equação** (5.5), porém para altos valores de Ca_E , os valores simulados apresentam maior discrepância com os resultados analíticos. Hua, Lim e Wang (2008)

também obtiveram resultados discrepantes com a teoria para altas deformações da gota mesmo utilizando um fator de 9/8 ao invés de 9/16 na **Equação** (5.5) (Herrera, Popinet, Herrada, (2011)). No entanto, como foi dito anteriormente, a **Equação** (5.5) é adequada para pequenas deformações; assim, pode-se afirmar que os resultados simulados apresentaram resultados fisicamente coerentes em relação à deformação da gota. Como o valor de *D* é sempre positivo a gota se deforma em um formato de esferóide prolato com o aumento de Ca_E como mostrado na **Figura 5.17**.



Figura 5.17: Deformação da gota variando o número capilar elétrico Ca_E.

Um aumento no número capilar elétrico implica em um aumento das tensões elétricas aplicadas em relação à tensão superficial. Dessa forma quanto mais alto o valor de Ca_E maior será a deformação da gota, até que um balanceamento entre tensão superficial e tensão elétrica seja alcançado.

A variação da permissividade de um fluido também tem um efeito sobre a deformação do mesmo. Para que se possa verificar este efeito, foram fixados os valores de condutividade elétrica e do número capilar elétrico, isto é, $R \in Ca_E$ foram mantidos constantes.

O formato oblato pode ser observado quando variamos os valores de Q. Isso acontece devido ao aumento do gradiente de permissividade na equação da força elétrica (**Equação**

(3.17)). Com o aumento do mesmo, a força elétrica altera seu sinal, o que faz com que mude de direção, contraindo a gota ao invés de estirá-la. O gráfico da Figura 5.18 mostra a comparação entre os resultados da simulação em relação aos da teoria para os valores fixos de $Ca_E = 0,1$, R = 2,5 e $\beta = 1,0$.



Figura 5.18: Gráfico da deformação da gota variando a razão entre as permissividades Q.

Inicialmente, para valores de Q menores do que 3, tanto a teoria como a simulação prevêem um valor de D > 0, ou seja, um formato prolato. Isso se dá devido ao valor fixo de R = 2,5 que ainda gera uma magnitude de força maior do que o gerado por Q. Com o aumento da razão entre as permissividades, a deformação se reduz até um ponto onde a gota permanece sem ser alterada até que seu formato passa a ser oblato e sua deformação aumenta. Assim como no gráfico da variação de Ca_E , a simulação não fornece valores muito próximos aos da teoria para altas deformações, pelos mesmos fatores já explicados anteriormente. A **Figura 5.19** mostra a deformação da gota em um esferóide oblato quando variado o parâmetro Q.



Figura 5.19: Deformação da gota variando a razão entre as permissividades Q.

Com o aumento da permissividade do fluido interno à gota, haverá um aumento na intensidade da polarização das moléculas desse fluido. Conseqüentemente a força devido a estas moléculas polarizadas irá se intensificar também. Isso explica o fato de haver uma alta deformação da gota com um aumento da permissividade do fluido.

A condutividade elétrica também tem uma influência na deformação da gota. Aumentando o valor da condutividade elétrica, aumenta-se a capacidade do fluido de se ionizar, assim como o número de cargas livres internas ao fluido. Dessa forma, o valor da densidade de carga na superfície do fluido irá aumentar também, o que implica em um aumento da força elétrica exercida na interface entre os dois fluidos.

Para que se possa avaliar esta influência, foi variado o parâmetro R e comparado com a deformação máxima da gota. A deformação D para o parâmetro R (razão entre as condutividades) pode ser visualizada na **Figura 5.20**. Nesta comparação, foram utilizados os valores fixos de $Ca_E = 0.1, Q = 3 \text{ e } \beta = 1$.



Figura 5.20: Gráfico da deformação da gota variando a razão entre as condutividades *R*.

É possível observar que a deformação da gota é muito mais intensa quando se varia o potencial elétrico e que, para altos valores de R, ela tende a firmar uma deformação praticamente constante. A **Figura 5.21** mostra um esboço da deformação da gota para três valores diferentes de R. Mesmo aumentando significativamente o valor da razão entre as condutividades, a gota permanece praticamente sem deformação.



Figura 5.21: Deformação da gota variando a razão entre as condutividades elétricas *R*.

A alteração de parâmetros, como Ca_E , $R \in Q$, fazem com que os gráficos anteriores mudem suas posições, porém não suas formas, de modo que não necessariamente para baixos valores de R tenhamos sempre um formato prolato (D > 0), ou que a gota praticamente não deforme para altos valores de R. A questão é que os gráficos definidos acima são obtidos para os valores definidos no presente trabalho. É importante ressaltar que poucos trabalhos mostram resultados para R < 1 ou Q < 1, ou seja, para casos em que as propriedades do fluido externo à gota sejam maiores que as do fluido interno. Hua, Lim e Wang (2008) fizeram simulações para esses casos e obtiveram bons resultados, no entanto, o estudo em questão trata do efeito do campo sobre a esfera condutora e não sobre o fluido externo, portanto a teoria não se aplica, a priori, às deformações na gota a partir do mesmo.

Como mostrado em alguns resultados anteriores, existem valores de R, Q e Ca_E em que a esfera permaneça sem deformação alguma, ou seja, D = 0. Segundo Taylor (1966), não é possível que uma gota esférica permaneça em equilíbrio quando sujeita ao efeito de um campo elétrico, pois nem a tensão superficial, nem as pressões internas e externas seriam capazes de balancear as tensões exercidas pelo campo elétrico na superfície do fluido. No entanto, uma gota pode permanecer estável e em equilíbrio quando houver um balanceamento entre as tensões elétricas, superficiais e a diferença entre as pressões internas e externas à gota. Essa diferença de pressões só poderá existir se ambos os fluidos (interno e externo) estiverem em movimento.

Taylor (1966) discutiu as recirculações de fluido que ocorrem dentro e fora da esfera, derivou equações que descrevem o movimento do fluido e também obteve visualizações experimentais do escoamento. As **Equações (5.13)** a (**5.16**) mostram, em coordenadas polares, os resultados (considerando após atingir o regime permanente) encontrados por Taylor (1966) para o fluido interno,

$$v_{1r} = Ar(1 - r^2)(3\cos^2\theta - 1)$$
(5.13)

$$v_{1\theta} = \frac{3A}{2}r\left(1 - \frac{5}{3}r^2\right)sen2\theta \tag{5.14}$$
e para o fluido externo,

$$v_{2r} = A(r^{-4} - r^{-2})(3\cos^2\theta - 1)$$
(5.15)

$$v_{2\theta} = -Ar^{-4}sen2\theta \tag{5.16}$$

onde r foi feito adimensional por R_d e A é dado por:

$$A = -\frac{9}{10} \frac{R_d \epsilon_2 E_{\infty}^2}{\mu_2} \frac{1}{(1+\beta)} \frac{R-Q}{(R+2)^2}$$
(5.17)

Os vórtices formados pela circulação dos fluidos podem ser observados na **Figura 5.22**. São formados quatro quadrantes de vórtices dentro e fora da gota. Para as imagens foram utilizados óleo de silicone para a gota e uma distância de 4,62 cm entre os eletrodos.



Figura 5.22: Circulação do fluido interno e externo a gota (Taylor, 1966).

A simulação, assim como os resultados experimentais, também prevê a formação de vórtices ao redor e dentro da esfera. A **Figura 5.23** mostra a visualização dos vórtices através de vetores unitários de velocidade do fluido e linhas de corrente.



Figura 5.23: Visualização dos vórtices formados dentro e ao redor da gota

O modelo implementado no código (*solver*) "*EHDInterFoam*" mostrou bons resultados, tanto quantitativos como qualitativos, para os dois problemas de validação citados anteriormente. Os desvios relativos à deformação da gota, além do fato da **Equação** (5.5) não descrever de forma acentuada altas deformações, podem ser justificados por causa da dificuldade em analisar valores próximos à interface. O método VOF, utilizado para tratamento de interface, acaba gerando uma camada espessa entre os dois fluidos mesmo com uma malha bem refinada. Isso dificulta a medição dos valores a e b (**Equação** (5.4)) referentes à deformação da gota, o que acaba gerando um erro relativamente maior para o valor de D. Talvez o uso de uma malha adaptativa seja aconselhável para a redução dos desvios obtidos entre a simulação e as soluções analíticas. Pode ser considerada a utilização deste tipo de malha em possíveis trabalhos futuros.

A simulação permitiu visualizações bem coerentes com a realidade, como a migração da densidade de carga para a interface, o salto do campo elétrico entre um fluido e outro e a geração de uma força elétrica na superfície. Além disso, o código nos permite tratar tanto de fluidos puramente dielétricos, que foi o caso utilizado no problema de interface horizontal, como nos permite tratar de fluidos condutores, que foi o caso do problema da gota.

5.2 GOTA VISCOELÁSTICA CONDUTORA EM UM CAMPO ELÉTRICO

Diversos trabalhos descrevem o comportamento de uma gota de um fluido newtoniano em um campo elétrico uniforme no intuito de observar o comportamento dos mesmos quando estão sob o efeito de uma tensão elétrica. Fluidos newtonianos possuem diversas aplicações práticas e o mesmo pode ser dito a respeito de fluidos viscoelásticos. Os últimos possuem um alto peso molecular e são caracterizados a partir de relações entre tensão-taxa de deformação, elasticidade e tempos de relaxação. Fluidos puramente elásticos (fluidos de *Boger* ou fluidos de segunda ordem) são fluidos em que a viscosidade não depende da taxa de deformação, ela tende a permanecer constante durante todo o escoamento. Por outro lado, fluidos viscoelásticos possuem uma viscosidade dependente da taxa de deformação que, para a maioria dos polímeros, diminui com o aumento da taxa de deformação (*shear-thinning*).

Diferentemente de fluidos newtonianos, há poucos trabalhos na literatura que investigam os efeitos elétricos na interface entre dois fluidos viscoelásticos ou até mesmo na interface entre um fluido viscoelástico e um newtoniano.

Ha e Yang (1999) avaliaram teoricamente os efeitos dos parâmetros não-newtonianos na deformação e na quebra de uma gota de um fluido de segunda ordem. Foi observado que o principal fator que influencia a deformação da gota ainda é o número capilar elétrico, ou seja, a variação do campo elétrico externo. Porém, uma gota de um fluido viscoelástico tende a se deformar menos que uma gota newtoniana justamente devido às suas propriedades elásticas. A mesma observação foi feita em um segundo trabalho experimental, em que o estudo da deformação e da quebra de uma gota não-newtoniana foi feito por meio de comparações com resultados obtidos pela deformação de uma gota newtoniana (Ha, Yang, 2000).

Nesta sessão, serão avaliados os efeitos dos parâmetros elétricos e elásticos com relação à deformação de uma gota não-newtoniana imersa em fluido newtoniano. Serão feitas comparações qualitativas com relação aos resultados observados por Ha e Yang (1999; 2000), pois, devido à falta de parâmetros, não será possível fazer uma comparação com os resultados experimentais.

Parâmetros, como o tempo de relaxação e a distância entre as placas que cercam a gota, são fundamentais para a obtenção de resultados, de modo que a alteração em algum deles poderá influenciar o resultado obtido. Ha e Yang (2000) não determinaram tais parâmetros, mas fizeram observações importantes a respeito da influência da viscoelasticidade na deformação da gota.

Para a avaliação da influência dos efeitos viscoelásticos em uma gota condutora, foram feitas duas comparações. Inicialmente, o interesse foi comparar a deformação de uma gota viscoelástica com uma gota newtoniana. Assim, foi mantido fixo o tempo de relaxação e variado o número capilar elétrico para quatro diferentes tempos de relaxação, $10^0 \le \lambda \le 10^{-3}$, para comparar os resultados com os do gráfico da **Figura 5.16**. Depois, foi mantido o número capilar elétrico a tempo de relaxação, no intuito de avaliar a influência da elasticidade na deformação da gota.

Outros parâmetros também foram mantidos constantes, entre eles o valor da razão entre as permissividades Q, sendo Q = 2, e a razão entre as condutividades, sendo R = 2.5. A geometria utilizada foi a mesma da seção anterior, ou seja, a malha B como malha computacional. O número capilar elétrico foi variado de $0.1 \le Ca_E \le 2.5$ para quatro diferentes valores de tempo de relaxação λ . O gráfico da **Figura 5.24** mostra os resultados comparados com a simulação do fluido newtoniano e com a teoria de fluidos newtonianos (Taylor, 1966).

Os resultados do gráfico mostram que uma gota viscoelástica se deforma menos do que uma gota newtoniana quando está sob o efeito de um campo elétrico. Assim como apontado por Ha e Yang (2000), as propriedades elásticas do fluido tendem a comprimi-lo aumentando a estabilidade com relação a sua deformação. Os dados experimentais obtidos por eles mostram as mesmas características para a deformação de uma gota viscoelástica imersa em um fluido newtoniano.



Figura 5.24: Comparação dos resultados da deformação de uma gota viscoelástica variando o valor de Ca_E , para diferentes valores de λ , com os resultados obtidos para uma gota newtoniana (**Figura 5.16**).

Outra observação que pode ser feita a partir do gráfico acima é que um aumento no tempo de relaxação implica em uma diminuição na deformação da gota. De fato, um aumento de λ , implica em um aumento no número de *Deborah De* (dado pela **Equação (5.18)**). Esse está diretamente associado à propriedade elástica do fluido, uma vez que, quanto maior o número de *Deborah*, maior é a elasticidade do fluido e, quanto menor o valor de *De*, mais o fluido tende a um fluido puramente viscoso.

$$De = \frac{\lambda}{t_c} \tag{5.18}$$

onde λ é o tempo de relaxação e t_c é o tempo característico do experimento.

Pelo gráfico apresentado na **Figura 5.24**, podemos observar que essa influência do tempo de relaxação na deformação da gota é mais acentuada para altas deformações. Essa observação pode ser explicada pelo fato de que para baixos valores do tempo de relaxação, ou seja, $\lambda_1 e \lambda_2$, a

gota se comporta mais como um fluido newtoniano (fluido viscoso), tendendo a se aproximar mais dos valores de deformação dos mesmos.

Outro fato é que, assim como apontado por Ha e Yang (2000), até mesmo gotas viscoelásticas (ou puramente elásticas) coincidem com a teoria de deformação de gotas newtonianas para pequenas deformações. Ou seja, independentemente de o fluido ser viscoelástico ou não, quando consideradas pequenas deformações, ele tenderá aos mesmos valores de *D*. A visualização desta afirmação está mais clara no gráfico da **Figura 5.25**:



Figura 5.25: Comparação da deformação da gota viscoelástica variando λ , para diferentes valores de Ca_E .

Uma comparação entre a **Figura 5.24** e a **Figura 5.25** nos mostra que o fluido viscoelástico possui, de fato, uma deformação menor que o fluido newtoniano. Porém, quando considerado apenas o fluido viscoelástico, o parâmetro λ não tem tanta influência na deformação do mesmo, a não ser quando são considerados altos valores de Ca_E . Portanto, é possível afirmar que o campo elétrico ainda é o parâmetro que mais influencia a deformação da gota.



Figura 5.26: Variação do campo elétrico para o fluido newtoniano e os fluidos viscoelásticos.

A **Figura 5.26** mostra que a variação do campo elétrico é a mesma para todos os fluidos e que essa independe do tipo de fluido que está sendo utilizado. Esse era um resultado esperado, uma vez que apenas os parâmetros elétricos do problema influenciam o valor do campo elétrico. A partir desse gráfico, é possível afirmar, com certeza, que a propriedade elástica do fluido é a responsável pela pequena deformação do mesmo.

Foi possível observar na gota viscoelástica, assim como na newtoniana, a formação de vórtices no interior mesma. Essa formação está diretamente ligada à estabilidade da gota (Taylor, 1966; Ha, Yang, 2000). Inicialmente, o fluido interno "empurra" a gota, em um formato prolato ou em um formato oblato. Eventualmente, a tensão superficial e a elasticidade (no caso de fluidos viscoelásticos), tendem a estabilizar a deformação. Uma vez estabilizada, segundo Taylor (1966), vórtices se formarão no interior da gota, mantendo-a fixa naquele formato. A formação dos vórtices até o momento em que a gota permanece estável pode ser vista na **Figura 5.27.** Nessa simulação foi utilizada uma diferença de potencial de 20 kV. Os outros parâmetros foram os mesmo considerados anteriormente.



Figura 5.27: Formação do vórtice no interior de uma gota viscoelástica

A partir da figura acima vemos que a recirculação de fluido ainda não se iniciou, mesmo depois de 1s em que a gota permaneceu sob o efeito do campo elétrico. A gota vai se estabilizando, e reduzindo sua taxa de deformação ao mesmo tempo em que os vórtices começam a aparecer. Após 4s, a gota permanece praticamente estável.

Os resultados apresentados para a deformação de uma gota viscoelástica foram satisfatórios. O fato de não haverem muitos trabalhos a respeito do efeito de um campo elétrico sobre uma gota viscoelástica, fez com que, no presente trabalho, poucos resultados fossem analisados. Porém, seria interessante, em um trabalho futuro, fazer uma análise mais aprofundada sobre os efeitos viscoelásticos na deformação da gota, podendo-se até realizar experimentos comparativos.

5.3 JATO NEWTONIANO CONDUTOR EM UM CAMPO ELÉTRICO

Nesta seção, serão discutidos resultados obtidos para a simulação de um jato de fluido newtoniano na saída de um tubo capilar sob o efeito de um campo elétrico. Processo esse, também conhecido como processo de atomização eletrostática, onde um jato é afinado na saída de um tubo capilar e eventualmente é quebrado em pequenas gotículas. O intuito do presente trabalho é avaliar o jato apenas na saída do tubo e não a formação das gotas.

Esse é um processo muito próximo ao processo de eletrofiação, que, ao invés de fluidos newtonianos, utiliza fluidos viscoelásticos. A **Figura 5.28** mostra um esquema do aparelho utilizado tanto para atomização como para o processo de eletrofiação.



Figura 5.28: Esquema ilustrativo do processo de atomização/eletrofiação.

O escoamento consiste basicamente em duas regiões (regiões 1 e 2) após a saída do fluido do tubo capilar. A primeira representa a região de jato estável, região que também pode ser observada no processo de eletrofiação, onde o jato é afinado em um formato cônico, conhecido como Cone de Taylor. Posteriormente, no processo de atomização, o jato se quebra devido às altas tensões elétricas e a uma baixa viscosidade formando pequenas gotas carregadas que são captadas por uma placa coletora. (Hartman *et al.*, 1999). O mesmo esquema pode ser utilizado

para o processo de eletrofiação, porém a diferença ocorre na região 2, onde, devido aos efeitos viscoelásticos, o jato não é quebrado em pequenas gotas e sim estirado por um movimento de chicoteamento (*whipping*). A **Figura 5.29** mostra as duas regiões do processo: a região de gotejamento e a região de chicoteamento.



Figura 5.29: (A) Cone de Taylor (Hartman *et al.*, 1999); (B) Região de Gotejamento; (C) Região de Chicoteamento (Lim, Hua, Wang e Smith, 2010).

Para os dois casos o intuito foi avaliar a região de saída do jato e a formação do Cone de Taylor. Assim, ao invés de ser colocada uma placa coletora na parte inferior da geometria, foi apenas deixada uma abertura.

O esquema bidimensional utilizado para as simulações pode ser observado na **Figura 5.30**. As dimensões utilizadas foram as mesmas do artigo do Lastow e Balachandran (2006), que desconsideraram a espessura do capilar. Porém, no presente trabalho foi escolhido um valor praticamente irrelevante para a mesma (quando comparado com o domínio todo).



Figura 5.30: Esquema bidimensional do processo de atomização/eletrofiação utilizado nas simulações

Por se tratar de um problema simétrico, foi feito um eixo de simetria no centro do capilar, a abertura foi colocada no lugar da placa coletora e a entrada de fluido ocorre na parte superior, ao lado das paredes.

No processo experimental de eletrofiação, a fonte de alta voltagem é ligada apenas no tubo capilar e na placa coletora. Porém, para simular o processo de atomização alguns autores também incluíram a voltagem nas paredes superiores (Yan, Farouk, Ko, 2003; Lastow, Balachandran, 2006). Neste trabalho, a voltagem foi incluída nas paredes superiores e no tubo capilar, gerando um campo elétrico externo uniforme que vai do topo ao chão ao longo da direção do jato.

Da mesma forma que os casos anteriores, a malha computacional é bidimensional e possui volumes de controle hexaédricos. O refinamento feito na malha B pode ser observado na **Figura 5.31**.



Figura 5.31: Malha computacional simétrica B utilizada para o caso do jato condutor.

Foi feito um refinamento maior próximo ao tubo capilar devido aos altos gradientes dos parâmetros nessa região. Foram feitas três malhas e, assim como nos outros casos, as duas malhas menos refinadas (malhas A e B) foram comparadas com a malha mais refinada (malha C). As características das malhas podem ser vistas na **Tabela 5.6**.

Malha	Número de células (VC)	$\Delta x_{min}/L^*$	$\Delta y_{min}/H^*$
Α	9900	0,0016	0,00050
В	24200	0,0014	0,00010
С	34800	0,0010	0,00001

 Tabela 5.6: Características das malhas para o caso do jato condutor.

* Os valores de $\Delta x_{min}/L \in \Delta y_{min}/H$ correspondem aos menores volumes de controle (VC) divididos pela distância entre a atmosfera e a simetria *L*, a parede superior e a abertura *H*, respectivamente.

O teste de convergência de malha foi feito analisando o afinamento e o campo elétrico no centro do jato para uma diferença de potencial de 20kV para as três malhas. Para as propriedades

do fluido externo - sendo elas: condutividade elétrica, permissividade, densidade e viscosidade. foram utilizadas as propriedades do ar. O tubo capilar possui um raio *R* e a distância do tubo até a abertura inferior do domínio varia com *z*. Para o jato newtoniano, foram utilizadas as propriedades do heptano, sendo $\epsilon = 1.6815 \times 10^{-11}$ F/m, $\sigma = 7.7 \times 10^{-7}$ S/m, $\nu = 5.858 \times 10^{-7}$ m²/s, $\gamma = 0.021$ N/m e $\rho = 684$ kg/m³ (Lastow e Balachandran, 2006). A **Figura 5.32** e a **Figura 5.33** mostram os resultados das três malhas.



Figura 5.32: Afinamento do jato utilizando uma diferença de potencial de 20kV para as malhas A, B e C.

Percebe-se, como esperado, que há uma diferença razoável entre o afinamento do jato para as diferentes malhas. No entanto, quando comparamos a malha B com a malha C, podemos observar que a primeira possui uma curvatura ainda mais intensa do que a segunda, mas com um raio final do jato praticamente de mesma ordem. A malha A possui um erro relativamente alto e não chega a ter um afinamento final tão próximo ao das outras duas. De fato, esses resultados já eram esperados, uma vez que com um maior refinamento próximo ao tubo capilar obtém-se uma melhor análise da interface entre os dois fluidos, da mesma forma que um maior refinamento próximo ao eixo de simetria propicia uma melhor visualização do raio final do jato.



Figura 5.33: Campo elétrico no centro do jato utilizando uma diferença de potencial 20kV para as malhas A, B e C.

A análise da variação do campo elétrico no centro do jato para as três malhas também mostrou certa discrepância de resultados. Nesse caso, podemos observar que a malha B possui um erro relativamente maior que a malha A. No entanto, a primeira possui valores iniciais e finais do campo mais próximos aos da malha C. A **Tabela 5.7** mostra o erro relativo máximo em porcentagem da comparação entre as malhas A e B com a malha C.

Tabela 5.7: Erro relativo máximo, em percentual, das malhas A e B com relação a malha C,para as curvas representadas na Figura 5.32 e na Figura 5.33.

Malha	Erro relativo máximo (%)		
	R	Ε	
Α	9,43	3,32	
В	4,44	4,11	

Ao analisar o erro em relação ao afinamento do jato, vemos que a malha A possui um erro de aproximadamente 10%, enquanto que o da malha B chega apenas a 5%. Mesmo que a malha B possua um erro maior em relação ao campo elétrico, ele chega apenas a uma diferença de praticamente 1% com relação à malha A, e 4% em relação à malha C, o que são erros relativamente baixos. Como o intuito do presente trabalho é analisar principalmente o afinamento

do jato, podemos utilizar a malha B para fazê-lo, considerando que ela possui um número de volumes de controle bem abaixo do que a malha C. Desse modo, podemos reduzir consideravelmente o custo computacional e obter resultados ainda satisfatórios.

Para as simulações, foram analisados alguns parâmetros: o afinamento do jato devido à variação do potencial elétrico e ao tempo de simulação; a geração de densidade de carga na superfície do jato; a força elétrica; e o campo de escoamento. Serão feitas também comparações com resultados teóricos e experimentais obtidos por Hohman *et al.* (2001). Porém, diferentemente dos resultados citados anteriormente, nesse caso, serão apresentados resultados utilizando o glicerol como fluido.

Como condição para as simulações, o fluido foi colocado inicialmente desde a entrada até a abertura inferior do domínio. Essa condição foi necessária devido a uma instabilidade ocorrida no jato na saída do tubo capilar. Instabilidade essa, que ocorre em alguns casos experimentais e que foi relatada por Hohman *et al.* (2001) na análise de estabilidade do modelo unidimensional do jato na saída de um tubo. Essa instabilidade, no entanto, não foi observada quando foi utilizada uma baixa tensão superficial. Porém, no intuito de manter os parâmetros reais do fluido, esses resultados para baixas tensões superficiais não foram apresentados nesse trabalho. Portanto, não é possível observar a formação do cone, mas sim apenas o afinamento do jato. De fato, a gravidade passa a ter um papel importante nesse afinamento, uma vez que influencia o estiramento do fluido. Mas os resultados mostram que a variação da voltagem influencia não só no formato do cone, como também na formação antecipada do mesmo.

Com o aumento da voltagem, temos um aumento da magnitude do campo elétrico, que, por sua vez, gera um aumento na tensão elétrica exercida na superfície do fluido, de modo que essa influencia no tempo de formação do cone e na curvatura do mesmo. A **Figura 5.34** mostra o gráfico do afinamento do jato para cinco voltagens diferentes. Foram testadas voltagens próximas às utilizadas experimentalmente, no intuito de que os resultados expressem condições experimentais reais.



Figura 5.34: Gráfico do afinamento do jato newtoniano com a variação da voltagem

Observa-se que, com o aumento da voltagem, a curvatura do cone se intensifica. Assim, o afinamento do jato ocorre de forma antecipada. Observações como essa também podem ser vistas na literatura (Feng, 2002; Yan, Farouk, Ko, 2003). Um aumento na voltagem implica em um aumento no campo elétrico. Esse aumento no campo elétrico induz uma maior concentração de cargas na interface do fluido, que, consequentemente, gerará uma força elétrica maior (Feng, 2002).

O diâmetro final do jato também é influenciado pela voltagem aplicada, de modo que o jato produzido pela voltagem de 10kV possui um diâmetro final maior do que o produzido por uma voltagem de 50kV. Imagens da simulação para as cinco diferentes voltagens podem ser vistas na **Figura 5.35**.



Figura 5.35: Imagens da simulação do afinamento do jato newtoniano com a variação da voltagem (vermelho – fluido; azul - ar).

Os dados mostram que o raio do jato chega a ter uma redução de até 96.5% do tamanho inicial para uma voltagem de 50kV (indo de um valor inicial de 0.35 mm até um valor final mínimo de 0.012 mm), enquanto que o raio para uma voltagem de 10kV chega a reduzir 94% do seu valor inicial (variando de 0.35 mm até 0.021 mm).

A voltagem não altera apenas a curvatura e o diâmetro final do jato, mas também o tempo de formação do cone. As imagens da **Figura 5.35** foram extraídas em diferentes tempos de simulação, e mostram que o afinamento do jato a uma voltagem de 50kV ocorre com muito mais antecedência do que a uma voltagem de 10kV. Esse afinamento antecipado pode ser visto na **Figura 5.36**, onde todos os dados foram extraídos após 0.021s com o jato sob o efeito do campo elétrico.



Figura 5.36: Gráfico do afinamento do jato para diferentes voltagens em um tempo de simulação de 0,021s.

O tempo de 0.021s foi escolhido, pois é nesse momento em que o jato alcança o seu maior afinamento a uma voltagem de 50kV. É possível observar que, enquanto o perfil do jato já está completamente desenvolvido a uma voltagem de 50kV, o jato a 10kV mal começou a ser afinado, de forma que, quanto maior o potencial elétrico mais rápida é a formação do cone. Portanto, com o aumento da voltagem, além da curvatura do cone ser maior, o próprio cone é formado mais rapidamente. Imagens da simulação podem ser vistas na **Figura 5.37**.



Figura 5.37: Imagens da simulação do afinamento do jato newtoniano com a variação da voltagem em 0.021s (vermelho – fluido; azul - ar).

O campo elétrico (como observado por Feng (2002)) aumenta rapidamente até um pico ao longo do centro do jato e, posteriormente, se reduz de forma gradual e assintótica até um valor fixo de *E*. Esse aumento ocorre próximo à curvatura do cone devido à alta concentração de densidade de carga no local gerando um alto estiramento (Feng, 2002). Uma alta condutividade leva a altos valores de densidade de carga próximos ao tubo capilar e a um valor muito alto do campo elétrico nesse ponto (comparado ao campo elétrico externo). O resultado é um severo afinamento do jato no local. As simulações feitas no presente trabalho também prevêem esse aumento, como mostrado na **Figura 5.38**.



Figura 5.38: Gráfico do afinamento do jato e do campo elétrico no centro do mesmo.

A partir do gráfico, é possível observar o aumento do campo elétrico na saída do tubo juntamente com o afinamento do jato. O campo elétrico observado por Feng (2002) possui um decaimento mais acentuado e passa a tender ao campo elétrico externo após o afinamento. Os resultados da **Figura 5.38** não mostram esse decaimento devido à condição inicial do jato, em que ele foi colocado até a abertura inferior do domínio. Assim, mesmo após a formação do cone, ainda há a presença de fluido além da parte fina do jato e essa influencia os valores do campo elétrico. Devido ao excesso de fluido além do cone, os dados analisados no trabalho são apenas até a parte mais fina do jato, assim como as figuras extraídas da simulação. A **Figura 5.39** mostra

o campo elétrico no domínio próximo ao cone. Os vetores unitários de direção do campo também são apresentados.



Figura 5.39: Imagens do campo elétrico E próximo ao cone para uma voltagem de 20kV..

O valor máximo do campo elétrico está localizado na ponta do tubo capilar, pois é o local que possui o maior gradiente do potencial elétrico, uma vez que o máximo potencial está inserido na parede superior e no tubo, e o mínimo está situado na abertura inferior. Pelos vetores, percebese que o campo elétrico é uniforme apenas em pontos distantes do tubo capilar, isto é, apenas distante do tubo, os vetores de campo possuem a mesma intensidade, direção e sentido. O próprio formato e intensidade do campo (como se pode observar na figura acima) são influenciados pela densidade de carga na superfície do cone, uma vez que a intensidade do campo aumenta juntamente com a curvatura e afinamento do jato.

O máximo valor do campo elétrico gera também uma força elétrica máxima na ponta do tubo, e, devido à presença de densidade de carga na interface entre os dois fluidos, irá existir uma força elétrica ao longo de toda a superfície do cone. A densidade de carga e a força elétrica podem ser observadas na **Figura 5.40**.



Figura 5.40: Imagens da força elétrica (esquerda) e densidade de carga (direita) utilizando uma voltagem de 20kV.

Os resultados do código numérico para a força elétrica e para a densidade de carga são bem coerentes, uma vez que ambos se localizam na interface entre os dois fluidos. Os valores de densidade de carga não são tão bem distribuídos como os da esfera condutora, pois o jato não está inserido em um campo elétrico uniforme. No entanto, há um aumento no valor da densidade de carga ao longo do cone partindo da ponta do tubo capilar, como previsto nos resultados obtidos por Feng (2002).

A força elétrica está localizada na interface, sendo seu maior valor na ponta do tubo capilar. Lastow e Balachandran (2006) também obtiveram resultados para a força elétrica na interface, porém, os maiores valores estavam localizados ao longo do cone. Entretanto, no modelo proposto por eles, mesmo ignorando a condutividade de ambos os fluidos, foi possível observar um acúmulo de densidade de carga na interface, que, para fluidos puramente dielétricos, não ocorre na realidade. Eles também ignoraram o termo relativo ao gradiente de permissividade na **Equação (3.17)** da força elétrica, pois assumiram a permissividade como sendo isotrópica. Assim, a força calculada no presente modelo terá valores diferentes dos calculados pelo modelo deles. Lastow e Balachandran (2006) também obtiveram resultados para o campo de escoamento. Foi observada a formação de um vórtice no interior do cone. Outros autores também discutiram e obtiveram resultados a respeito da formação desses vórtices em jatos de fluidos newtonianos (Hayati *et al.*, 1987; Shtern *et al.*, 1994). Resultados semelhantes foram observados no presente trabalho e podem ser visualizados na **Figura 5.41** e na **Figura 5.42**.



Figura 5.41: Campo de escoamento no interior do cone para um fluido newtoniano (formação do vórtice).

A formação do vórtice no interior do cone ocorre por estarmos tratando de um fluido pouco viscoso como o heptano. Durante o afinamento do jato, a maior parte do líquido é forçada a voltar ao escoamento principal gerando a recirculação do fluido. O líquido restante continua o escoamento, formando o jato.



Figura 5.42: Linhas de corrente; Visualização do vórtice formado no interior do cone.

Foram feitas também comparações do afinamento do jato com resultados experimentais obtidos por Hohman *et al.* (2001). O fluido utilizado por eles foi o glicerol, que também foi utilizado por Feng (2002). As propriedades do glicerol são: $\epsilon = 4.12 \times 10^{-10}$ F/m, $\sigma = 4.8 \times 10^{-6}$ S/m, $\nu = 1.49 \times 10^{-3}$ m²/s, $\gamma = 0.0634$ N/m e $\rho = 1260$ kg/m³. Para o problema foi utilizada uma vazão de 1 mL/min para um tubo capilar de raio $R_0 = 0.08$ cm e uma distância entre as placas de 6 cm.

O trabalho desenvolvido por Hohman *et al.* (2001) consiste em um modelo unidimensional baseado no modelo para fluidos pouco condutores. Porém, ele considera também a existência de corrente elétrica no jato. Feng (2002) simplificou o modelo no intuito de melhorar alguns problemas de instabilidade observados por Hohman *et al.* (2001). Problemas esses, que foram gerados devido a uma condição inicial de densidade de carga no fluido. Os resultados teóricos e experimentais obtidos por Hohman *et al.* (2001), assim como os resultados obtidos na simulação do presente trabalho, podem ser observados na **Figura 5.43**.



Figura 5.43: (A) Resultado experimental do afinamento de um jato de glicerol na saída de um tubo capilar com um potencial elétrico de 30kV e uma vazão de 1.0 mL/min (Hohman *et al.*, 2001). (B) Resultado teórico obtido pelo modelo unidimensional desenvolvido por Hohman *et al.* (2001).(C) Resultado da simulação utilizando o modelo para fluidos pouco condutores.

O gráfico referente à curvatura dos jatos pode ser observado na Figura 5.44.



Figura 5.44: Gráfico do afinamento do jato de glicerol; comparação da simulação com resultados teóricos e experimentais obtidos por Hohman *et al.* (2001).

O gráfico acima mostra que a simulação foi coerente com os resultados experimentais e teóricos obtidos por Hohman *et al.* (2001). A simulação obteve resultados muito próximos aos esperados. O fato de haver uma diferença para o afinamento máximo do jato pode ser explicado devido à dificuldade em se extrair os dados das imagens. Porém, próximo à saída do tubo capilar, o afinamento do jato obteve uma curvatura fiel à curvatura obtida experimentalmente.

Os resultados obtidos para o jato de um fluido newtoniano condutor foram condizentes com os obtidos por outros autores. Apesar de não ter sido desenvolvida até então uma teoria concreta sobre o afinamento do jato, os resultados quantitativos e qualitativos obtidos são próximos aos esperados. A formação do vórtice, como apontado por Lastow e Balachandran (2006), pôde ser visualizada, o afinamento do jato com relação à variação da voltagem ocorreu como previsto pela teoria, a densidade de carga, assim como a força elétrica, permaneceu na interface e houve um aumento no campo elétrico como previsto por Feng (2002). Os resultados obtidos por Hohman *et al.* (2001) puderam ser visualizados pela simulação. A instabilidade do jato na saída do tubo ainda é um problema a ser corrigido, mas mesmo não podendo visualizar a formação do mesmo, os resultados mostraram-se bem próximos aos esperados, de maneira que é possível avaliar o afinamento do jato próximo ao tubo capilar.

5.4 JATO VISCOELÁSTICO CONDUTOR EM UM CAMPO ELÉTRICO

O afinamento de um jato newtoniano na saída de um tubo capilar é um fenômeno estudado há décadas. O mesmo pode-se dizer do afinamento de um jato viscoelástico. O processo de eletrofiação consiste na produção de fibras poliméricas de diâmetro nanométrico por meio do afinamento de um jato viscoelástico na saída de um tubo capilar. Mesmo sendo um processo de fácil realização experimental, ainda é um fenômeno complexo de ser analisado. Esta complexidade está associada ao efeito do campo elétrico na deformação do fluido, que é influenciada pelas propriedades reológicas do material.

O processo consiste em duas etapas. Entre elas, está o afinamento inicial do jato na saída do tubo capilar formando um cone estável, e a segunda consiste em uma região de instabilidade onde ocorre o chamado chicoteamento (*whipping*) do jato. Neste trabalho, apenas a primeira etapa será avaliada. Porém, em um experimento, a segunda etapa é, sem dúvida, a etapa mais importante para a redução do diâmetro da fibra (Feng, 2002). Mesmo assim, o primeiro estágio de afinamento do jato ainda é importante, pois, não só contribui diretamente com o afinamento do jato, como também estabelece a condição para o início da região de instabilidade.

Neste trabalho, será feita a comparação do afinamento do jato viscoelástico com os resultados obtidos por Feng (2003), e com os resultados experimentais descritos em seu trabalho (retirados do trabalho de Doshi e Reneker (1995)). Feng (2003) utilizou o modelo constitutivo de Giesekus para simular o afinamento de uma solução de 4% de PEO (poli(oxido de etileno)). Para a simulação, foi utilizado um modelo unidimensional também baseado no modelo para fluidos pouco condutores.

Os dados experimentais, assim como os parâmetros do problema, foram extraídos dos artigos de Doshi e Reneker (1995) e Hohman *et al.* (2001). Os resultados experimentais foram feitos utilizando a mesma solução polimérica citada acima. Os parâmetros utilizados foram: $\rho = 1200 \text{ kg/m}^3$, uma vazão de $Q = 20 \mu$ l/min, uma permissividade de $\epsilon = 4,12 \times 10^{-10}$, uma condutividade de $\sigma = 4.9 \times 10^{-3}$ S/m e $\gamma = 0.0766$ N/m para a tensão superficial. Como no problema foi considerada a existência de um solvente, foi utilizado um valor de $\eta_s = 0.001$ Pa · s para a viscosidade do mesmo. A viscosidade do polímero à taxa de deformação nula é dada por $\eta_0 = 1.25 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ e um fator de mobilidade $\alpha = 0.01$ foi utilizado.

O parâmetro λ não foi dado em nenhum dos artigos citados anteriormente. Feng (2003) utilizou um valor de $\lambda = 10$ s, considerando que soluções concentradas de polímeros, geralmente, possuem valores de tempo de relaxação entre 1 s e 100 s (Bird, 1987). No presente trabalho, foi utilizado um valor de $\lambda = 1$ s no intuito de reduzir o custo computacional da simulação. Porém, o valor continua dentro do intervalo utilizado por Feng (2003).

O valor do campo elétrico externo considerado no problema foi de $E_{\infty} = 40$ kV/m. Uma vez que a distância entre as placas que geram a diferença de potencial não foi dada, foi considerada, no presente trabalho, a mesma distância utilizada na seção anterior, isto é, 60 cm, o que implica um valor de diferença de potencial elétrico igual a $\Delta \phi = 24$ kV.

A **Figura 5.45** mostra o resultado do afinamento do jato comparado com o resultado obtido por Feng (2003) e com o resultado experimental obtido por Doshi e Reneker (1995).



Figura 5.45: Afinamento do jato de uma solução de 4% de PEO; Comparação da simulação realizada no presente trabalho, com o resultado obtido pelo modelo do Feng (2003) e com os dados experimentais obtidos por Doshi e Reneker (1995).

Apesar do resultado da simulação estar um pouco discrepante com relação ao resultado obtido por Feng (2003), ele apresenta maior concordância com o experimental. Essa diferença pode estar associada ao valor de $\lambda = 1$ s utilizado na simulação. Provavelmente esse valor do tempo de relaxação é o que mais se aproxima do valor real da solução polimérica. A **Figura 5.46** mostra o resultado da simulação para o afinamento do jato.



Figura 5.46: Resultado da simulação para o afinamento de um jato viscoelástico utilizando uma solução de 4% de PEO.

Um fluido viscoelástico, geralmente, tende a "inchar" na saída de um tubo. Esse efeito, também conhecido como inchamento do extrudado (*die swell*), ocorre devido ao recuo das moléculas do fluido viscoelástico após sofrer uma constante tensão de cisalhamento, gerando uma recuperação elástica do fluido na saída do tubo. Porém, tal fenômeno não é observado durante experimentos de eletrofiação. As forças eletrostáticas, atuando na superfície do fluido, continuam tencionando-o e, dessa forma, inibem a recuperação elástica. Essa é a razão pela qual uma fibra tão fina é produzida durante o processo de eletrofiação.

Diferentemente de jatos newtonianos, não foi possível a observação da formação do vórtice no interior do cone. A **Figura 5.47** mostra as linhas de corrente para uma simulação em que

10 kV foram utilizados para afinar um jato viscoelástico com as seguintes propriedades: $\eta_0 =$ 1.2 Pa · s; $\eta_s = 0.002$ Pa · s; $\lambda = 0.03$ s e $\alpha = 0.05$.



Figura 5.47: Linhas de corrente para o afinamento de um jato viscoelástico utilizando uma voltagem de 10 kV.

Nesse caso, não há formação de vórtice no interior do cone devido à elasticidade do fluido, assim como devido à alta viscosidade. O mesmo efeito pôde ser observado na simulação do glicerol (seção anterior).

Durante o processo de eletrofiação, processo esse em que não há quebra do jato, o encolhimento da seção transversal reduz a quantidade de cargas que podem ser conduzidas. Consequentemente, as cargas deverão ser transportadas por convecção, mas considerando a baixa velocidade do fluido próximo ao tubo, é gerado um acúmulo de carga no cone (Feng, 2002). Esse acúmulo de carga aumenta o valor do campo elétrico e da força elétrica consideravelmente. A **Figura 5.48** mostra o campo elétrico, a força elétrica e a distribuição de densidade de carga na superfície do jato viscoelástico, respectivamente.



Figura 5.48: Campo elétrico (esquerda); Força elétrica (centro); Densidade de carga (direita).

Assim como apontado por Feng (2002), o acúmulo de densidade de carga na superfície do cone, gera um aumento no valor do campo elétrico. Como era de se esperar, os maiores valores da força elétrica estão localizados justamente nos locais onde o campo elétrico é mais intenso. A consequência é justamente um maior afinamento do jato no local.

A simulação do jato viscoelástico mostrou resultados bem coerentes com os observados na literatura, principalmente se tratando da comparação com os resultados do Feng (2003), e com o resultado experimental obtido por Doshi e Reneker (1995). Resultados qualitativos, porém de acordo com as observações feitas por Feng (2002), também foram apresentados e condizentes com o que era esperado. No entanto, só foi possível concluir duas simulações, em consequência da falta de recursos e tempo, uma vez que bons equipamentos são necessários para a conclusão das mesmas.

6. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

A proposta do presente trabalho foi o desenvolvimento de um código numérico (*solver*) capaz de simular escoamentos eletrohidrodinâmicos. Nesse contexto, foi feita a modelagem do problema baseada no modelo para fluidos pouco condutores (*leaky dieletric model*). Dois casos clássicos foram utilizados para a validação do modelo e do código implementado. O problema da interface horizontal foi construído e avaliado com relação aos resultados analíticos da literatura. Esses foram próximos aos resultados esperados, e mostraram que o código também é capaz de simular escoamentos eletrohidrodinâmicos de fluidos puramente dielétricos. Os resultados mostraram que, mesmo não havendo densidade de carga na interface entre os dois fluidos, uma força elétrica na superfície foi gerada, que é conseqüência da polarização das moléculas do fluido. Esse caso foi utilizado para a validação da equação de Laplace.

O segundo problema utilizado para a validação do código foi o caso da gota condutora. Esse, por ser um caso mais complexo e por envolver todas as equações referentes ao modelo, exigiu um custo computacional relativamente maior. Porém, os resultados, quando comparados com os resultados analíticos, mostraram-se satisfatórios. De fato, houve certas discrepâncias com relação ao campo elétrico e à deformação da gota. No entanto, essas foram justificadas utilizando observações feitas por outros autores. Mesmo assim, fica como um possível trabalho futuro, novas tentativas de aproximar os resultados dos analíticos variando os parâmetros do problema. Os resultados qualitativos, como a formação dos vórtices no interior da gota, por exemplo, também estavam de acordo com o esperado.

Posteriormente, foram feitos estudos de casos já existentes na literatura. Entre eles está o caso do jato newtoniano na saída de um tubo capilar. Problema esse, que já foi muito analisado experimentalmente e por meio de simulações numéricas. Assim, os resultados da simulação

puderam ser comparados com as diversas observações feitas por outros autores. Como, por exemplo, a existência de densidade de carga na superfície livre do jato, o aumento da curvatura do cone com o aumento do campo elétrico e a formação de vórtices no interior do cone. Por fim, foi feita a comparação quantitativa e qualitativa do afinamento do jato com resultados experimentais e teóricos obtidos por Hohman *et al.* (2001). O perfil final do cone coincidiu com ambos os resultados, e mostrou que, mesmo avaliando apenas o afinamento do jato e não a formação do mesmo, a simulação é capaz de predizer a curvatura do cone. O mesmo pode ser dito do jato viscoelástico, que também apresentou uma curvatura condizente com resultados experimentais.

Ainda é necessário avaliar a instabilidade que ocorre no jato na saída do tubo. Instabilidade essa, que não é vista quando é reduzida a tensão superficial. Porém, considerando o fato desse caso consumir muito tempo de simulação e envolver uma grande quantidade de parâmetros, é possível entender a dificuldade em se avaliar o problema. Então, seria relevante, em possíveis trabalhos futuros, uma análise mais aprofundada a respeito da influência de cada parâmetro no afinamento do jato, assim como seria interessante testar diferentes malhas e métodos para a solução do problema.

Devido à falta de tempo, assim como à falta de recursos próprios para a realização das simulações, tanto para o caso do jato, quanto para o caso da gota viscoelástica foram obtidos poucos resultados. Ainda há a necessidade de mais testes, por meio da variação de parâmetros, para que se possam realizar comparações mais conclusivas a respeito da influência dos parâmetros viscoelásticos em escoamentos eletrohidrodinâmicos. Os resultados preliminares foram coerentes com o que era esperado, principalmente se tratando do afinamento do jato viscoelástico. A gota viscoelástica também se comportou de acordo com observações feitas na literatura, ou seja, com o aumento da elasticidade, há uma redução na deformação. Em trabalhos futuros, poderão ser feitas novas simulações e estudos, com a variação de parâmetros e com a comparação com outros resultados experimentais.

Por fim, é importante ressaltar, que o código desenvolvido funcionou de acordo com as expectativas, mas que ainda pode ser melhorado. Pode-se considerar, por exemplo, a inclusão do

termo de eletrotrição, que aumentará ainda mais o número de casos que podem ser simulados, assim como a inclusão da condição entre o tempo característico elétrico e o hidrodinâmico, necessária para que as cargas permaneçam na interface dos fluidos. Ainda assim, o *solver* mostrou-se versátil e capaz de lidar com os problemas avaliados no presente trabalho.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BAYGENTS, J. C.; RIVETTE, N. J.; STONE, H. A. *Electrohydrodynamic deformation and interaction of drop pairs*, J. Fluid Mech., Vol. 368, p. 359-375, 1998.
- BIRD, R. B.; ARMSTRONG, R. C.; HASSAGER, O. Dynamics of Polymeric Liquids. 2nd. ed. New York, Jhon Wiley & Sons, Inc, 1987
- CARROLL, C. P.; JOO, Y. L. *Electrospinning of viscoelastic Boger fluids: Modeling and experiments*, Physics of Fluids, Vol. 18, 053102, 2006.
- CHEN, C.-H. *Electrohydrodynamic Stability*, Department of Mechanical Engineering and Materials Science, Duke University, Durham, NC, USA, 2011.
- DOSHI, J.; RENEKER, D. H. *Electrospinning and applications of electrospun fibers*, J. Electrostatics, Vol. 35, p. 151-160, 1995.
- FAVERO, J. L.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M.; JASAK, H. Viscoelastic fluid analysis in internal and in free surface flows using the software OpenFOAM, Computers and Chemical Engineering, Vol. 34, p. 1984-1993, 2010.
- FAVERO, J. L.; SECCHI, A. R.; CARDOZO, N. S. M.; JASAK, H. Viscoelastic flow analysis using the software OpenFOAM and differential constitutive equations, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Vol. 165, p. 1625-1636, 2010.

- FAVERO, J. L.; Simulação de escoamentos viscoelásticos: Desenvolvimento de uma Metodologia de Análise utilizando o Software OpenFOAM e Equações Constitutivas Diferenciais, UFRGS, Departamento de Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Dissertação de Mestrado, p. 162, Porto Alegre, RS 2009.
- FENG, J. J. Stretching of a straight electrically charged viscoelastic jet, J. Non-Newtonian Fluid Mech., Vol. 116, p. 55-70, 2003.
- FENG, J. J. *The stretching of an electrified non-Newtonian jet: A model for electrospinning,* Physics of Fluids, Vol. 14, No. 11, p. 3912-3926, 2002.
- FENG, J. Q.; SCOTT, T. C. A computational analysis of electrohydrodynamics of a leaky dielectric drop in an electric field, J. Fluid Mech., Vol. 311, p. 289-326, 1996.
- FOX, R. W.; McDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. *Introduction to Fluid Mechanics*, 6th ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2004.
- GAÑAN-CALVO, A. M. Cone-jet Analytical Extension of Taylor's Electrostatic Solution and the Asymptotic Universal Scaling Laws in Electrospraying, Physical Review Letters, Vol. 79, No. 2, p. 217-220, 1997.
- GIESEKUS, H. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Vol. 11, No. 1-2, p. 69-109, 1982.
- GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Electrohydrodynamics*, 3rd ed. Upper Saddle River, New Jersey, Prentice-Hall, Inc., 1999.
- HA, J.-W.; YANG, S.-M. Deformation and Breakup of a Second-Order Fluid in an Electric Field, Korean J. Chem. Eng., Vol. 16, p. 585-594, 1999.

- HA, J.-W.; YANG, S.-M. Deformation and breakup of Newtonian and non-Newtonian conducting drops in an electric field, J. Fluid Mech., Vol. 405, p. 131-156, 2000.
- HA, J.-W.; YANG, S.-M. *Effects of surfactant on the deformation and stability of a drop in viscous fluid in an electric field*, J. Colloid Interface Sci., Vol. 175, p. 369-385, 1995.
- HARTEN, A. *High-resolution schemes for hyperbolic conservation laws*. Journal of Computational Physics, Vol. 49, p. 357-393, 1983.
- HARTMAN, R. P. A.; BRUNNER, D. J.; CAMELOT, D. M. A.; MARIJNISSEN, J. C. M.; SCARLETT, B. Electrohydrodynamic Atomization in the Cone-jet Mode Physical Modeling of the Liquid Cone and Jet, J. Aerosol Sci., Vol. 30, No. 7, p. 823-849, 1999.
- HAYATI, I.; BAILEY, A.; TADROS, T. H. F. Investigations into the Mechanism of Electrohydrodynamic Spraying of Liquids # 2, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 117, No. 1, p. 222-230, 1986.
- HERRERA, J. M. L.; POPINET, S.; HERRADA, M. A. A charge-conservative approach for simulating electrohydrodynamic two-phase flows using volume-of-fluid, Journal of Computational Physics, Vol. 230, p. 1939-1955, 2011.
- HINES, R. L. *Electrostatic Atomization and Spray Painting*, Journal of Applied Physics, Vol. 37, No. 7, p. 2730-2736, 1966.
- HIRT, C. W.; NICHOLS, B. D. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries, Journal of Computational Physics, Vol. 39, p. 201-225, 1981.
- HOHMAN, M. M.; SHIN, M.; RUTLEDGE, G.; BRENNER, M. P. *Electrospinning and electrically forced jets. II. Applications, Physics of Fluids, Vol. 13, p. 1-16, 2001.*
- HUA, J.; LIM, L. K.; WANG, C. Numerical simulation of deformation/motion of a drop suspended in viscous liquids under influence of steady electric fields, Physics of Fluids, Vol. 20, 113302, 2008.
- HUA, J.; LIM, L. K.; WANG, C.; SMITH, K. A. *Numerical simulation of Cone-jet formation in electrohydrodynamic Atomization*, AIChE Journal, Vol. 57, No. 1, p. 57-78, 2011.
- IFKOVITS, J. L.; SUNDARARAGHAVAN, H. G.; BURDICK, J. A. *Electrospinning Fibrous Polymer Scaffolds for Tissue Engineering and Cell Culture*, Journal of Visualized Experiments, Vol. 32, p. 4, 2009.
- ISSA, R. I. Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting, Journal of Computational Physics, Vol. 62, p. 40-65, 1986.
- JASAK, H. Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows, Tese de Doutorado, Imperial College of Science, Technology and Medicine, University of London, 1996.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. *Electrodynamics of Continuous Media*, Vol. 8, Oxford: Pergamon, p. 417, 1960.
- LASTOW, O.; BALACHANDRAN, W. Numerical simulation of electrohydrodynamic (EHD) atomization, Journal of Electrostatics, Vol. 64, p. 850-859, 2006.
- LI, Z.; LI, G.; HUANG, H.; LU, X. Lattice Boltzmann Study of Electrohydrodynamic Drop Deformation with Large Density Ratio, International Journal of Modern Physics, Vol. 22, No. 7, p. 729-744, 2011.
- MALISKA, C. R. *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. 2ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

- MELCHER, J. R. *Continuum Electromechanics*, Cambridge, MA: MIT Press, Copyright Massachusetts Institute of Technology, 1981.
- MELCHER, J. R.; TAYLOR, G. I. *Electrohydrodynamics: A Review of the role of Interfacial Shear Stresses,* Annu. Rev. Fluid Mech., Vol. 1, p. 111-146, 1969.
- OPENFOAM. OpenFOAM *User Guide*, Albert Road, Caversham, Reading, Berkshire RG4 7AN, UK, 2008. Disponível para visualização em < <u>http://www.openfoam.org/docs/user/</u>>.
- PATANKAR, S. V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. [S.1.]: Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- PATANKAR, S. V.; SPALDING, D. B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. Int. Heat and Mass Transfer, Vol. 115, p. 1787-1803, 1972.
- PHAM, Q. P.; SHARMA, U.; MIKOS, A. G. *Electrospinning of Polymeric Nanofibers for Tissue Engineering Applications: A Review*, Tissue Engineering, Vol. 12, No. 5, p. 1197-1211, 2006.
- POPPEL, B. P. V. Numerical Methods for Simulating Multiphase Electrohydrodynamic Flows with Application to Liquid Fuel Injection, University of Colorado, Department of Mechanical Engineering, Thesis, 2010.
- RUSCHE, H. Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions, University of London, Department of Mechanical Engineering, Thesis, 2002.
- SAVILLE, D. A Electrohydrodynamics: *The Taylor-Melcher Leaky Dieletric Model*. Annu. Rev. Fluid Mech., Vol. 29, p. 27-64, 1997.
- SHERWOOD, J. D. Breakup of fluid droplets in electric and magnetic fields, Journal of Fluid Mech., Vol. 188, p. 133-146, 1988.

- SHTERN, V.; BARRERO, A. Striking features of fluid flows in Taylor cones related to electrosprays, J. Aerosol Sci., Vol. 25, No. 6, p. 1049-1063, 1994.
- SPIVAK, A. F.; DZENIS, Y. A. Asymptotic decay of radius of a weakly conductive viscous jet in an external electric field, Applied Physics Letters, Vol. 73, No. 21, p. 3067-3069, 1998.
- TAYLOR, G. Disintegration of Water Drops in an Electric Field. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 280, No. 1382. p. 383-397, 1964.
- TAYLOR, G. *Electrically Driven Jets*, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 313, No. 1515, p. 453-475, 1969.
- TAYLOR, G.; McEWAN, A. D.; JONG, L. N. J. Studies in electrohydrodynamics I. The circulation produced in a drop by an electric field, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 291, No. 1425, p. 159-166, 1966.
- THOMPSON, C. J.; CHASE, G. G.; YARIN, A. L.; RENEKER, D. H. Effects of parameters on nanofiber diameter determined from electrospinning model, Polymer, Vol. 48, p. 6913-6922, 2007.
- TOMAR, G.; GERLACH, D.; BISWAS, G.; ALLEBORN, N.; SHARMA, A.; DURST, F.; WELCH, S. W. J.; DELGADO, A. *Two-phase electohydrodynamic simulations using a volume-of-fluid approach*, Journal of Computational Physics, Vol. 227, p. 1267-1285, 2007.
- TSORI, Y.; TOURNILHAC, F.; LEIBLER, L. Demixing in simple fluids induced by electric field gradients, Nature, Vol. 430, p. 544-547, 2004.

- VAN LEER, B. Towards the ultimate conservative differencing scheme. II Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme, Journal of Computational Physics, Vol. 14, p. 361-170, 1974.
- WELCH, S. W. J.; BISWAS, G. Direct simulation of film boiling including electrohydrodynamic *forces*, Physics of Fluids, Vol. 19, 012106, 2007.
- XUE, S.-C; PHAN-THIEN, N.; TANNER, R. I. *Numerical study of viscoelastic fluid in straight pipes by an implicit finite volume method*, J. Non-Newtonian Fluid Mech., Vol. 59, p. 191-213, 1995.
- YAN, F.; FAROUK, B.; KO, F. Numerical modeling of an electrostatically driven liquid meniscus in the cone-jet mode, Aerosol Science, Vol. 34, p. 99-116, 2003.
- YUDISTIRA, H. T.; NGUYEN, V. D.; DUTTA, P.; BYUN, D. Flight behavior of charged droplets in electrohydrodynamic inkjet printing, Applied Physics Letters, Vol. 96, 023503, 2010.
- ZELENY, J. *The electrical discharge from liquid points, and a hydrostatic method of measuring the electric intensity at their surfaces,* The Physical Review, Vol. 3, No. 2, p. 69-91, 1914.
- ZHANG, H. B.; YAN, Y. Y.; ZU, Y. Q. Numerical modeling of EHD effects on heat transfer and bubble shapes of nucleate boiling, Applied Mathematical Modelling, Vol. 34, p. 626-638, 2010.