

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL EM 3D DO COARSENING EM ESPUMAS: TRANSIÇÃO DO REGIME SECO AO EXTREMAMENTE MOLHADO

Pedro Inocência Rodrigues Terra
Gilberto L. Thomas

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil

Resumo

Esse trabalho pretende estudar a dinâmica de *coarsening* de espumas na região de transição entre os regimes seco e completamente molhado. Para isso, foi utilizado o Modelo Celular de Potts (MCP), implementado no ambiente computacional *CompuCell3D* (CC3D). As espumas, com frações líquidas determinadas, são simuladas em uma rede cúbica e deixadas a evoluir. Os resultados das simulações demonstram similaridade com simulações em 2D[1], mas disparidades com experimentos realizados por outros autores([2] e [3]), além de complementar outras simulações em 3D [4];

Motivações:

Espumas líquidas são bolhas de gás circundadas por uma fase líquida contínua. São largamente vistas em situações cotidianas, científicas e industriais, como ilustrado na Figura 1.

Uma caracterização das espumas pode ser feita pela fração líquida que ela contém e sua respectiva dinâmica de *coarsening* (*engrossamento da espuma*).

O casos-limite são as espumas secas, observados no topo da Fig.2 ao lado, onde as bolhas têm formatos mais poligonais, e o gás move-se mais diretamente de uma bolha para outra; e as espumas completamente molhadas (ou *líquido com bolhas*), observadas na parte baixo da Fig.2, onde as bolhas são esféricas e a transferência de gás ocorre pela difusão através líquido.

Os casos-limite das espumas têm dinâmicas de *coarsening* bem definidas teoricamente e comprovadas experimentalmente. Porém a transição entre esses dois casos ainda não é bem compreendida.

Os dados experimentais [2] da figura 3 mostram uma mudança bruta da dinâmica, mas de forma diferente de outro experimento[3] e simulações numéricas baseadas no Modelo Celular de Potts em 2D [1].

Esse trabalho abordará simulações via Modelo Celular de Potts em 3D dando continuidade ao que foi feito em [4] com o objetivo de verificar a transição entre os regimes da espuma e aprimorar a compreensão sobre ela.

Metodologia:

As condições iniciais das são determinadas aleatoriamente. Após, o sistema evolui de acordo com o Modelo Celular de Potts no ambiente computacional do *software CompuCell3D* [6]. Para um número satisfatório de bolhas, escolheu-se uma grade tridimensional com dimensão 200 x 200 x 200 voxels.(Figura 4).

A dinâmica de Potts ocorre em função da minimização de energia, consequentemente, a minimização da superfície de contato. Os parâmetros da simulação foram escolhidos baseado em trabalhos anteriores do grupo[7].

- Simulou-se espumas variando sua fração líquida (Φ) em 2%, 4%,6%, 8% e 10%. Estamos agora simulando com 20%,30% 35%, 40%,60% e 90% de Φ . As medidas foram feitas em estado de escala.

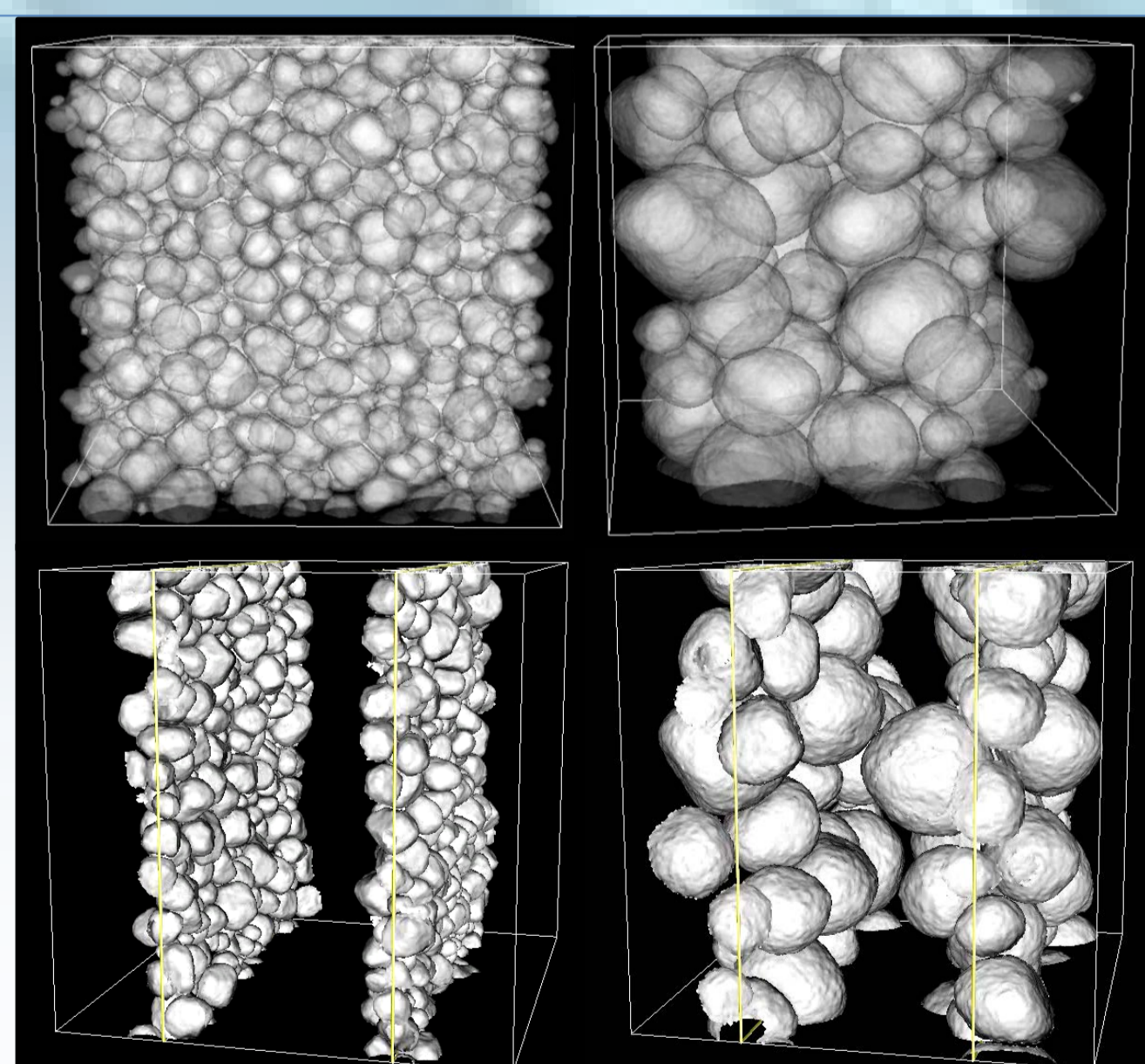


Figura 4. Imagens das simulações com $\Phi = 0,2$. Condição inicial no canto esquerdo superior e estado após 2400 MCS no canto direito superior. Na parte inferior, planos com bolhas em maiores detalhes.



Figura 1. Espumas e seus usos cotidianos (culinária, cosméticos e combate ao incêndio).

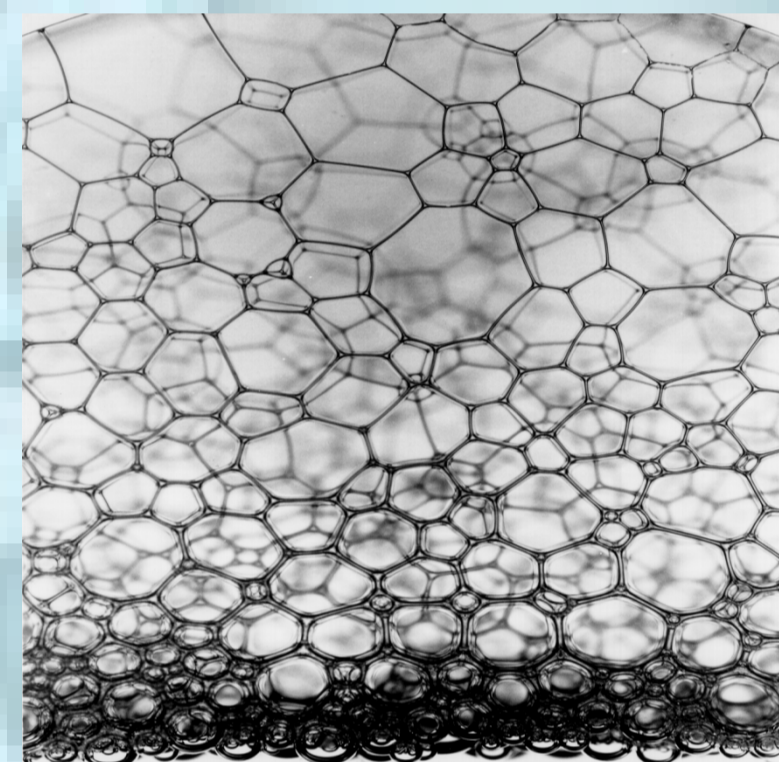


Figura 2. Obtida em [5] que ilustra ambas espumas secas e molhadas.

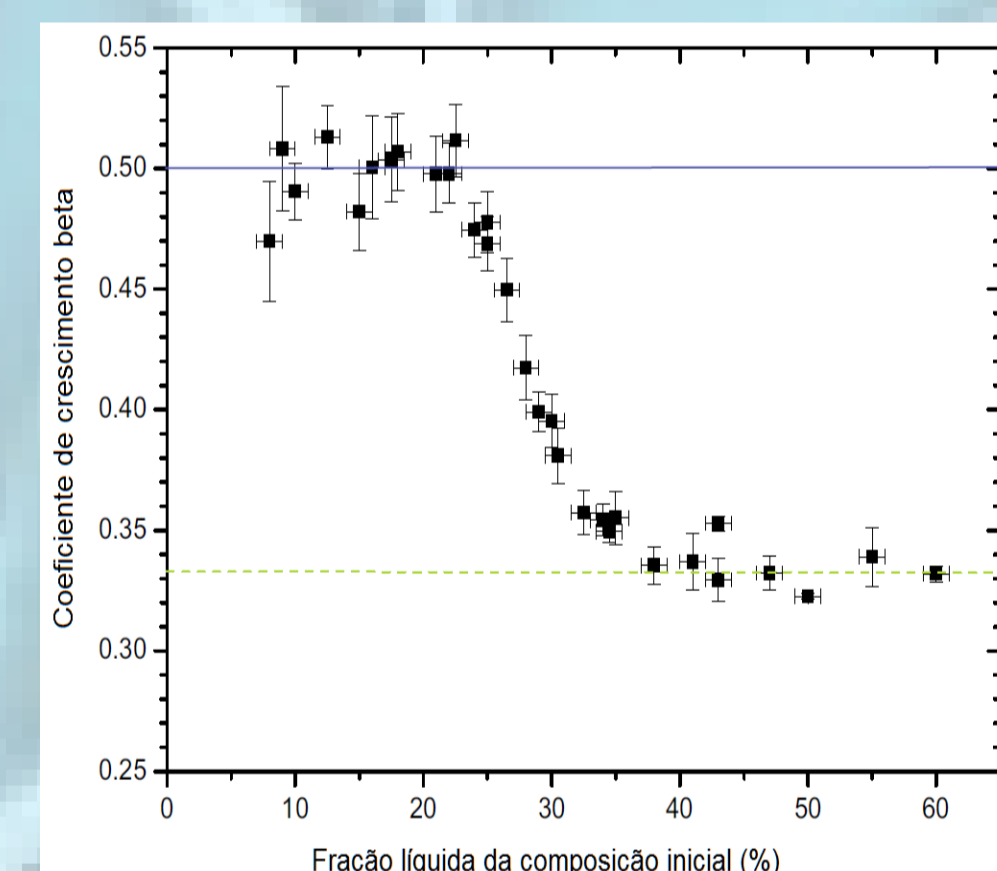


Figura 3. Expoente de crescimento da espuma por sua fração líquida retirado de [2]

Resultados:

Foi obtido o gráfico da reta em escala logarítmica do número de bolhas em função do tempo, sendo a inclinação dessa reta três vezes o expoente do crescimento (em módulo) do volume médio das bolhas da espuma. Isso porque o volume do sistema é fixo.

Diferentes declividades são observadas para cada fração líquida:

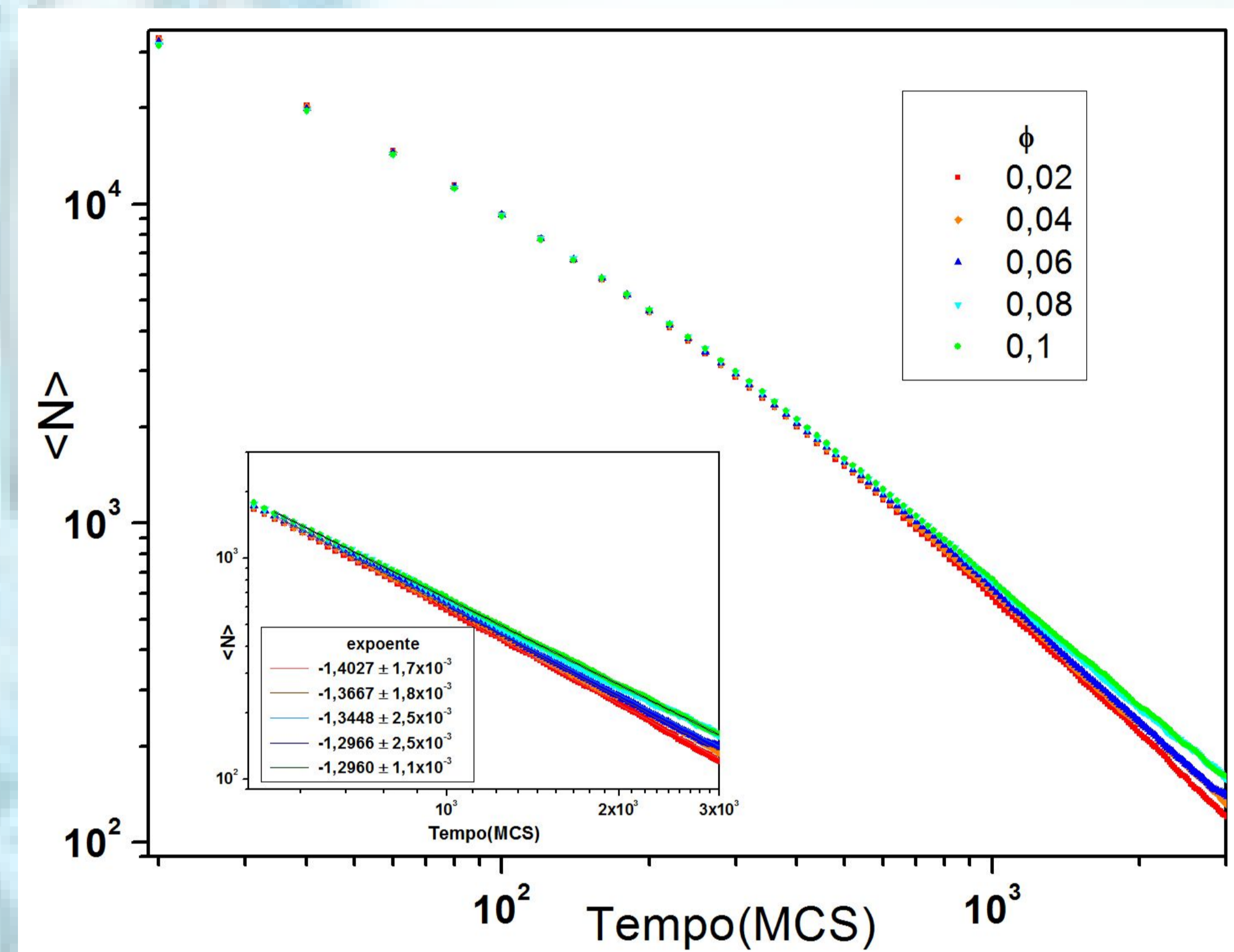


Figura 5. Número médio de bolhas da espuma em função do tempo em escala logarítmica para diferentes frações líquidas. No canto do gráfico maior, o segmento das curvas em estado de escala com ajuste linear.

Observa-se, no segundo gráfico, uma similaridade entre o comportamento do expoente de crescimento das nossas simulações e da literatura [4], com uma mudança da dinâmica de *coarsening* em função da fração líquida muito mais suave em relação ao observado nos resultados do experimentos de [2].

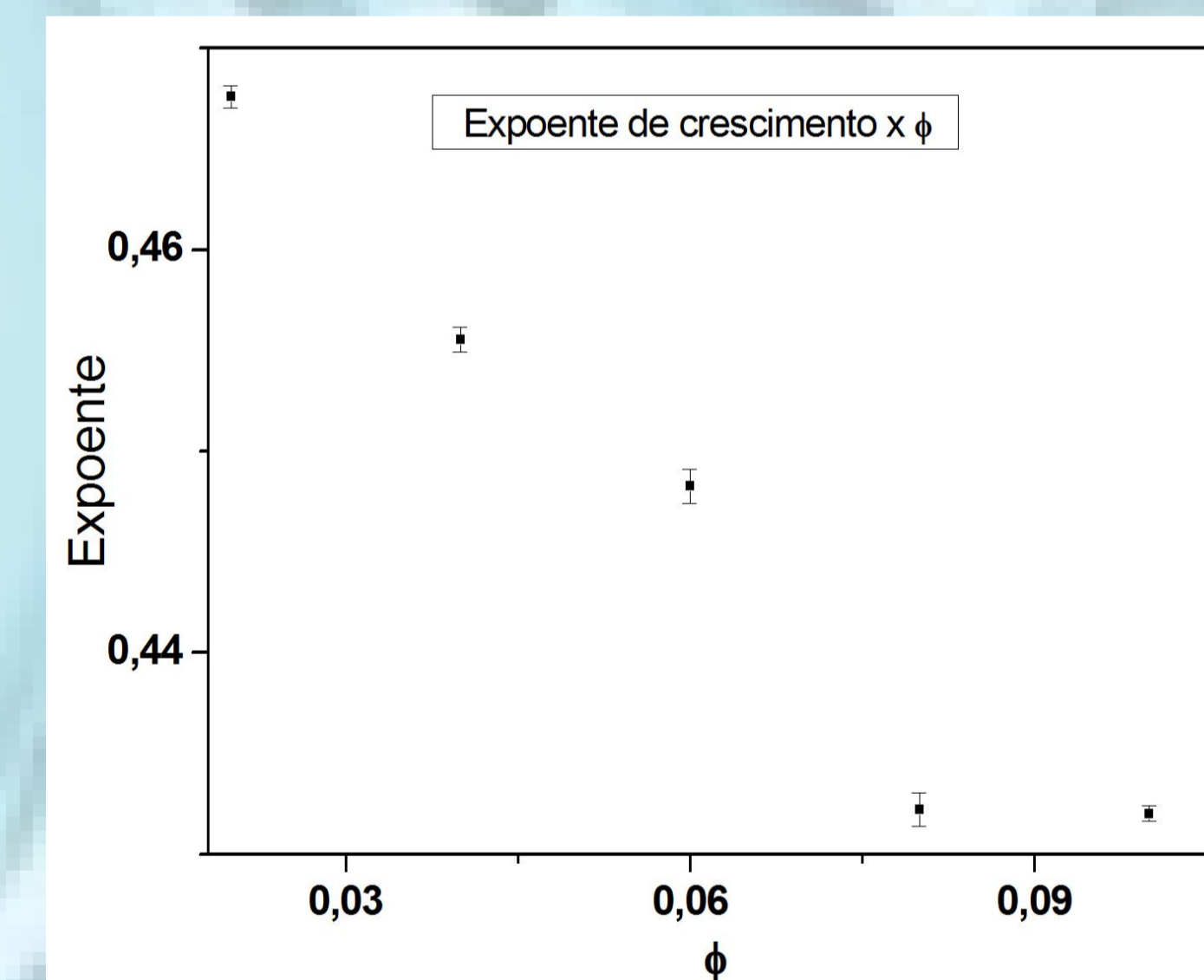


Figura 6. Dados do expoente de crescimento da espuma em função de sua fração líquido obtidos da simulação.

Essa controvérsia em relação aos experimentos traz dúvidas quanto ao aspecto da medida da fração líquida no experimento. Além disso, suspeita-se que a dinâmica não apenas dependa da fração líquida, mas também da energia de contato que rege a razão entre as superfícies líquida e seca.

Conclusões:

- Confirma-se novamente a relação de menor crescimento do volume médio das bolhas quanto maior a fração líquida da espuma;
- A nova simulação da transição entre regimes ainda demonstra disparidade com valores experimentais apesar da similaridade com outras simulações em 2D e 3D.

Perspectivas:

- Simular a dinâmica de *coarsening* em espumas para diferentes valores de energia de contato;
- Analisar novos experimentos em parceria com A. Saint-Jalmes.

REFERÊNCIAS

- 1 -I. Fortuna *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 108, 248301 (2012);
- 2 -N. Isert *et al.*, *Eur.Phys.J.E* 36, 116 (2013);
- 3 -A. Saint-Jalmes, não publicado, comunicação privada;
- 4 - G.L.Thomas *et al.*,*Coll.Surf. A*, 473, 109 (2015);
- 5 - <http://www.brarquicoadura.com>
- 6 - <http://www.compuCell3d.org>

- 7 - Gianlupi, J. F. - *Influência de características físicas ou computacionais na simulação de topologia e evolução temporal de espumas molhadas* (Trabalho de conclusão de curso - 2015).

AGRADECIMENTOS

