

## ESTUDO DA EVOLUÇÃO DE ESPUMAS COM SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

Autor: Gustavo Sieverding Bier  
Orientador: Gilberto Lima Thomas

### Introdução

Uma espuma é, basicamente, uma quantidade de líquido misturado com um gás, em que as partes do gás ficam encapsuladas dentro de filmes do líquido, formando as bolhas quem têm seus volumes alterados conforme a difusão dos gases entre elas e entre elas e o líquido. Este trabalho consiste em desenvolver e analisar simulações computacionais de espumas, a fim de estudar seus comportamentos e comparar com modelos teóricos existentes. Entender como a dinâmica de crescimento da espuma depende da fração líquida ainda é um problema em aberto.

### Metodologia

Para executar uma simulação utiliza-se o software de simulação de células e espumas CompuCell3D, no qual é possível visualizar a rede de espuma ou célula a ser estudada e receber suas informações, além de permitir configurar parâmetros importantes como temperatura e energia. Em uma espuma real, o que define a evolução das bolhas é a difusão de gases entre elas. Bolhas com maior pressão interna tendem a perder as moléculas do gás para a vizinhança e diminuir com o tempo, bolhas com menor pressão interna recebem gás e crescem. As bolhas pequenas, portanto, possuem maior pressão e tendem a sumir, enquanto as maiores predominam.

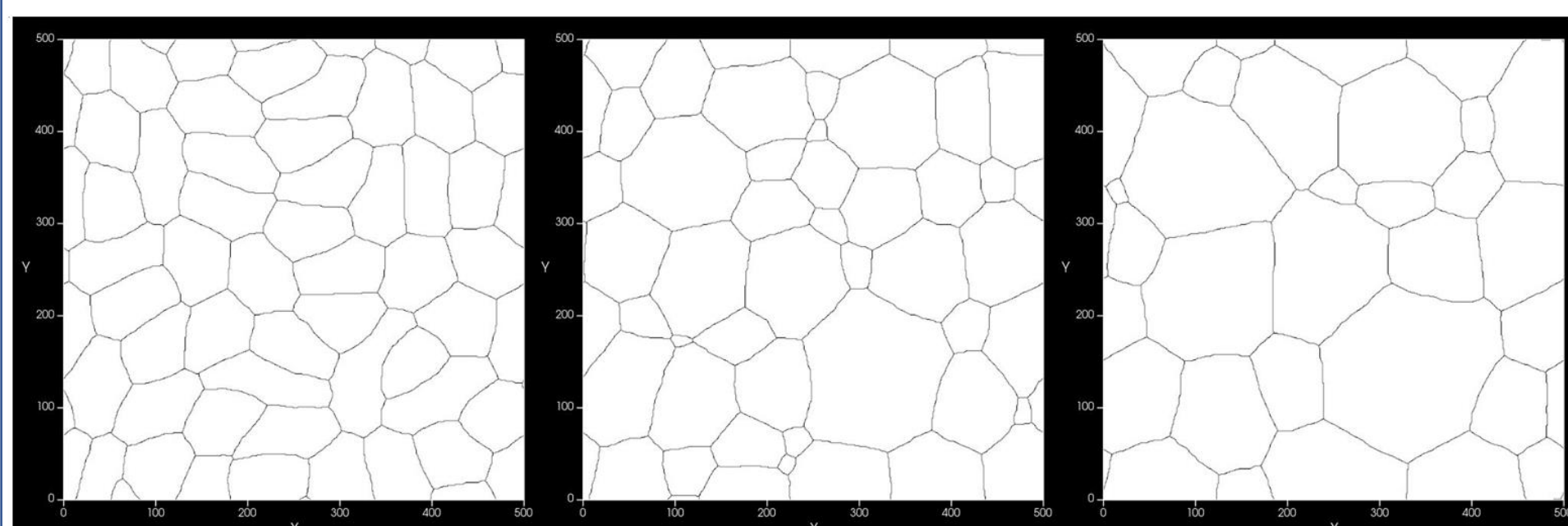
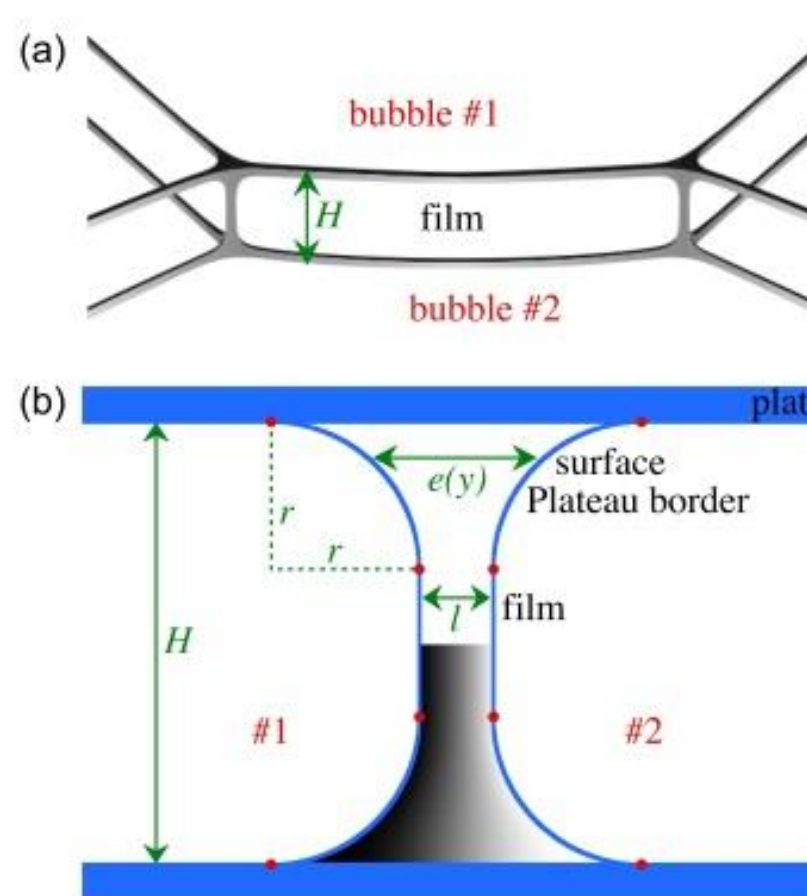


Figura: evolução de espuma seca e a curvatura de bolhas. Snapshots de 3 instantes diferentes da simulação.

### Objetivo

No contexto deste trabalho busca-se entender a relação entre o crescimento das bolhas em determinada fração líquida e suas curvaturas, as quais estão diretamente relacionadas com a suas pressões internas: quanto maior a curvatura, maior a pressão interna. A fração líquida é a razão entre o volume do líquido e o volume do gás. Em duas dimensões, as situações extremas de fração líquida, 0% (espuma seca) e maiores que 45% (espuma molhada), são bem descritas em termos da lei de von Neumann (Metal Interfaces (American Society for Metals, Cleveland, 1952), pp. 108-110.) e as teorias de Ostwald. Neste trabalho, nós realizamos simulações numéricas em duas dimensões em espumas contendo uma grande quantidade inicial de bolhas para investigar o crescimento na região de fração líquida abaixo da situação de transição em que ocorre compressão entre as bolhas (fração líquida menor que 10%), no escopo da Border Crossing Model (C. D. Schimming and D. J. Durian Phys. Rev. E **96**, 032805). Para validar o modelo, simulações numéricas em duas dimensões de espumas secas são realizadas.



a) Filme que divide duas bolhas.

b) O filme da divisória é preenchido por líquido.

### Conclusão e resultados

Nesse projeto, que ainda está em andamento, o comportamento da curvatura nas simulações é consistente com o que se espera do crescimento geral de uma bolha, no que diz respeito à comparação com o modelo. O software CompuCell3D tem se mostrado uma poderosa ferramenta para compreensão de espumas.