



A utilização de fractais para a modelagem de meios porosos: Uma simulação com o método de Lattice Boltzmann

João Ricardo Friggo e Barros

Monografia em Engenharia Química

Orientadores

Frederico Wanderley Tavares, D.Sc.
Pedro Henrique Davi Constantino, D.Sc.

Março de 2022

**A utilização de fractais para a modelagem de meios porosos:
Uma simulação com o método de Lattice Boltzmann**

João Ricardo Friggo e Barros

Monografia em Engenharia Química submetida ao corpo docente da Escola de Química como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Aprovado por:

Tânia Suaiden Klein, DSc.

Ramon Gomes de Castro Lourenço, MSc.

Orientado por:

Frederico Wanderley Tavares, DSc.

Pedro Henrique Davi Constantino, PhD.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Março de 2022

CIP - Catalogação na Publicação

BJ62u Barros, João Ricardo Friggo
A utilização de fractais para a modelagem de meios porosos: uma simulação com o método de Lattice Boltzmann / João Ricardo Friggo Barros. -- Rio de Janeiro, 2022.
61 f.

Orientador: Frederico Wanderley Tavares.
Coorientador: Pedro Henrique Davi Constantino.
Trabalho de conclusão de curso (graduação) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Bacharel em Engenharia Química, 2022.

1. Termodinâmica Aplicada. 2. Mecânica dos Fluidos. 3. Fluidodinâmica Computacional. 4. Métodos de Lattice Boltzmann. I. Tavares, Frederico Wanderley, orient. II. Constantino, Pedro Henrique Davi, coorient. III. Título.

“O universo não pode ser lido até termos aprendido sua linguagem e ficarmos familiarizados com os caracteres no qual está escrito. Esta linguagem é a matemática, e suas letras são triângulos, círculos e outras figuras geométricas, sem as quais é humanamente impossível compreender uma única palavra.”

Galileo Galilei

AGRADECIMENTOS

“Não há no mundo exagero mais belo que a gratidão.”

Jean de La Bruyère

Em primeiro lugar, aos meus pais, que me deram todo o apoio, companheirismo, amizade e força necessários para chegar até aqui. Aos meus avós, por sempre me incentivarem e por cultivarem em mim o amor a matemática. A toda minha família, por acreditarem em mim. Sem vocês, nada disso seria possível.

À Escola de Química e todo seu corpo docente, essa casa maravilhosa e desafiadora que me fez superar meus limites, aprimorar e refinar meus gostos e capacidades.

Aos meus orientadores Fred e Pedro por me motivarem e acreditarem em mim, mesmo em momentos que nem eu acreditaria. Ao Ramon, que me ajudou e me ensinou muito sobre o assunto que iremos tratar neste documento. Ao laboratório ATOMS que, no final da minha graduação, me mostrou novas possibilidades de carreira e despertou novamente em mim o amor pela pesquisa, a curiosidade pelo desconhecido.

Aos meus amigos, por me aguentarem falando incansavelmente sobre este tema e por me darem suporte nas minhas decisões. Uma menção especial aos meus colegas de curso, que são parte inesquecível desta caminhada.

À entropia, ao universo, ao caos e às trajetórias não-lineares.

A São Sebastião do Rio de Janeiro.

A todos, meu mais sincero obrigado.

Resumo da monografia apresentada à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de graduação em Engenharia Química.

**A utilização de fractais para a modelagem de meios porosos:
Uma simulação com o método de Lattice Boltzmann**

João Ricardo Friggo e Barros

Março, 2022

Orientado por:

Frederico Wanderley Tavares, DSc.

Pedro Henrique Davi Constantino, PhD.

RESUMO

O aumento da capacidade computacional doméstica e científica aumentou drasticamente ao longo das últimas décadas. Este avanço popularizou o uso de técnicas de Fluidodinâmica Computacional para problemas de escoamento através da resolução das equações de Navier-Stokes. Nesse contexto, os métodos de Lattice-Boltzmann apresentam uma abordagem não convencional para a modelagem destes problemas através da Equação do transporte de Boltzmann. Neste trabalho, utilizamos o software "OpenLB" para simular escoamentos em meios porosos, modelados através de uma forma geométrica fractal, o Carpete de Sierpinski, variando sua porosidade e o número de Reynolds do escoamento com o objetivo de recuperar as equações de Darcy e de Forchheimer para o escoamento em meios porosos. Concluímos que o "OpenLB" é uma ferramenta rápida, acurada e estável para a simulação de problemas de escoamento em meios porosos com o método de Lattice-Boltzmann, bem como verificamos a viabilidade da escolha do Carpete de Sierpinski como modelo para um meio poroso.

Palavras Chave: Métodos de Lattice Boltzmann, Fluidodinâmica Computacional, Termodinâmica.

Sumário

Lista de figuras	8
Lista de tabelas	9
1 Introdução	1
2 Modelagem macroscópica de escoamentos	3
2.1 Definições	3
2.2 Escalas relevantes	6
2.3 Leis de conservação	8
2.4 Equações de Navier-Stokes	10
2.5 Fluidodinâmica computacional	12
2.6 Teoria de meios porosos	15
3 Modelagem mesoscópica de escoamentos	18
3.1 A Equação de Transporte de Boltzmann	18
3.2 Discretização da Equação de Boltzmann	21
3.3 Colisão e Propagação	24
3.4 O algoritmo de Lattice Boltzmann	25
3.5 Aplicações	27
4 Implementação computacional	30
4.1 Introdução ao OpenLB	30
4.2 Simulação de escoamentos em meios porosos	32
4.3 Teoria fractal	35
4.4 Algoritmo proposto	41
4.5 Testes realizados	42
5 Resultados e discussão	47
6 Conclusão	54
Referências	58

Lista de Figuras

1	Algoritmo geral para a implementação LBM	26
2	O Floco de neve de Koch	37
3	A junta de Sierpinski e o Carpete de Sierpinski	38
4	O Conjunto de Mandelbrot	39
5	Código do algoritmo implementado	42
6	Condições de contorno do problema	43
7	Curvas de pressão versus tempo de simulação	48
8	Curvas de pressão, sustentação e arraste para o Carpete de Sierpinski de 2° Ordem com Reynolds = 10.	49
9	Formação de recirculações no Carpete de Sierpinski de 2° Ordem	50
10	Comparativo da formação de recirculações e caminhos preferenciais	51
11	Lei de Darcy experimental	52
12	Lei de Darcy experimental - Ajustada	53
13	Lei de Forchheimer experimental	54

Lista de Tabelas

- 1 Combinação dos parâmetros relativos a cada simulação. 44
- 2 Tempos registrados em cada teste. 45

1 Introdução

O advento da computação científica vem popularizando o uso da Fluidodinâmica Computacional (CFD) ao longo dos últimos anos. Essas ferramentas computacionais geralmente funcionam através das equações de Navier-Stokes, que não possuem solução analítica para a maioria dos escoamentos. Dessa forma, utilizam-se métodos numéricos discretos em uma malha estruturada para realizar simulações de fenômenos físicos e/ou químicos. Diferentemente, nas últimas duas décadas os métodos de Lattice Boltzmann ganham popularidade por sua abordagem, utilizando a Equação de Boltzmann para descrever as propriedades dos fluidos. Com ele, foi possível abordar problemas diversos das mais variadas áreas da engenharia. (PERUMAL, 2015)

No caso do estudo sobre meios porosos, suas especificidades incluem que a escala dos poros necessita de métodos numéricos discretos que os representem como um conjunto de elementos discretos (YA-LING, 2019). Sendo assim, o método de Lattice Boltzmann se torna um candidato natural para esta aplicação, e vem sendo bem sucedido nos últimos 30 anos.

Como problemas envolvendo meios porosos são comuns na Engenharia Química, nosso problema é então simular computacionalmente um escoamento de um fluido nesses meios. Para tal, utilizamos neste trabalho o software “OpenLB”, uma biblioteca em C++ que contém diversos algoritmos editáveis para a resolução das equações diferenciais parciais advindas da equação de Boltzmann na sua forma discreta acoplada a um operador colisão. O design de sua estrutura de dados foi pensado para sua implementação em aplicações de computação científica de alta performance, de forma paralelizada com múltiplos núcleos de processamento (KRAUSE et al., 2021).

Desta forma, temos como objetivo testar sua aplicabilidade para a simulação de escoamentos em meios porosos, verificando o impacto da variação de porosidade e da variação do número de Reynolds na performance computacional, bem como na acurácia e estabilidade dos modelos. Para alterarmos Re , podemos mudar seu valor no código do exemplo utilizado, calibrando os valores da Resolução (N) e do Comprimento característico da malha (L).

Já para alterarmos a porosidade, precisamos substituir a geometria utilizada em cada exemplo. A inspiração do trabalho foi o modelo fractal do Carpete de Sierpinski de 2°, 3° e 4° ordens, já utilizados por LIU et al. (2020) para a mimetização de um meio poroso.

Nossos resultados demonstram a capacidade do exemplo laminar “Cylinder2d” em simular as propriedades de escoamentos com $10 \leq Re \leq 40$ em meios com porosidades entre $0,624 \leq \epsilon \leq 0,790$, bem como a formação de recirculações e caminhos preferenciais ao longo da geometria. Discute-se como esses fenômenos estão relacionados com o aumento na força de sustentação, que leva a um aumento da força de arraste, da pressão e consequentemente da densidade e da energia médias. Também utilizamos a Lei de Darcy e a equação de Forchheimer como modelos de escoamentos em meios porosos, e comparamos a adesão dos dados experimentais a suas curvas previstas.

Para tal, iniciamos com uma breve discussão matemática sobre a modelagem de escoamentos macroscópicos e outros métodos de fluidodinâmica computacional disponíveis no Capítulo 2, e então no Capítulo 3 discutiremos mais a fundo a modelagem mesoscópica de escoamentos, introduzindo a teoria cinética dos gases e a formulação do método de Lattice Boltzmann a partir da discretização da equação de Boltzmann, bem como algumas de suas aplicações. No Capítulo 4 exploraremos a implementação computacional utilizada, iniciando com uma introdução sobre o funcionamento do OpenLB, o que vem sendo feito na área de modelagem de meios porosos e chegaremos a uma breve digressão sobre a teoria fractal, utilizada em nossa metodologia para a geração das geometrias de nossos testes. No Capítulo 5 apresentaremos nossos resultados e faremos uma breve discussão sobre os mesmos, explicando a relevância das simulações obtidas. Por fim, concluímos no Capítulo 6 resumindo as principais ideias discutidas ao longo do texto.

2 Modelagem macroscópica de escoamentos

2.1 Definições

Fluidos são parte fundamental da natureza, desde a água que bebemos ao ar que respiramos. Porém, sua representação física é precisa, e um fluido pode ser definido como “uma substância que se deforma continuamente sob a aplicação de uma força tangente”, não importando o quão pequena seja essa força (PRITCHARD, 2011). Diferentemente de um sólido, um fluido tende a escoar, e adaptar sua forma ao volume que o contém. De modo geral, podemos entender a palavra “Fluido” como um termo guarda-chuva (hiperônimo) para os estados líquido e gasoso da matéria.

Para seu estudo aprofundado, devemos primeiro definir suas bases lógicas. A depender do problema estudado, poderemos adotar uma abordagem por “Sistemas” ou através de “Volumes de controle”. Um **sistema** se refere a uma quantidade finita de massa; Um sistema possui fronteiras, que o separa de sua vizinhança; Essas fronteiras podem ser flexíveis, porém, nenhuma quantidade de massa pode ultrapassá-las. Já um **volume de controle** é um volume arbitrário no espaço pelo qual um fluido escoar. O limite geométrico imaginário dos limites do volume de controle é chamado de superfície de controle.

Além da abordagem escolhida, as equações que governam a dinâmica dos fluidos podem ser apresentadas em duas formas: integral ou diferencial. Para cada problema, deveremos escolher a forma que melhor se aplicará. No primeiro caso, estamos interessados no comportamento geral de um escoamento, sem necessidade de detalhar sua variação infinitesimal. Já no segundo caso, queremos analisar ponto a ponto o comportamento de uma propriedade, utilizando a solução das equações diferenciais governantes para obter seus valores no espaço e no tempo.

Considerando que fluidos são compostos por matéria, matéria qual possui massa, que por sua vez ocupa uma região finita do espaço, podemos definir que:

$$\rho = \lim_{\delta V \rightarrow \delta V'} \frac{\delta m}{\delta V} \quad (1)$$

Onde ρ será chamado de **densidade**, uma propriedade que exprime a quantidade de massa que ocupa uma certa região arbitrária. Seu valor pode variar no tempo, tendo também sua representação dada como campo por $\rho = \rho(x, y, z, t)$.

Outra propriedade de fluidos que pode ser representada como campo é a **velocidade**, definida primeiramente por:

$$\vec{u} = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{\delta S}{\delta t} \quad (2)$$

Onde S é o espaço tridimensional e t é o tempo. Sua representação em campo é: $\vec{u} = \vec{u}(x, y, z, t)$. Como tem característica vetorial, ela descreve com que magnitude, direção e sentido uma partícula de fluido se move no ponto (x, y, z) no instante t . Sendo assim, os escoamentos são classificados de acordo com o número de coordenadas espaciais em seu campo de velocidades, podendo ser uni, bi e tridimensionais.

Se as propriedades de um fluido não variam com o tempo ao longo do escoamento, diz-se que o fluido está em **estado estacionário**. Caso contrário, se houver uma variação na magnitude, direção ou sentido de suas propriedades, considera-se que seu escoamento é **transiente**.

Forças podem provocar alterações no estado de um escoamento. Elas podem ser de dois tipos: (I) forças de corpo, como a gravidade, que atuam intrinsecamente na matéria, ou (II) forças de contato, que são geradas pelo contato com partículas. No caso da gravidade, sua força por unidade de massa é constante e dada por $\vec{g} \simeq 9,81m/s^2$. Já as forças de contato geram uma **tensão**, e suas componentes podem ser subdivididas em forças normais e forças tangenciais.

Como cada força possui três componentes e atua em um ponto definido por três coordenadas, podemos definir o estresse normal à superfície (σ_n) e o estresse tangente à superfície (τ_n). Logo, para uma força atuando num ponto, suas componentes para o eixo X serão:

$$\sigma_{xx} = \lim_{\delta A_x \rightarrow 0} \frac{F_x}{\delta A_x} \quad \tau_{xy} = \lim_{\delta A_x \rightarrow 0} \frac{F_y}{\delta A_x} \quad \tau_{xz} = \lim_{\delta A_x \rightarrow 0} \frac{F_z}{\delta A_x} \quad (3)$$

Estes resultados são análogos para as outras coordenadas, o que implica que o tensor Tensão deve ser especificado por nove componentes:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (4)$$

A propriedade que define como os fluidos se comportam quando submetidos a estresse é a **viscosidade**. De acordo com a lei da viscosidade de Newton, a viscosidade pode ser definida como a razão entre o estresse tangente e sua taxa de aplicação. Matematicamente, podemos escrever que:

$$\tau_{xy} = \mu \frac{dv}{dy} \quad (5)$$

Porém, essa equação não é capaz de prever corretamente o comportamento de todos os fluidos. Dessa forma, eles podem ser divididos em **Newtonianos**, que respeitam a lei da viscosidade de Newton, e **Não-Newtonianos**, aqueles que apresentam comportamentos desviantes. Os últimos, por sua vez, podem ainda ser sub-divididos em grupos de acordo com o comportamento da taxa de variação em função do estresse, como plásticos ideais, plásticos reais, pseudo plásticos e dilatantes.

Como decorrência da viscosidade, ao analisarmos a interação de um fluido com as paredes podemos observar uma propriedade conhecida como **condição de não deslizamento**, válida tanto para fluidos newtonianos quanto para não-newtonianos. De acordo com esta condição, elementos de fluido em contato com uma parede terão velocidade igual à da parede. Isso significa que se a parede estiver parada, a velocidade da primeira camada de moléculas em contato terá velocidade $\vec{u} = 0$. Analogamente, se a parede estiver em movimento, a primeira camada de fluido terá velocidade igual a esta.

De posse dos conceitos de densidade, velocidade e viscosidade, podemos definir um parâmetro adimensional que sumariza essas três propriedades dos

fluidos, o **número de Reynolds**. Ele é muitas vezes considerado o número adimensional mais importante da mecânica dos fluidos (WELTY et al., 2008), e é expresso por:

$$Re = \frac{L u \rho}{\mu} \quad (6)$$

Onde L é o comprimento característico do escoamento. Para escoamentos internos em tubos, muitas vezes também é expresso como D , referente ao diâmetro da seção circular por onde o fluido escoar. O valor do número de Reynolds rege o perfil dos escoamentos, que apresentam dois padrões para qualquer tipo de escoamento viscoso, e pode ser dito **laminar**, onde as camadas de fluido deslizam suavemente uma sobre a outra ou **turbulento**, onde pequenas porções do fluido são transferidas através de suas camadas, dando ao perfil uma natureza caótica e aleatória.

2.2 Escalas relevantes

As moléculas, porém, não são distribuídas uniforme e continuamente pela natureza, ao contrário, estão separadas por regiões relativamente grandes de espaço vazio. Logo, apesar de a olhos nus parecerem meios contínuos, líquidos e gases são formados por moléculas se movimentando (e colidindo) em alta velocidade. Dessa forma, podemos dividir os estudos sobre a matéria em três principais escalas: Macroscópica, mesoscópica e microscópica.

É apenas na escala macroscópica que podemos aceitar a hipótese do contínuo, fundamental para o desenvolvimento da Mecânica dos Fluidos. Nesta hipótese, consideramos que todos os pontos de nosso fluido possuem o mesmo número de moléculas, e assim podemos tratá-los de maneira igual, assumindo que cada ponto possui propriedades físicas bem definidas. Sendo assim, podemos representar parâmetros tais qual densidade, temperatura e velocidade como funções contínuas da posição e do tempo (PRITCHARD, 2011). A partir do momento em que o caminho livre médio (λ) percorrido pelas moléculas começa a ser de tamanho próximo ou superior as escalas do problema em questão (L), a hipótese do contínuo não pode mais ser considerada verdadeira. Podemos verificar sua aplicabilidade através do número

de Knudsen, definido como:

$$K_n = \frac{\lambda}{L} \quad (7)$$

Para problemas envolvendo líquidos, como a água, a hipótese do contínuo é amplamente aceita dado que λ é muito pequeno. Já para gases, devemos nos atentar para as distâncias, pois uma molécula de ar nas CNTP pode ter valores para λ por volta de 70nm, aumentando rapidamente com a queda de pressão (KATOPODES, 2018). Por fim, podemos pontuar que, dentre os parâmetros mencionados, para o campo de densidades é mais intuitivo pensar em contínuo, visto que depende apenas de fatores geométricos e definição do volume de controle. Já para o campo de velocidades pode ser mais difícil garantir a continuidade, visto que ele depende também do perfil do escoamento e das condições de contorno do problema.

Como na escala microscópica, nosso foco será dado a átomos, moléculas e suas interações, e na escala macroscópica as propriedades gerais e contínuas, o que estabelece a conexão entre as três possíveis escalas de descrição é a teoria cinética dos gases (LACHOWICZ, 2011). Há extensa descrição na literatura de como podemos partir de abordagens microscópicas para prever propriedades mesoscópicas ou macroscópicas, o que faz os limites entre as três escalas flexíveis, variando com os sistemas estudados e as escalas relevantes ao problema, além de suas especificidades intrínsecas. Por exemplo, (YONG, 2021) descreve como o comportamento microscópico de poros podem formar macroporos e microfraturas na escala mesoscópica, que irão influenciar nas propriedades acústicas e térmicas macroscópicas do carvão mineral. Já REICHARDT (2011) descreve como em sistemas complexos uma única propriedade microscópica pode influenciar diversas propriedades mesoscópicas e suas estruturas. É apontado que só é possível fazer a conexão entre suas relações ao modelar corretamente os sistemas micro e meso separadamente, e depois acoplá-los procurando as relações de causa e efeito.

2.3 Leis de conservação

As leis básicas que governam os sistemas são a lei de conservação de massa, a segunda lei de Newton, a conservação de momento linear e a primeira e a segunda leis da termodinâmica. Para torná-las válidas para volumes de controle, é necessário vermos essas quantidades enquanto taxas, sendo necessária uma adaptação das equações para contemplar esses problemas.

Iniciamos com a conservação de massa. Dado que um sistema fechado tem massa fixa e definida, para escrevermos essa equação de conservação em termos de taxa fazemos:

$$\frac{dM}{dt} = 0 \quad (8)$$

Também podemos escrevê-la em sua forma integral, em função do volume, de forma que:

$$M_{sistema} = \int_V \rho \, dV \quad (9)$$

Para a conservação de momento, temos pela segunda lei de Newton que $\vec{F} = m\vec{a}$. Interpretando sua formulação em termos de momento, podemos escrever que a força é dada pela variação do momento no tempo:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt} \quad (10)$$

Dessa forma, o momento linear do sistema será dado por:

$$\vec{P}_{sistema} = \int_V \rho \, \vec{u} \, dV \quad (11)$$

Não só o momento linear é conservado, mas também o momento angular. Para o último, sua variação será dada pela soma de todos os torques atuando no sistema, onde:

$$\vec{T} = \frac{d\vec{H}}{dt} \quad (12)$$

Analogamente, podemos calculá-lo em sua forma integral:

$$\vec{H}_{sistema} = \int_V \rho \vec{r} \times \vec{u} dV \quad (13)$$

Já para a conservação de energia, há a contribuição da taxa de calor transferida pro sistema e da taxa de trabalho realizado pelo sistema para a energia total. Escreve-se que:

$$Q - W = \frac{dE}{dt} \quad (14)$$

Sendo assim, para calcularmos a energia total em um sistema, podemos escrever que:

$$E_{sistema} = \int_V e \rho dV \quad (15)$$

Onde e é um termo que sumariza as diversas contribuições para a energia total, dado por:

$$e = U + \frac{u^2}{2} + gz \quad (16)$$

Nesta expressão, U denota a energia interna por unidade de massa, \vec{u} é a velocidade e representa a contribuição da energia cinética, e por fim gz é o produto da constante gravitacional com a altura, dando a contribuição da energia potencial.

Quando a energia é transferida de um corpo para outro a uma dada temperatura T , a segunda lei da termodinâmica diz que há uma propriedade chamada entropia, cuja variação é dada por:

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T} \quad (17)$$

Sendo assim, podemos escrever analogamente às outras equações uma expressão integral para avaliarmos a entropia total de um sistema, através de:

$$S_{sistema} = \int_V s \rho dV \quad (18)$$

Agora, de posse das equações de conservação para sistemas, podemos escrever uma formulação para volumes de controle utilizando a equação genérica:

$$\frac{dN}{dt}_{\text{ sistema }} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \eta \rho dV + \int_{SC} \eta \rho \vec{u} d\vec{A} \quad (19)$$

Nessa formulação, basta substituímos as notações N e η pelo conjunto de variáveis referente à propriedade que desejamos calcular. Sendo assim, respectivamente, para $N = M, \vec{P}, \vec{H}, E, S$, teremos $\eta = 1, \vec{u}, \vec{r} \times \vec{u}, e, s$.

As equações resultantes possuem três termos bem definidos: (I) O primeiro termo denota a taxa de variação da propriedade N dentro do sistema com o tempo. (II) O segundo termo indica a variação da quantidade total da propriedade N dentro do volume de controle. (III) Por fim, o terceiro termo mede a taxa na qual a propriedade N entra ou sai do sistema através de suas fronteiras, a unidade de superfície de controle $d\vec{A}$.

2.4 Equações de Navier-Stokes

Utilizando as equações de conservação, podemos prosseguir para a análise de forças em um elemento finito de fluido com massa dm e volume $dV = dx dy dz$. É necessário pontuar que todo o desenvolvimento matemático subsequente será feito em termos de coordenadas cartesianas, porém ela também pode ser feita para coordenadas cilíndricas ou esféricas, e pode ser encontrada com detalhes em WELTY et al. (2008).

Primeiramente, consideramos a atuação das forças de contato que atuam na superfície do corpo. Podemos então analisar os estresses viscosos que atuam na direção x , que após seu agrupamento e simplificação, podemos chegar numa equação geral para a variação das forças na direção x :

$$dF_{S_x} = \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz \quad (20)$$

Podemos estender esse tratamento para as direções y e z , obtendo expressões análogas a equação acima.

Também para o mesmo sistema, é possível escrevermos a segunda lei de

Newton em termos diferenciais como:

$$d\vec{F} = dm \frac{D\vec{u}}{Dt} \quad (21)$$

Onde $\frac{D\vec{u}}{Dt}$ é a derivada substantiva, que podemos expandir em termos referentes às componentes do vetor velocidade e do tempo, como:

$$dF_x = dm \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial t} \right) \quad (22)$$

Ao combinar essa equação com as equações referentes às forças superficiais e com o termo da força gravitacional, obtém-se para a direção x:

$$\rho g_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = \rho \left(u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial t} \right) \quad (23)$$

Essa equação é conhecida como a **Equação de Navier-Stokes**, em homenagem aos matemáticos que a desenvolveram, válida para escoamentos incompressíveis e Newtonianos. Sua resolução matemática pode ser amplamente simplificada ao fazermos duas considerações: (I) assumir a incompressibilidade do fluido e (II) assumir viscosidade constante (Fluido Newtoniano). Com essas simplificações, a equação reduz-se a:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + u_x \frac{\partial \vec{u}}{\partial x} + u_y \frac{\partial \vec{u}}{\partial y} + u_z \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} \right) = \rho \vec{g}_x - \frac{\partial \vec{P}}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial z^2} \right) \quad (24)$$

Por fim, podemos combinar as três equações referentes às três componentes cartesianas em uma única equação mais compacta. Chegamos então em uma das formulações mais famosas da equação de Navier-Stokes, dada por:

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = \rho \vec{g} - \nabla \vec{P} + \mu \nabla^2 \vec{u} \quad (25)$$

2.5 Fluidodinâmica computacional

Apesar de sua grande importância e aplicabilidade, equações de Navier-Stokes não são simples de serem resolvidas analiticamente. De fato, sem um conjunto de simplificações adequadas, essas equações podem ser impossíveis de se obter uma solução analítica, e sua resolução continua em aberto, sendo até escolhida como um dos problemas do “Prêmio Millennium”, que oferece um milhão de dólares americanos para quem puder comprovar uma solução para sua forma completa. (CMI, 2022)

Como não é possível (a princípio) resolvê-la analiticamente, várias técnicas foram desenvolvidas para sua resolução numérica, fundando um novo campo de pesquisa chamado Fluidodinâmica Computacional (*CFD, Computational Fluid Dynamics*). De acordo com ZAWAWI (2018), “O escopo da fluidodinâmica computacional é obter soluções numéricas para o escoamento de fluidos através do uso de computadores”. Entre as aplicações mais comuns de CFD se destacam a aerodinâmica de carros e aviões, a hidrodinâmica de navios, o escoamento de fluidos através de bombas e turbinas, combustão e etc. Na engenharia química, podemos destacar seu uso para a modelagem de fluidos reativos, equipamentos industriais em geral e operações que envolvem transferência de calor e massa.

Logo, para podermos fornecer uma solução aproximada à equação de Navier-Stokes, devemos substituir as Equações Diferenciais Parciais que a compõem por um conjunto de equações algébricas as quais um computador é capaz de resolver. O processo pelo qual é possível fazer isso é chamado de “Discretização”. Ao invés de solucionarmos as equações para todos os pontos no espaço infinito, iremos selecionar um conjunto de pontos (em uma malha) e então resolveremos as equações apenas nestes pontos, obtendo soluções aproximadas que, em conjunto, podem nos fornecer uma solução para o problema real.

Os três principais métodos de discretização utilizados em CFD são: (1) o “Método das diferenças finitas”, (2) o “Método dos volumes finitos” e (3) o “Método dos elementos finitos”. Estes métodos são conhecidos como “De cima para baixo” (*Top down methods*), e se diferenciam pela abordagem utili-

zada para a discretização do espaço-tempo. Todos esses métodos se baseiam na resolução de um sistema algébrico, (linear ou não) que deve ser resolvido.

1. Para o **método das diferenças finitas**, o espaço físico é dividido em uma malha regular de pontos. As derivadas relativas a uma propriedade são aproximadas por combinações lineares desta propriedade, através de uma expansão em série de Taylor (geralmente de primeira ordem). Sua vantagem é ser um método simples e eficaz, apesar poder incorrer em erros de simplificação do termo de advecção da equação de Navier-Stokes. Além disso, sem cuidado especial, esta abordagem pode não garantir a conservação de massa, momento e energia perfeitamente (KRÜGER, 2017).
2. Para o **método dos volumes finitos**, o espaço não é dividido em uma malha regular, mas sim em pequenos volumes que podem assumir formatos e dimensões distintos, que nos permite representar geometrias mais complexas. Além disso, seu desenvolvimento foi pensado para ser conservativo, de modo que a massa, o momento e a energia sempre serão conservados sem erros. Volumes finitos é uma opção especialmente útil em grandes problemas, com altos números de Reynolds, escoamentos turbulentos e termos fonte graças ao seu eficiente uso de memória e velocidade (ZAWAWI, 2018). Porém, ele não é um método tão geral quanto as diferenças finitas, e para ordens superiores das aproximações de Taylor pode ser bastante difícil de se tratar, especialmente para escoamentos tridimensionais em malhas irregulares.
3. Por fim, para o **método dos elementos finitos**, a abordagem é diferente dos anteriores por utilizar as equações em sua forma integral, conhecida como “forma fraca”, onde a equação diferencial é multiplicada por uma função peso $w(x)$ e então é integrada ao longo do domínio de interesse, geralmente uma malha irregular. Este método é muito utilizado para a análise estrutural de sólidos, porém pode ser usado para a modelagem de fluidos, desde que modelado com cuidado para garantir a conservação das equações de balanço. Em relação ao método dos

volumes finitos, ele é muito mais estável, apesar de ser mais lento e necessitar de um maior uso de memória (JEONG, 2014).

Também é necessário mencionar os métodos conhecidos como “De baixo para cima” (*Bottom-up methods*), que utilizam uma abordagem de partículas para representar os fluidos. Eles não são baseados diretamente na resolução das equações de Navier-Stokes, e podem representar átomos, moléculas, conjuntos de moléculas ou porções de fluido. Deste grupo, destacam-se o método de Dinâmica Molecular, que utiliza partículas individuais e forças intermoleculares para prever o escoamento, as simulações de Monte Carlo, amplamente utilizadas para problemas com alto número de Knudsen, e a Hidrodinâmica de Partículas Suavizadas, desenvolvidas inicialmente para lidar com problemas envolvendo a astrofísica 3D.

Além destes, temos um método Bottom-Up especialmente importante para os estudos de Lattice-Boltzmann, dado que é seu precursor, conhecido como o modelo de gás reticulado (*Lattice-Gas Model*). A ideia por trás destes modelos é a de posicionar partículas nos nós das malhas, e então fazer com que elas colidam conservando massa, momento e energia. Inicialmente utilizou-se uma malha quadrada, com 4 possibilidades de velocidade por nó, porém foi apenas com a introdução da malha triangular, com 6 opções de velocidade por nó, que estes modelos puderam efetivamente ser utilizados para a simulação de fluidos.

A matemática por trás deste modelo residia na função Número de ocupação $n_i(x, t)$, uma variável booliana que expressava se uma partícula ocupava ou não uma determinada posição em um dado tempo. Assim, as partículas podem colidir e serem redistribuídas na malha, conservando massa e momento nos nós. Suas principais vantagens residiam no fato dos números de ocupação fazerem colisões “perfeitas”, levando os erros de arredondamento a valores muito baixos. Além disso, estes métodos podiam ser amplamente paralelizados. Porém, seu maior problema era o ruído estatístico, pois assim como os gases reais, nestas simulações os nós estavam em constante movimento e colisão, o que levava os valores das propriedades macroscópicas a flutuar constantemente até para gases em equilíbrio (KRÜGER, 2017). A partir da

década de 1980, com o desenvolvimento do método de Lattice-Boltzmann, o ruído estatístico foi significativamente suprimido, o que aumentou drasticamente sua aplicabilidade. Como esse método não necessita da resolução do sistema algébrico, ele acaba tendo vantagem em relação aos métodos tradicionais.

2.6 Teoria de meios porosos

Nos campos de Engenharia Química, Engenharia de Petróleo, Ciência dos Materiais, Mecânica dos solos e na Biomecânica, meios porosos são um problema recorrente. Na maioria dos sólidos naturais ou artificiais seu volume não é completamente preenchido com matéria: existem espaços vazios desocupados que chamamos de “poros”. Em geral, os componentes que constituem o meio e a matéria que preenche os poros possuem propriedades físico-químicas diferentes que influenciam umas as outras, o que torna a construção de uma teoria unificada de meios porosos uma tarefa árdua (BOER, 1998).

Um dos primeiros teóricos da geometria de meios porosos foi o matemático Leonhard Euler (1762, capítulo XVII, apud ZAMM, 1998):

“Todos os corpos do planeta são compostos de matéria áspera e matéria sutil, onde a primeira também pode ser chamada de matéria característica, ao passo que a outra é tão infinitamente pequena de forma que sua densidade não acrescenta em nada a sua massa. É a mistura de ambas as matérias em suas menores extensões, gerando espaços livres onde nenhuma matéria áspera é contida, que chamamos de poros do corpo.”

Porém, apesar de abundantes na natureza, a geometria associada a meios porosos é extremamente complexa, o que dificulta seu estudo e simulação.

Podemos definir porosidade como:

$$\phi = \frac{V_{vazio}}{V_{total}} \quad (26)$$

Logo, quanto menor a porosidade, mais compactado é o corpo. A formulação matemática da teoria de escoamentos em meios porosos surge da Equação de Navier-Stokes, e remonta dos estudos de Henry Darcy sobre

hidráulica. Em seus estudos, ele propôs uma relação entre velocidade e queda de pressão que pode ser descrita por:

$$\vec{\nabla}p = -\frac{\mu}{K}\vec{u} \quad (27)$$

Onde K é um parâmetro que denota a permeabilidade do meio. Essa equação é conhecida como **Lei de Darcy**, e pode ser obtida através da Equação de Navier-Stokes, com as devidas considerações. Essa lei, porém, só é válida para meios isotrópicos, homogêneos, estáveis geometricamente, na ausência de gases livres compressíveis, a baixos números de Reynolds e a temperatura constante (IRMAY, 1958). Para cada uma destas restrições, diversos trabalhos foram publicados em como adaptar a equação de Darcy. Especialmente para altos números de Reynolds (acima de $Re = 10$), uma correção foi feita por Forchheimer para lidar com o aumento da inércia ao escoamento a altas velocidades (até por volta de $Re = 100$, pois acima deste valor, para meios porosos, o escoamento já pode ser considerado turbulento). Desta forma, sua formulação possui dois termos, o primeiro que quantifica as forças viscosas e o segundo que simboliza as forças inerciais (LOURENÇO, 2021). A Equação de Forchheimer é dada por:

$$-\vec{\nabla}p = \frac{\mu}{K} \left(1 + \frac{\beta_F \rho K}{\mu} |\vec{u}|\right) \vec{u} \quad (28)$$

Onde o parâmetro β_F é uma constante empírica. Para tornar esta equação mais simples de se trabalhar, podemos definir a permeabilidade aparente como:

$$K_{app} = -\frac{\mu |\vec{u}|}{|\vec{\nabla}p|} \quad (29)$$

E assim, reescrevemos a equação de Forchheimer como:

$$\frac{1}{K_{app}} = \frac{1}{K} + \frac{\beta_F \rho K |\vec{u}|}{\mu} \quad (30)$$

Dessa forma, obtemos uma relação linear entre \vec{u} e $1/K_{app}$, que por sua vez é uma função da velocidade, da queda de pressão e da viscosidade. Logo,

tendo estes valores, podemos plotar uma reta e encontrar os valores de K e β_F .

Para um melhor entendimento de seu correto funcionamento, diversas técnicas tem sido aplicadas para simular estes ambientes, dentre essas quais o método de Lattice Boltzmann (LBM), que se destacou nesta área nos últimos anos por sua boa descrição de meios mesoscópicos, a escala usual dos meios porosos onde outros métodos computacionais não são tão eficazes. (BOEK; VENTURIOLI, 2010)

3 Modelagem mesoscópica de escoamentos

3.1 A Equação de Transporte de Boltzmann

Os métodos de Lattice-Boltzmann se diferenciam dos outros métodos de CFD por terem suas bases matemáticas na Equação do Transporte de Boltzmann, ao invés de partirem diretamente da resolução das Equações de Navier-Stokes. Dessa forma, é possível simularmos fenômenos relativos não mais apenas ao meio macroscópico, mas agora também ao meio mesoscópico, onde não podemos mais aceitar a validade da hipótese do contínuo.

A Equação de Boltzmann é criada na Teoria Cinética dos Gases (TCG), proposta formalmente por Maxwell (1859), mas cujo desenvolvimento data de Bernoulli (1738) (BRUSH, 2006).

De acordo com KRÜGER (2017),

“A teoria cinética é uma descrição do comportamento de fluidos que se encontra entre as escalas microscópica, onde nós acompanhamos o movimento de moléculas individuais, e macroscópica, onde descrevemos os fluidos em termos de quantidades tangíveis como densidade, velocidade do fluido ou temperatura. Na teoria cinética mesoscópica, nós descrevemos uma distribuição de partículas em um gás, uma quantidade que evolui na escala do tempo médio de colisão (t_{mfp}).”

Sendo assim, sua principal variável é a **função de distribuição das partículas**, $f(x, \xi, t)$, vista como uma generalização da densidade que leva em conta os efeitos da velocidade microscópica individual ξ , simultaneamente representando a densidade de massa no espaço tridimensional bem como sua variação no espaço de velocidades tridimensional. Logo, para conectarmos a função de distribuição com variáveis macroscópicas, podemos tomar sua integral em relação a velocidade para achar a **densidade mássica** em função do tempo, por:

$$\rho(x, t) = \int f(x, \xi, t) d^3\xi \quad (31)$$

Podemos proceder analogamente para achar a **densidade de momentos**, a **densidade de energia total** e a **densidade de energia interna** respectivamente por:

$$\rho(x, t)u(x, t) = \int \xi f(x, \xi, t) d^3\xi \quad (32)$$

$$\rho(x, t)E(x, t) = \frac{1}{2} \int |\xi|^2 f(x, \xi, t) d^3\xi \quad (33)$$

$$\rho(x, t)e(x, t) = \frac{1}{2} \int |v|^2 f(x, \xi, t) d^3\xi \quad (34)$$

Em que v se refere a velocidade relativa, o desvio da velocidade da partícula ξ da velocidade média local u :

$$v(x, t) = \xi(x, t) - u(x, t) \quad (35)$$

Por fim, através da definição da função de distribuição, podemos também achar expressões para a **pressão** e a **temperatura** através da energia interna. A rota mais direta para este cálculo é descrevermos a pressão como o momento dos impactos das partículas sobre a superfície. Em altas velocidades (e altas temperaturas) mais partículas se chocam com mais energia por uma dada unidade de tempo.

Para gases monoatômicos, podemos desconsiderar as operações de vibração e rotação e seus graus de liberdade associados, ficando apenas com a translação molecular em três dimensões. Logo, com três graus de liberdade, podemos utilizar a equação dos gases ideais e achar que, para um gás ideal monoatômico:

$$\rho e = \frac{3}{2} \rho RT = \frac{3}{2} p \quad (36)$$

Dessa forma, como temos uma expressão para a energia interna pela função de distribuição, escrevemos analogamente para a pressão e temperatura que:

$$p = \rho RT = \frac{2}{3} \rho e = \frac{1}{3} \int |v|^2 f(x, \xi, t) d^3\xi \quad (37)$$

De posse da relação entre a função de distribuição e as variáveis termodinâmicas, podemos entender como a primeira evolui com o tempo. Como f é uma função da posição (x), da velocidade (ξ), e do tempo (t), sua derivada

em relação ao tempo será:

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) \frac{dt}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta}\right) \frac{dx_\beta}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta}\right) \frac{d\xi_\beta}{dt} \quad (38)$$

Analisando os termos do lado direito da equação temos que $dt/dt = 1$, que $dx_\beta/dt = \xi_\beta$ (velocidade da partícula), e que de acordo com a segunda lei de Newton $d\xi_\beta/dt = F_\beta/\rho$ (Força específica do corpo com unidade de N/kg). Logo, podemos reescrever a equação (38) utilizando o operador $\Omega(f) = df/dt$ como o diferencial total e chegar à **Equação de Boltzmann**:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi_\beta \left(\frac{\partial f}{\partial x_\beta}\right) + \frac{F_\beta}{\rho} \left(\frac{\partial f}{\partial \xi_\beta}\right) = \Omega(f) \quad (39)$$

A equação de Boltzmann pode então ser entendida como uma equação da continuidade em um espaço de posições e velocidades de seis dimensões (BIRD et al., 2002). Ela também pode ser vista como uma equação de advecção e colisão das partículas, onde os dois primeiros termos do lado esquerdo representam a advecção e o termo do lado direito representa o operador colisão, um termo fonte que representa a distribuição local de f devido a colisões (SHARMA; TAVARES; STRAKA, 2019). Como colisões conservam momento, massa, energia e, no caso monoatômico, energia translacional, podemos representar essas regras como momentos do operador colisão, de forma que:

$$\int \Omega(f) d^3\xi = 0 \quad (40)$$

$$\int \xi \Omega(f) d^3\xi = 0 \quad (41)$$

$$\int |\xi^2| \Omega(f) d^3\xi = 0 \quad (42)$$

Em que as equações (40), (41) e (42) são, respectivamente, as conservações de Massa, Momento e Energia. Porém, ainda de acordo com SHARMA, TAVARES e STRAKA (2019), “O operador colisão é altamente não linear em sua forma original”, de forma que em 1954 Bhatnagar, Gross, e Krook (BGK) o linearizaram, representando-o por um simples processo de relaxação, co-

conhecido como Operador BGK:

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau} f - f^{eq} \quad (43)$$

Em que τ é conhecido como o “tempo de relaxação”, que determina a velocidade até se atingir o equilíbrio. O operador BGK é o operador mais simples possível, dentro de uma família, para representar uma colisão. Porém, apesar de sua simplicidade, ele pode não ser o operador mais preciso. Problemas de instabilidade são comuns no modelo conforme diminuimos o tempo de relaxamento (MCCRACKEN, 2005). De acordo com STERLING (1996), para malhas hexagonais com 7 velocidades, quadradas com 9 velocidades e cúbicas com 15 velocidades, um τ menor do que 0,5 criará instabilidade no modelo.

Para lidar com esse problema, diversos operadores de colisão foram desenvolvidos, cada um apresentando suas vantagens e desvantagens. Outro operador muito utilizado é o de “múltiplos tempos de relaxação” (MRT), útil para lidarmos com fluidos imiscíveis com grandes razões entre suas viscosidades (YANG; BOEK et al., 2013). Sendo assim, para cada problema é possível encontrar um operador colisão que melhor se encaixa à situação.

3.2 Discretização da Equação de Boltzmann

Os métodos de Lattice Boltzmann são ferramentas numéricas populares e confiáveis utilizadas para simular fenômenos de transporte tais como transferência de calor, massa e momento. A forma geral destes métodos pode ser obtida a partir da discretização da Equação de transporte de Boltzmann em um conjunto finito de pontos, tal qual as equações de Navier-Stokes. Esta tarefa mostra-se mais fácil para a Equação de Boltzmann do que para outras equações de escoamento de fluidos, pois apesar de sua resolução analítica ser complexa, ela é relativamente simples de se implementar. Isto ocorre pois sua função é apenas uma equação hiperbólica que descreve a advecção da função de distribuição f com uma velocidade de partícula ξ . Além disso, o termo fonte $\Omega(f)$ depende apenas do valor local de f e de seus gradientes. (KRÜGER, 2017)

Diferentemente da Equação de Boltzmann simples, a quantidade básica

no Método de Lattice Boltzmann é a função de distribuição das velocidades discretas $f_i(x, t)$, também conhecida como **Populações de partículas**. Similar a função de distribuição, ela representa a densidade de partículas com velocidade $c_i = (c_{ix}, c_{iy}, c_{iz})$ na posição x no tempo t . Dessa forma, a densidade mássica ρ pode ser descrita através de somas ponderadas como:

$$\rho(x, t) = \sum_i f_i(x, t) \quad (44)$$

Analogamente, podemos descrever a densidade de momentos e de energia respectivamente como:

$$\rho(x, t)u(x, t) = \sum_i c_i f_i(x, t) \quad (45)$$

$$\rho(x, t)E(x, t) = \frac{1}{2} \sum_i f_i(x, t)(c_i - u)^2 \quad (46)$$

A principal diferença entre f_i e f é que para a primeira todos os seus argumentos são discretos. A variável c_i é referente às velocidades discretas, enquanto x serão os pontos da malha quadrada separados por uma distância δx . Além disso, f_i só está definida em certos instantes t , separados por intervalos de tempo δt (KRÜGER, 2017). Podemos então reescrever a Equação de Boltzmann em sua forma discreta como:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = \Omega_i(f) \quad (47)$$

O termo $f(x + c_i \Delta t, t + \Delta t)$ é então definido como **Etapa de advecção** ou **Etapa de transmissão**, enquanto o termo $\Omega(f) + f(x, t)$ será chamado de **Etapa de colisão**. Toda simulação do método de Lattice Boltzmann terá obrigatoriamente estas duas etapas, transmissão e colisão, onde o operador colisão conserva massa, momento e energia. (SHARMA; TAVARES; STRAKA, 2019)

Também é importante mencionar sobre a escolha de parâmetros. O passo de tempo Δt e o espaçamento da malha Δx representam respectivamente uma resolução de tempo e uma resolução de espaço. Sendo assim, uma es-

colha possível para suas unidades seriam as do SI, onde Δt seria dado em segundos e Δx seria dado em metros. Porém, a escolha mais comum na literatura de Lattice Boltzmann serão “Unidades de malha”, unidades artificiais onde simplesmente $\Delta t = 1$ $\Delta x = 1$. Dessa forma, podemos simplesmente converter entre as unidades de malha e as unidades físicas explorando as leis de similaridade, onde é preciso apenas garantir que os números adimensionais relevantes, como o número de Reynolds, sejam iguais em ambos os sistemas (KRÜGER, 2017).

Os conjuntos de velocidade são conhecidos pelos acrônimos DdQq, onde D se refere ao número de dimensões do problema, e Q se refere ao número de velocidades. Os conjuntos mais utilizados para se resolver a Equação de Boltzmann são: (i) para o caso unidimensional, D1Q3, (ii), para o caso bidimensional, D2Q9, e (iii), para o caso tridimensional D3Q15, D3Q19 e D3Q27.

Os conjuntos de velocidade são representados matematicamente por matrizes, que relacionam suas magnitudes (c_i) com o peso relativo de cada vetor (w_i). Este peso será inversamente proporcional ao tamanho do vetor distância da origem do sistema de coordenadas ao vértice específico do vetor. Dessa forma, para um sistema D2Q9, teremos 1 vetor com comprimento 0 e peso $\frac{4}{9}$, teremos 4 vetores com comprimento 1 e peso $\frac{1}{9}$, e quatro vetores com comprimento $\sqrt{2}$ e peso $\frac{1}{36}$, por exemplo.

Há também de se atentar à escolha entre a acurácia do modelo e o custo computacional. Embora sempre seja desejada a maior acurácia possível, deve-se levar em consideração a demanda computacional de cada operação, devido ao maior número de velocidades envolvidas no cálculo. AGARWAL et al. (2021) ressalta que o custo computacional pode ser até 50,6% maior na escolha de um modelo D3Q27 em relação a mesma simulação com um modelo D3Q15, porém ganhando-se em acurácia e sensibilidade. KRÜGER (2017) também destaca que, apesar de ser por volta de 40% menos eficiente que o modelo D3Q19, o modelo D3Q27 é útil em alguns termos não lineares de truncamento, onde as correções do momento de advecção são rotacionalmente invariantes. Desta forma, este modelo é provavelmente a melhor escolha para simulações com altos números de Reynolds e turbulência.

3.3 Colisão e Propagação

Devemos também discretizar o operador colisão para acoplá-lo à equação de Boltzmann. Para o operador BGK, temos que:

$$\Omega_i(f) = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau} \Delta x \quad (48)$$

Logo, ele relaxa as populações em direção ao equilíbrio f_i^{eq} em uma taxa dada por τ . Este equilíbrio é dado por:

$$f_i^{eq}(x, t) = w_i \rho \left(1 + \frac{u \cdot c_i}{c_s^2} + \frac{(u \cdot c_i)^2}{2c_s^4} - \frac{(u \cdot u)^2}{2c_s^2} \right) \quad (49)$$

O termo c_s se refere a velocidade do som, onde $c_s^2 = (1/3)\Delta x^2/\Delta t^2$. Já o termo w_i será um ponderamento específico escolhido de acordo com o conjunto de velocidades do problema.

Agora, podemos chegar a equação de Lattice BGK (LGK), também conhecida como equação de Boltzmann discreta acoplada ao operador BGK:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (50)$$

Essa equação pode ser dividida em duas partes:

(i) Primeiro, referente a colisão (Ou relaxação):

$$f_i^*(x, t) = f_i(x, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (51)$$

Onde $f_i^*(x, t)$ representa a função de distribuição após as colisões, e f_i^{eq} é calculado através de f_i por (19).

(ii) Em segundo lugar, referente a propagação:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(x, t) \quad (52)$$

Dessa forma, é possível resumir o conceito da Equação de Lattice Boltzmann por essas duas partes: Colisão e propagação. A colisão é simplesmente uma operação algébrica local, onde calcula-se a densidade ρ (44) e a veloci-

dade macroscópica u (45) para achar as distribuições de equilíbrio f_i^{eq} (49), e assim acharmos sua distribuição imediatamente após a colisão f_i^* (50). Após esta etapa, propaga-se a distribuição resultante de f_i^* aos seus pontos vizinhos (51). Quando ambas as etapas são completas, avança-se uma unidade de tempo (KRÜGER, 2017).

É importante destacar que toda a discussão matemática acima foi baseada no Operador de Colisão BGK, que sofre de instabilidade e inacurácia por utilizar apenas um parâmetro de relaxamento na computação. O resultado é que todas as quantidades que não são conservadas relaxam em direção ao equilíbrio na mesma taxa, o que nem sempre será uma simplificação física aceitável. Na mecânica dos fluidos, diferentes fenômenos ocorrem em diferentes escalas de tempo, o que significa que diferentes quantidades hidrodinâmicas devem relaxar em tempos diferentes. Além disso, devido ao tempo de relaxamento constante, estas simulações estão restritas a Números de Prandtl (Pr) fixos, o que inviabiliza sua utilização em estudos de transferência de calor com grandes variações de temperatura (SHARMA; TAVARES; STRAKA, 2019).

Para contornar este problema, diversos outros esquemas de colisão foram desenvolvidos, com a única condição de que um operador colisão deve conservar massa, momento e energia. Um operador colisão muito famoso é o MRT (*Multiple Relaxation Time*), onde a propagação ocorre no espaço de velocidades e a colisão ocorre no espaço de momentos. Dessa forma, o Operador MRT é capaz de gerar diferentes números de Prandtl, o que o torna apto para modelar fluxos térmicos com coeficientes variáveis. Outros operadores colisão importantes são o operador colisão em cascata e o operador entrópico. A escolha do operador deve acompanhar as especificidades do problema físico que se deseja simular.

3.4 O algoritmo de Lattice Boltzmann

Podemos então resumir um algoritmo geral para a implementação de uma simulação de Lattice-Boltzmann como na Figura 1.

Temos uma etapa de inicialização, onde definimos os valores das variáveis

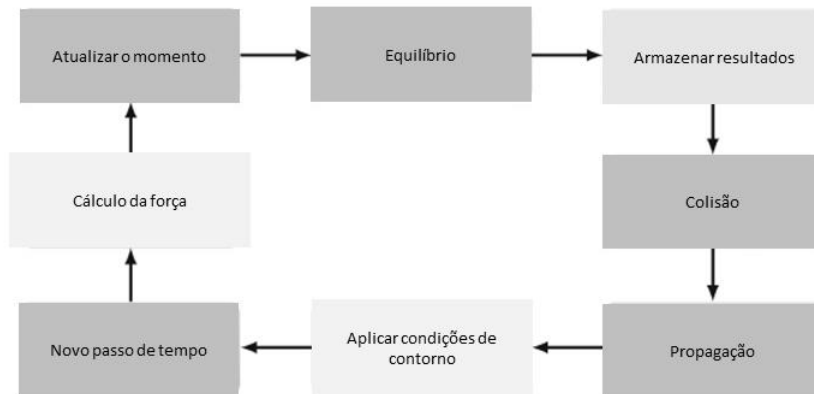


Figura 1: Algoritmo geral para a implementação computacional de uma simulação de Lattice-Boltzmann.

no tempo $t = 0$, onde geralmente $\rho = 1$ e $u = 0$. Nesta etapa, alocamos na memória os campos macroscópicos de densidade e velocidade em vetores, sejam bi ou tridimensionais, proporcionais a quantidade de pontos a serem calculados.

Com esses valores em mãos, são conhecidos também os valores das funções f_i e f_i^{eq} . De posse destas funções, podemos prosseguir para as etapas de colisão e propagação, de onde calcula-se um novo valor para f_i . Esta etapa é implementada de modo que os pontos ainda não afetados pela colisão não sejam sobrescritos na memória, de modo a que nós possamos acessá-los nas etapas de tempo posteriores. Há diversas maneiras de fazer isso, como rodar a memória na direção oposta a direção de propagação, ou alocar a memória como funções “velhas” e “novas”, ou ainda realizar uma etapa de propagação combinada, onde a colisão ocorre apenas nos pontos necessários e a memória dos pontos adjacentes só é acessada no momento de computar seus novos valores.

Aplicam-se então condições de contorno específicas, caso elas existam no sistema, e então prosseguimos para um novo ciclo, com um novo passo de tempo. Caso haja forças externas, elas são introduzidas nesta etapa e o ciclo se fecha, com a nova função f_i gerando novos valores para as variáveis ρ e u de acordo com as equações de conservação.

Este algoritmo é comum a todas as aplicações de Lattice-Boltzmann, o que o torna extremamente flexível, pois permite a inclusão de funções externas, quando necessário para aplicações complexas, porém mantém a simplicidade inerente do modelo para aplicações que não requerem estas especificidades, tornando o código eficiente e rápido.

3.5 Aplicações

Em posse de nossa base matemática, podemos agora explorar as aplicações do método de Lattice Boltzmann.

Apesar de seu desenvolvimento numérico ter sido feito ao longo do século XX, foi ao longo dos últimos anos com o advento da computação que o método de Lattice Boltzmann atraiu mais atenções do meio científico. Por sua natureza cinética ser uma descrição mesoscópica dinâmica da física de fluidos, é considerado uma abordagem numérica efetiva para simular tanto problemas estatísticos microscópicos quanto macroscópicos, especialmente alguns novos fenômenos complexos que ainda não são bem descritos por equações macroscópicas. Sendo assim, os LBMs tem sido amplamente utilizados nos mais diversos campos da engenharia, tal como escoamento de fluidos em geometrias complexas, escoamentos turbulentos não-homogêneos, escoamentos multifásicos e com multicomponentes, problemas de transferência de calor e massa envolvendo mudanças de fase, escoamento eletroosmótico, e escoamento em meios porosos, para citar alguns exemplos (XING, 2021).

Especialmente no caso da engenharia química, Sharma, et al (2019) destaca seus usos em algumas aplicações como:

1. Para a dinâmica de bolhas, devido a sua excelente capacidade em modelar fenômenos interfaciais. Neste caso, utiliza-se o operador colisão MRT e os modelos de força de Shan-Chen, desenvolvidos para fenômenos multifásicos e multicomponentes, e de Energia Livre, que são termodinamicamente consistente.
2. Para a formação de gotas, como gotas caindo em filmes, gotas de gotas, interação entre gotas e partículas, a formação de gotas em microcanais,

a coalescência de gotas e sua quebra, misturas dentro de gotas e outros fenômenos recorrentes na engenharia química.

3. Para reatores e reações, como em bioengenharia, células combustíveis, combustão, catálise heterogênea a vácuo, biorreatores, fármacos, fermentação e reações catalíticas. A abordagem para reações é feita utilizando uma interface entre a micro e a mesoescala, utilizando a técnica da dupla função de distribuição.
4. Para tanques agitados, utilizados em praticamente todos os campos da engenharia de processos. Os LBMs se destacam aqui por sua boa representação de turbulências, que aumentam a eficiência do processo de mistura. O método implementado é o do método das fronteiras imersas, que consegue lidar com as complexidades envolvidas em modelar fronteiras não-estáticas.
5. Para catálise heterogênea, onde podemos caracterizar a eficiência de conversão das partículas catalíticas, utilizando principalmente o modelo de Lattice-Boltzmann entrópico para a formação de cristais.
6. Para o escoamento em meios porosos, foco deste trabalho, onde sua principal aplicação na engenharia química talvez seja a modelagem de reservatórios de petróleo, problema que envolve não só o meio como também a abordagem multifásica. Além da geometria, um dos principais desafios desta aplicação é a interação microscópica entre sólidos e líquidos (Molhabilidade).
7. Para a transferência de calor e massa, onde três principais modelos são utilizados: Os modelos M-S (*Maxwell-Stefan*) e DDF (*Double Distribution Function*), naturais de Lattice-Boltzmann, e o modelo híbrido, onde as equações de massa e momento são resolvidas pela equação de Boltzmann e as equações de calor são resolvidas por solvers comuns de CFD. Convecção natural, convecção forçada, transferência de calor conjugada e convecção de Rayleigh são alguns dos problemas nos quais é possível utilizarmos os LBMs.

Nos últimos anos, estes métodos têm atraído uma crescente atenção da comunidade da computação científica de alta performance devido a seu algoritmo facilmente implementado e paralelizável. Seu sucesso é dado pois sua performance não é limitada pelos subsistemas de memória de sistemas de vetores (WELLEIN, 2006). De acordo com HEUVELINE (2009): “As etapas que mais demandam esforço computacional são as etapas de colisão e propagação, podendo levar até 95% de todo tempo de execução computacional. Porém, como a etapa de colisão é puramente local e a etapa de propagação apenas requer dados dos pontos vizinhos, a paralelização através da decomposição dos domínios é eficiente pois os custos de comunicação são baixos.”

Dessa forma, os métodos de Lattice-Boltzmann reivindicam sua posição como uma ferramenta computacional útil para a resolução de variados problemas em Engenharia Química, podendo ser utilizado em diversas aplicações com aplicações de computação paralela e com demandas computacionais relativamente mais baixas que outras aplicações mais tradicionais de CFD. Assim, seu estudo é cada vez mais difundido através de grupos de pesquisa e empresas ao redor do mundo.

4 Implementação computacional

4.1 Introdução ao OpenLB

Baseado em seu sucesso teórico, diversos algoritmos foram desenvolvidos para a aplicação do método de Lattice Boltzmann. Apesar de sempre seguirem uma estrutura em comum, cada código terá suas vantagens e desvantagens em relação ao problema de estudo.

Em primeiro lugar, temos softwares OpenSource como o OpenLB, Palabos e Taxila LBM (LOURENÇO, 2021). O OpenLB destaca-se por sua genericidade, por ter uma estrutura modular, por ter uma paralelização híbrida e por ser de código aberto, permitindo sua total modificação e adaptação aos problemas de interesse, bem como aumento de performance, eficiência e escalabilidade (KRAUSE et al., 2021). Já o Palabos também se destaca por sua capacidade de paralelização, tendo sido aplicado com 4 operadores colisão, principalmente para escoamentos incompressíveis ou pouco compressíveis. Seus modelos padrões incluem um modelo multifásico, de partículas individuais, de física acoplada e diversas edições de condições de contorno (LATT et al., 2021). Por fim, o Taxila LBM é marcado por seu design para testes rápidos e por sua performance em paralelo com o PETSc, uma ferramenta que contém diversas estruturas de dados com múltiplos graus de liberdade, permitindo o uso de até 60.000 núcleos de processamento. Dessa forma, o Taxila LBM é principalmente utilizado em modelagens de meios porosos que requerem grande capacidade computacional, especialmente as relacionadas com dados geológicos reais, utilizando principalmente o modelo Shan-Chen (COON et al., 2014).

Já para as opções comerciais, diversas empresas desenvolveram algoritmos de LBM para as mais variadas aplicações. Para citar alguns exemplos, temos a Dassault Systems (Simulia), que nos últimos anos tem estudado as aplicações do método para aerodinâmica e escoamentos com altos números de Mach, chegando até a regiões supersônicas, bem como para design térmico de produtos. Temos também a Cadence, com seu software Omnis, que vem sendo utilizado para a modelagem de escoamentos multifásicos, para a in-

teração de fluidos com estruturas e para escoamentos supersônicos, dentre outras aplicações.

Em nosso trabalho, optamos por utilizar o OpenLB, por sua facilidade de implementação, de edição e por ter muitos exemplos disponíveis cobrindo várias áreas de aplicação. Como desejamos estudar a influência de um meio poroso fractal, foi levada em consideração na escolha a possibilidade de importação e criação de geometrias arbitrárias via edição do código, o que foi facilmente exequível por sua característica Open Source.

De acordo com KRAUSE et al. (2021), o OpenLB é uma estrutura numérica para simulações de Lattice Boltzmann criada por estudantes e pesquisadores de diferentes áreas da Fluidodinâmica Computacional. Como ele é possível realizarmos simulações com pouco esforço, e também criar novas aplicações ainda não programadas devido a sua estrutura passo-a-passo seguindo o algoritmo de Lattice-Boltzmann.

Toda simulação do OpenLB segue um caminho genérico que pode ser sumarizado em 7 etapas:

1. Inicialização, onde os fatores de conversão entre as unidades de malha e as unidades físicas são criados e o tipo de malha (o conjunto de velocidades do problema) é escolhido.
2. Preparar a geometria, onde importamos um arquivo .stl ou criamos uma geometria a partir das funções “Indicator” disponíveis na biblioteca, que geram diferentes formas geométricas.
3. Preparar a malha, onde nós escolhemos o operador colisão e o comportamento das fronteiras.
4. Loop principal com o timer, onde a simulação é efetivamente iniciada, repetindo os três próximos passos até o número de iterações definido no código ser atingido.
5. Definição das condições de contorno, por onde o fluido entra e por onde o fluido sai, por exemplo.

6. Colisão e propagação, onde a função de distribuição das partículas sofre alteração e conseqüentemente altera o valor das variáveis macroscópicas.
7. Computação dos resultados, onde os valores calculados na etapa de colisão e propagação são armazenados em um arquivo .ppm ou .vti.

Logo, para utilizarmos os códigos disponíveis no OpenLB só é necessário saber o básico da teoria de Lattice-Boltzmann e escolher o exemplo mais adequado ao problema que desejamos modelar. Caso nenhum dos exemplos disponíveis seja próximo ao problema proposto, podemos facilmente editar o código devido a sua estrutura familiar e genérica, sendo necessário apenas um conhecimento em C++.

Dentro da versão do 1.4 do OpenLB existem exemplos pré-fabricados para a simulação de escoamentos laminares, multicomponente, de partículas, com transferência de calor e turbulentos. Dessa maneira, podemos simular uma miríade de problemas de engenharia apenas com seus códigos já desenvolvidos, além de podermos criar novas aplicações utilizando sua estrutura de funções.

4.2 Simulação de escoamentos em meios porosos

De acordo com SHARMA, TAVARES e STRAKA (2019), “Escoamentos em meios porosos são um mundo de pesquisa completo por si só”. O escoamento de tutano pelos ossos, a exploração de hidrocarbonetos de reservas de petróleo, escoamento através de catalisadores, exploração e contaminação de águas subterrâneas, filtração, e transporte de calor e massa em leitos empacotados são apenas alguns dos exemplos destes escoamentos.

A modelagem matemática destes meios é um problema recorrente no campo da fluidodinâmica computacional, e tem sido objeto de estudos ao longo de todo o século XX, desde os estudos pioneiros de Darcy até a adequação da equação de Navier-Stokes para meios porosos. Porém, muitas das leis que governam esses escoamentos ainda necessitam de um aprimoramento

em sua formulação matemática, e diversos desafios ainda permanecem abertos para a correta predição de suas geometrias em modelos computacionais.

Muitos parâmetros influenciam suas propriedades hidrodinâmicas macroscópicas, como a porosidade, a angulação dos grãos, a distância relativa e o tamanho relativo dos grãos ao meio, a heterogeneidade do meio e a rugosidade média. Geralmente, os modelos computacionais para a simulação de meios porosos se utilizam dos coeficientes macroscópicos destes meios, principalmente a porosidade e a tortuosidade. Porém, apesar destes modelos serem precisos, eles são geralmente muito lentos e caros para aplicações práticas de Engenharia (BORUJENI, 2022).

Entre os estudos pioneiros sobre meios porosos, YAN (2022) destaca a contribuição de Edgar Buckingham, o inventor da Teoria- π na análise dimensional. Já ZHU (2022) destaca os trabalhos de Lucas (1918) e Washburn (1921) que modelaram meios porosos como um tubo capilar, e desenvolveram a equação de Lucas-Washburn para sintetizar a inibição espontânea que ocorre em meios porosos.

Diversos outros modelos também foram propostos na literatura, como em AL-RAOUSH et al. (2003), que compara dois sistemas baseados em esferas uniformes: (i) a geração de sistemas não consolidados através de uma abordagem de eixos médios e modelos em rede com (ii) os modelos gerados a partir dos diagramas de Voronoi e das “Tesselações de Delaunay”, criando uma rede que liga os centros das esferas com diferentes tamanhos, gerando assim um meio uniforme. Os dois modelos comparados, apesar de apresentarem bons resultados quando comparados com as imagens de tomografia dos meios simulados, tiveram diferenças entre si devido principalmente a pixelização e a resolução finita, bem como a decisão arbitrária de se escolher os centros dos meios porosos simulados. Outro modelo proposto partindo de ZUBELDIA et al. (2016), utiliza imagens de microtomografia de raio-X combinadas com autômatas celulares, malhas de células que contêm valores discretos que são atualizados a cada iteração com base nos valores das células adjacentes no instante de tempo anterior. Em seu estudo, conclui-se que a partir de pequenas amostras tomográficas é possível criar meios porosos artificiais que mantenham suas propriedades, como porosidade e distribuição dos vazios, de

forma a serem utilizados como condições de contorno em métodos numéricos de mesoescala.

Além disso, também devem ser levadas em consideração as fraturas, que ocorrem independentemente da geometria do meio, como em rochas, geleiras, madeira, concreto e até em diversos materiais biológicos. Essas falhas geram caminhos preferenciais e devem ser cuidadosamente modeladas para se aproximar do objeto real de estudo. Elas podem ser representadas como descontinuidades no meio poroso previamente modelado, são aproximadamente planares e possuem características diferentes do que o meio em si. Apesar de serem relativamente finas, elas podem ser muito maiores do que os diâmetros médios dos poros, o que afeta completamente o comportamento de um fluido escoando pelo modelo, devido as alterações que provocam nos valores da constante de permeabilidade. Ainda, a rede de falhas apresenta diversas escalas para um mesmo meio, tornando sua modelagem ainda mais complexa. Alguns estudos foram conduzidos no sentido de modelar a rede de falhas separadamente do meio poroso, utilizando um modelo de escalamento fractal para inseri-las. Isso ocorre pois as fraturas não apresentam um tamanho característico padrão, apesar de serem similares em geometria (BERRE, 2019).

Por fim, XIONG et al. (2016) sumariza que muitos modelos para a geração de rede de poros foram desenvolvidos nas últimas décadas, destacando a geração estatística de modelos 3D a partir de imagens 2D, modelos granulares baseados no empacotamento aleatório de esferas, no mapeamento direto baseado em imagens 3D, como o algoritmo dos eixos médios exposto anteriormente, o modelo de redes regulares, que pode ser estatisticamente representativo para amostras com macro-porosidade acima de 100nm, e também o modelo de redes regulares em duas escalas, que aprimora o modelo de redes regulares utilizando duas escalas diferentes para as redes, ganhando em resolução e acurácia porém a custos computacionais elevados. O autor destaca, porém, que para todos estes modelos a maior fonte de incerteza é a resolução das técnicas de obtenção de imagens, gerando inevitáveis erros na escala dos nanômetros.

O desenvolvimento destes modelos ocorreu durante todo o século XX e também no século XXI, porém a maioria deles, por assumir geometrias

simples e propriedades uniformes para os poros, negligenciaram a grande heterogeneidade nas características de sistemas reais (ZHU, 2022).

Atualmente, os métodos de Lattice-Boltzmann aparentam ser a ferramenta numérica mais viável para lidar com problemas em meios porosos, pois conseguem naturalmente utilizar geometrias e condições de contorno complexas, sem a necessidade de um grande refinamento na malha. Além disso, são capazes de lidar com fronteiras móveis, e dado sua natureza cinética conseguem capturar as interfaces fluido/fluido com muito detalhe. Por fim, também são pouco custosos computacionalmente e evitam longos tempos de simulação, além de serem facilmente paralelizáveis (SHARMA; TAVARES; STRAKA, 2019).

4.3 Teoria fractal

A partir dos anos 2000, diversos grupos de pesquisa (principalmente de universidades Chinesas) começaram a se aprofundar em modelos fractais para a simulação de meios porosos. Em 2010, LI (2010) concluiu que modelos fractais utilizados para simular a pressão capilar foram mais acurados em relação a dados experimentais extraídos de rochas de gêiseres do que o modelo Brooks-Corey utilizado anteriormente para estas rochas. Em 2021, WU et al. (2021), também utilizando modelos fractais, foram capazes de analisar dados de inibição espontânea em reservatórios e validá-los com dados experimentais. Por fim, LIU et al. (2020) estudou os efeitos da dimensão fractal na geometria, utilizando um tapete de Sierpinski acoplado a função de Weierstrass-Mandelbrot(WM) para simular meios porosos, mostrando que a influência da rugosidade pode ser modelada através da modificação dos parâmetros da função WM.

De acordo com PICKOVER (1995), a palavra “Fractal” foi utilizada pela primeira vez por Benoit Mandelbrot em 1975 para descrever um conjunto de curvas raramente vistas anteriormente, advindas da recém descoberta capacidade dos computadores de performarem cálculos complexos. Segundo MANDELBROT (1989):

“A Geometria Fractal é uma geometria possível de ser traba-

lhada no meio termo entre a ordem geométrica excessiva da geometria Euclidiana e o caos geométrico da matemática geral. Ela é baseada numa forma de simetria que tem sido previamente sub utilizada (...). Ela é convenientemente vista como uma linguagem que provou seu valor através de seus usos. Seus usos na arte e na matemática pura podem ser ditos poéticos. Seus usos em diferentes áreas de ciência dos materiais e engenharia são exemplos prosaicos práticos. (...) Muitos dos problemas da geometria fractal envolvem antigos mistérios, alguns conhecidos pelos homínídeos primitivos, outros descritos na Bíblia, e outros conhecidos por qualquer artista de paisagens.”

A definição mais simples de Fractal é “Um objeto que apresenta autossimilaridade (*self-similarity*)”, ou seja, um objeto cuja parte representa o todo, que conforme aumenta-se ou diminui a escala na qual vê-se o objeto, ele se mantém inalterado.

Porém, de acordo com NOLTE (2018), o desenvolvimento por trás dessa teoria remonta ao século XIX, começando com Karl Weierstrass, em 1872. Partindo de um problema de séries de potências dado por Riemann a seus alunos, ele descobriu o “Monstro de Weierstrass”, hoje conhecida como “Função de Weierstrass”, uma função contínua porém não-diferenciável em todos os seus pontos, dada por:

$$g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a^n \cos b^n \pi x \quad (53)$$

Onde a é um número positivo menor que 1 e b é um inteiro ímpar.

Inspirado pela descoberta de Weierstrass, George Cantor publica em 1883 o “Conjunto de Cantor”, que leva também a “Escada de Cantor”, uma função cuja derivada em quase todos os pontos é igual a zero, mas que sua integral converge para uma unidade. Ela é um exemplo de função que não é igual a integral de sua derivada. Começam a ser levantadas dúvidas sobre a dimensionalidade desta função, que aparentemente é menor do que uma linha unidimensional. Outro resultado importante demonstrado por Cantor em 1878 era de que todo ponto de um espaço n -dimensional está associado a um número no conjunto dos Reais, e não no conjunto dos Naturais, como se pensava anteriormente.

A partir das dúvidas levantadas por Cantor sobre o conceito de dimensi-

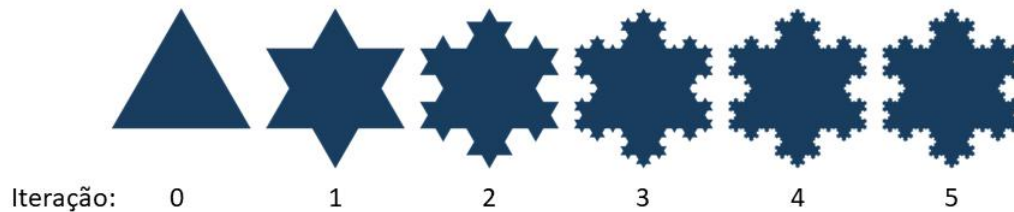


Figura 2: O floco de neve de Koch, partindo da função geradora e se estendendo por 5 iterações. São apresentadas 3 curvas de Koch unidas desde a primeira imagem para dar o efeito do Floco de Neve.

onalidade, Giuseppe Peano (1890) e David Hilbert (1891) constroem algoritmos que geram curvas unidimensionais (linhas) que são capazes de preencher um plano bidimensional.

Seguindo esta procura de funções que ocupassem o plano bidimensional apesar de serem curvas unidimensionais, Helge von Koch propôs em 1904, a partir de seus estudos sobre Teoria dos Números, um algoritmo que partia de um conjunto de segmentos de linha que, quando aplicado um fator de escala, produzia uma curva que adentrava o espaço bidimensional mas que não era diferenciável em nenhum ponto. Para sua surpresa, ao se unir três dessas curvas se chegava na forma de um floco de neve, sendo assim conhecida como “O floco de neve de Koch”(Figura 2).

Já em 1915, Waclaw Sierpinski, um matemático polonês em seu doutorado, chegou contraintuitivamente num resultado que dizia que todo ponto num plano bidimensional poderia ser representado por apenas uma coordenada. Intrigado por essa descoberta, ele voltou aos estudos de Cantor e propôs uma abordagem diferente de Hilbert e Peano, partindo de um triângulo bidimensional (e depois de um quadrado) utilizando um algoritmo que removia peças cada vez menores da figura original, obtendo ao fim uma forma geométrica de dimensão menor que 2. Essas figuras ficaram conhecidas

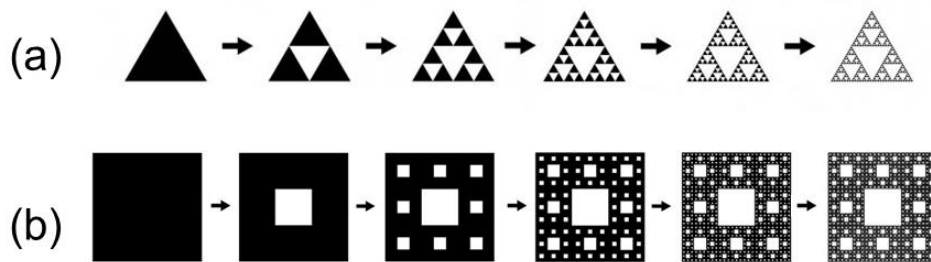


Figura 3: (a) A junta de Sierpinski (Ou triângulo de Sierpinski) e (b) o Carpete de Sierpinski (Ou quadrado de Sierpinski).

como Junta de Sierpinski e Carpete de Sierpinski (Figura 3).

Em conjunto, os trabalhos de Weierstrass, Cantor, Peano, Koch e Sierpinski provocaram uma crise na geometria enquanto matemáticos tentavam resgatar os conceitos de dimensionalidade. Foi nesse contexto que Hausdorff, trabalhando com o conjunto de Cantor, mostrou que a medida deste conjunto iria de zero a infinito com o aumento gradual da dimensão fractal, ou dimensão não inteira, definida por:

$$D_h = \frac{\log N}{\log \frac{L}{n}} \quad (54)$$

Onde D_h ficou conhecida como “Dimensão de Hausdorff”, N é o comprimento do segmento a cada iteração, L é o comprimento da linha original e n é o número de divisões do segmento. Com esta equação, ele foi capaz de chegar aos valores das dimensões do Monstro de Weierstrass ($D_h = 1,5693$), Conjunto de Cantor ($D_h = 0,6309$), da curva de Koch ($D_h = 1,26$), da Junta de Sierpinski ($D_h = 1,585$) e do Carpete de Sierpinski ($D_h = 1,8928$). Dessa forma, foi a partir desses estudos que em 1967 Benoit Mandelbrot publicou seu estudo pioneiro chamado “O quão grande é a costa da Inglaterra? Autossimilaridade estatística e dimensão fractal”, onde ele demonstra que o tamanho da costa divergia a partir de uma dimensão de Hausdorff igual a $D_h = 1,25$. Sendo um engenheiro da IBM, ele foi um dos primeiros a

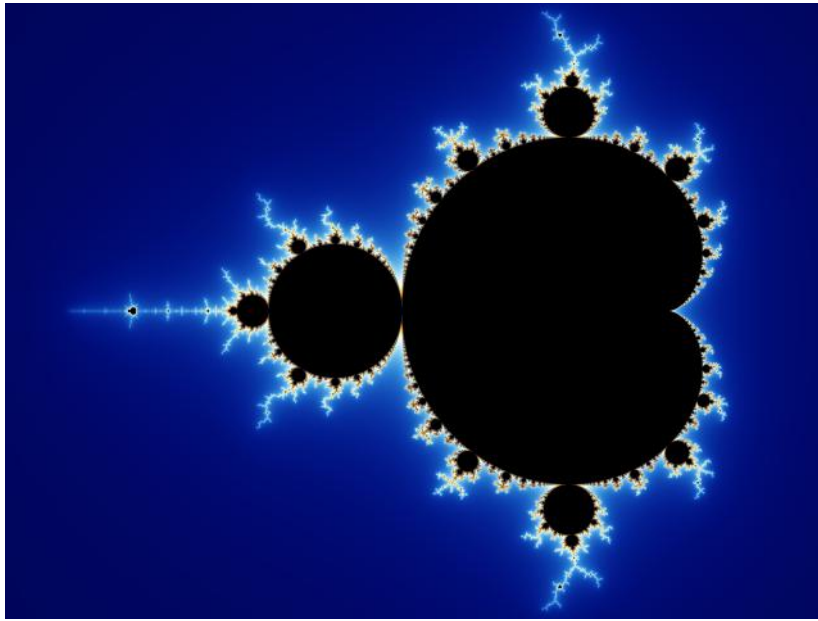


Figura 4: O Conjunto de Mandelbrot (Ao centro, em preto), é uma representação de pontos no plano complexo, onde a parte imaginária é referente o eixo vertical e a parte real é referente o eixo horizontal. A escolha de qualquer ponto (associado a um par de coordenadas) neste conjunto irá gerar um Conjunto de Julia equivalente.

ter acesso ao poder de visualização computacional, o que o fez perceber as propriedades fractais de diferentes objetos naturais como árvores, galáxias, alvéolos pulmonares e linhas de costa, entre outras. Posteriormente, em seus estudos em Harvard, Mandelbrot, em parceria com Gaston Julia, ele demonstrou a convergência e divergência de séries no plano complexo, criando então o Conjunto de Mandelbrot, onde qualquer coordenada neste conjunto é capaz de gerar um Conjunto de Julia equivalente e infinito, sendo que as coordenadas dentro dos limites do Conjunto de Mandelbrot produzem Conjuntos de Julia convergentes e as fora destes limites produzem Conjuntos de Julia divergentes, como na Figura 4.

Assim como os métodos de Lattice Boltzmann, os fractais também foram muito tempo considerados apenas curiosidades científicas. Porém, nos últimos anos suas aplicações na teoria dos meios porosos vêm sendo reconhecidas e utilizadas por diversos autores. Foi comprovado que meios porosos

seguem modelos de escala fractais (YU, 2008), e que suas leis de similaridade podem ser exploradas dadas as suas propriedades estatísticas para gerar meios porosos, suas propriedades para a simulação de dispersão térmica, resistência ao escoamento e permeabilidades (tanto para fluidos Newtonianos como para não-Newtonianos). Demonstra-se que a geometria fractal e suas bases matemáticas são ferramentas poderosas para um correto entendimento da física fundamental de meios porosos, sendo ainda possível em trabalhos futuros obter expressões analíticas para problemas em aberto em sua simulação.

Além disso, XU (2015) sumariza diversos autores que publicaram modelos matemáticos para a simulação fractal de meios porosos, argumentando que fractais são uma alternativa útil para estudar fenômenos de transporte e suas propriedades macroscópicas, já que eles têm o poder de caracterizar sistemas desordenados e heterogêneos de microestruturas da ordem de $1nm$ a $100\mu m$. Nestes modelos, nenhuma constante empírica é criada e todos os parâmetros utilizados têm um significado físico claro e bem definido. Foi demonstrado que a geometria fractal é uma poderosa técnica para caracterizar microestruturas complexas e principalmente para a análise matemática teórica de meios porosos.

Dessa forma, é uma decorrência natural desta teoria a utilização dos métodos de Lattice Boltzmann para simular escoamentos em meios porosos fractais, dadas as notáveis aplicabilidades do método para estes ambientes. Temos exemplos de sua implementação para fluidos reagentes em meios porosos (KANG, 2010), onde destaca-se sua flexibilidade e facilidade para fenômenos físico-químicos em meios complexos. Para mudanças de fases e transferência de calor, YA-LING (2019) atesta sua eficácia para a modelagem térmica na microescala dos poros, porém atentando às condições de contorno da camada limite térmica. Os autores destacam também que, para estes problemas, as investigações ainda estão numa fase inicial, apesar de estarem se desenvolvendo rapidamente nos últimos anos. Também é investigada a mudança de fase sólida para líquida, onde os LBMs baseados em entalpia são utilizados dado sua simplicidade e efetividade. Afirma-se que apesar de seu sucesso inegável, há limites para sua implementação, com alguns parâmetros

físicos sendo negligenciados.

4.4 Algoritmo proposto

Partimos do exemplo de escoamento laminar “Cylinder2d”, onde um fluido escoava bidimensionalmente numa cavidade retangular e encontra um obstáculo circular. Este exemplo foi projetado para baixos números de Reynolds, como uma aplicação básica do OpenLB para a visualização do comportamento de fluidos ao se chocarem com uma barreira.

Como nosso objetivo é simular escoamentos em meios porosos, decidimos seguir a metodologia de LIU et al. (2020) que simula estes ambientes utilizando um Carpete de Sierpinski de 4° Ordem como meio poroso fractal, utilizando ainda a função de Weierstrauss-Mandelbrot nas bordas dos quadrados do carpete para melhor simular a rugosidade de um meio real. Em seus experimentos, ele valida o modelo para o escoamento unidimensional bifásico em 7 diferentes geometrias. Em nosso experimento, simulamos Carpete de Sierpinski simples, com paredes lisas, de 2°, 3° e 4° Ordens.

Para isso, alteramos as dimensões da cavidade retangular inicial do exemplo para uma cavidade quadrada. Em segundo lugar, substituímos a geometria do obstáculo circular por quadrados, utilizando uma função intrínseca da biblioteca: o “IndicatorCuboid2D”. Esta função permite que nós posicione um retângulo simples no interior da cavidade, utilizando os argumentos de posição da origem, dimensão no eixo X, dimensão no eixo Y e inclinação θ em relação ao eixo X (Figura 5). Sendo assim, utilizando uma sequência organizada de IndicatorCuboid2D’s, geramos Carpetes de Sierpinski de 2°, 3° e 4° ordens, simulando então o meio poroso fractal proposto por LIU et al. (2020). Através desse método, pudemos obter mais velocidade, facilidade e flexibilidade de implementação, sendo capazes de editarmos as dimensões e coordenadas de cada cubóide individualmente diretamente dentro do código fonte. A princípio, essa rota poderia nos gerar um alto custo computacional na etapa de inicialização, porém esse grande aumento do tempo não foi verificado.

Outras opções para a geração da geometria foram consideradas, como

```

81 Vector<T,2> extend( lengthX,lengthY );
82 // Definir as dimensões de cada quadrado
83
84 // Dimensões do Quadrado principal:
85 Vector<T,2> square( centerCylinderX,centerCylinderY );
86
87 // Dimensões dos Quadrados de nível 2:
88 Vector<T,2> square2( centerCylinderX/3, centerCylinderY/3 );
89
90 // Definir as origens de cada quadrado
91 // Origem do quadrado do 1º Ordem
92 Vector<T,2> origins( originMainX,originMainY );
93
94 // Origens dos quadrados de 2º Ordem
95 Vector<T,2> origins2( originMainX-centerCylinderX,originMainY-centerCylinderY ); // Inferior esquerdo
96 Vector<T,2> origins3( originMainX-centerCylinderX,originMainY ); // Centro esquerdo
97 Vector<T,2> origins4( originMainX-centerCylinderX,originMainY+centerCylinderY ); // Superior esquerdo
98 Vector<T,2> origins5( originMainX,originMainY-centerCylinderY ); // Inferior centro
99 Vector<T,2> origins6( originMainX,originMainY+centerCylinderY ); // Superior centro
100 Vector<T,2> origins7( originMainX+centerCylinderX,originMainY-centerCylinderY ); // Inferior direito
101 Vector<T,2> origins8( originMainX+centerCylinderX,originMainY ); // Centro direito
102 Vector<T,2> origins9( originMainX+centerCylinderX,originMainY+centerCylinderY ); // Superior direito
103
104 // Origens dos quadrados de 3º Ordem - Inferior esquerdo
105 Vector<T,2> origins10( originMainX-centerCylinderX-centerCylinderX/3,originMainY-centerCylinderY-centerCylinderY );
106 Vector<T,2> origins11( originMainX-centerCylinderX-centerCylinderX/3,originMainY-centerCylinderY ); // C

```

Figura 5: Código do algoritmo implementado, mostrando a definição das origens de cada quadrado

a importação de um arquivo .jpg de cada uma das formas desejadas, ou a criação em um editor CAD de um arquivo .stl, que por sua vez seria incorporado ao OpenLB. Porém, essas opções foram descartadas, a primeira por sua dificuldade de edição da geometria, caso necessário, e a segunda pela necessidade de incorporação de um programa externo para o fluxo de trabalho.

Os valores das porosidades de cada uma das geometrias foi calculada, obtendo-se os valores abaixo:

- Para o Carpete de Sierpinski de 2º Ordem, $\phi = 0,790$
- Para o Carpete de Sierpinski de 3º Ordem, $\phi = 0,702$
- Para o Carpete de Sierpinski de 4º Ordem, $\phi = 0,624$

4.5 Testes realizados

De posse das geometrias, podemos testar a influência de diferentes números de Reynolds no escoamento, para verificar a estabilidade e acurácia do mo-

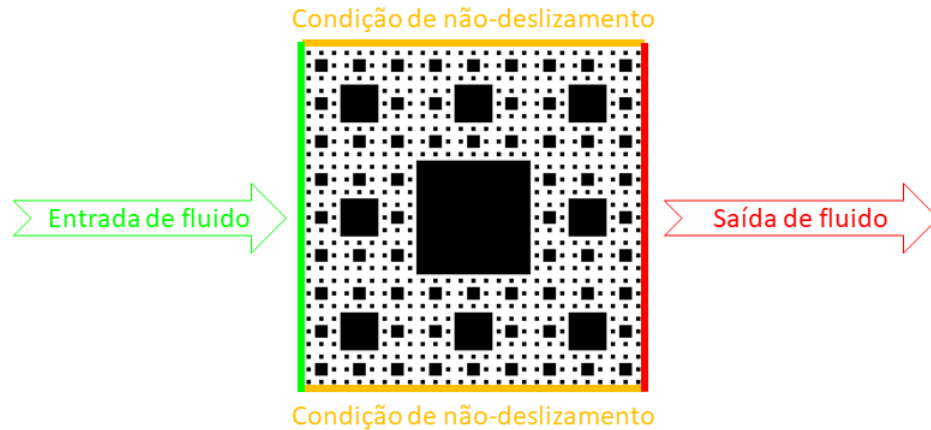


Figura 6: Condições de contorno para o problema exemplificadas sobre um Carpete de Sierpinski de 4º ordem.

delo, a formação de recirculações e de caminhos preferenciais, bem como a validade das equações de Darcy e Forchheimer para meios porosos.

Neste exemplo padrão do OpenLB, utilizamos o Operador BGK para os cálculos, onde o tempo de relaxação foi mantido constante e igual a $\tau = 0,56$. Nossas condições de contorno são exemplificadas na Figura 6, onde no lado esquerdo temos a entrada de fluido, no lado direito a saída de fluido, e nas paredes superiores bem como em todas as fronteiras dos obstáculos quadrados a condição de não-deslizamento. Em $t=0$, o toda a região em branco do volume de controle está inicialmente em repouso, com valor de $\rho = 1$, $u_{MAX}=0$ e $\Delta P = 0$.

Para sua inicialização, alguns parâmetros devem ser definidos, tais quais:

- A resolução do modelo (N)
- O número de Reynolds do escoamento (Re)
- O tempo máximo da simulação (s)
- O tamanho característico da malha (L)
- A dimensão X do volume de controle (x)
- A dimensão Y do volume de controle (y)

Para efeitos de comparação, mantivemos constantes e com os mesmos valores as dimensões X e Y do problema, de modo a formarmos um volume de controle quadrado (e obter uma visualização mais próxima do carpete de Sierpinski). Também permanece constante o tempo máximo da simulação, ajustado para 10 segundos. Sendo assim, a combinação das variáveis restantes utilizadas em cada teste é dada na Tabela 1:

Tabela 1: Combinação dos parâmetros relativos a cada simulação.

Testes	Reynolds (Re)	Resolução (N)	Dimensão característica (L)
1, 4 e 7	10	10	0,0100
2, 5 e 8	20	10	0,0100
3, 6 e 9	40	20	0,0050

A escolha dos parâmetros é de suma importância na simulação pois é sua escolha adequada que garante a acurácia e estabilidade de nossos resultados (KRÜGER, 2017). Dessa forma, conforme aumentamos o número de Reynolds, aumentamos também a resolução, de forma a melhor visualizar os resultados.

Foram realizadas 9 simulações, variando as geometrias e os números de Reynolds. Nas simulações 1, 2, e 3 simulamos o Carpete de Sierpinski de 2° Ordem. Nas simulações 4, 5 e 6, o de 3° Ordem. Por fim, nas simulações 7, 8 e 9 testamos a geometria de 4° Ordem.

As principais variáveis acompanhadas em nossos experimentos foram os MLUPs (Mega Lattice Updates per Second), a velocidade máxima, a energia média, a densidade média, a queda de pressão, o arraste e a elevação (sustentação).

Os MLUPs também são conhecidos como “performance” ou “velocidade” de uma simulação de Lattice Boltzmann. Eles medem o número de vezes que cada unidade de malha é atualizada por segundo. Seu cálculo é dado por:

$$MLUP_s = \frac{N_x \times N_y \times N_z \times N_{ts}}{10^6 \times T} \quad (55)$$

Onde os N_x , N_y e N_z representam o número de pontos de malha em cada uma das três direções, N_{ts} o número de passos de tempo e T representa o

tempo da simulação passado (TRAN et al., 2017).

As forças de arraste e de elevação (sustentação) são as componentes ortogonais da força aerodinâmica total. Elas são obtidas através da integral do tensor estresse, sendo então uma representação da ação da geometria (forma do objeto e sua orientação em relação a direção do escoamento) e da condição de não-deslizamento sobre a velocidade do fluido (HOLZER et al., 2009).

Findas as simulações, sumariza-se os resultados para tempo e MLUPs na Tabela 2.

Tabela 2: Tempos registrados em cada teste.

Teste	Ordem	Reynolds	Tempo total (s)	MLUPs
1	2°	10	202,168	3,580
2	2°	20	178,172	2,031
3	2°	40	302,751	9,417
4	3°	10	199,429	3,372
5	3°	20	178,831	1,880
6	3°	40	285,591	9,067
7	4°	10	207,564	3,167
8	4°	20	187,860	1,757
9	4°	40	303,863	8,023

Primeiramente, podemos perceber que, para as mesmas condições de teste, os MLUPs caem conforme aumenta-se a ordem do Carpete de Sierpinski. Isso ocorre devido a diminuição da porosidade, tornando a geometria mais complexa, o que justifica a queda de performance.

Comparando agora os grupos de Reynolds dentro de uma mesma geometria, percebemos que ambos os tempos medidos bem como os MLUPs aumentam quando desviamos do valor original do código ($Re = 20$), aumentando em até 382,3% para as MLUPs (Teste 6) e 70% para o tempo total (Teste 3). Podemos perceber que, para este modelo, a influência do número de Reynolds provoca variações muito mais expressivas nos tempos e na performance que a variação da geometria (diminuição da porosidade). Além disso, para $Re = 40$, aumentamos a resolução da malha, aumentando também o número de operações a serem realizadas.

Por fim, é necessário tecer um comentário sobre o ajuste dos parâmetros. Alguns testes não foram possíveis de serem simulados dadas as limitações do exemplo do OpenLB alteradas para as geometrias de Sierpinski. Simulações com $Re = 60$ foram obtidas apenas para os carpetes de 2° e 3° Ordens, demandando uma escolha de resolução e tamanho característico da malha que aumentaram consideravelmente o esforço computacional. Já para o carpete de 4° Ordem, não foi possível achar uma combinação de parâmetros que resultasse em uma simulação acurada: Todos os testes realizados divergiram, testando pares para N e L até dez vezes acima e abaixo de seus valores originais. Todas essas simulações repetiram o mesmo padrão, com um grande aumento nos valores de Sustentação, seguidos então de um aumento no Arraste e na Pressão até o infinito, retornando “nan” para a matriz de resultados. Ao testar Reynolds mais elevados para os modelos de 2° e 3° Ordens, só foi possível obter resultados significativos até $Re = 100$, sendo que acima desse valor todas as simulações divergiam, mesmo com variações em N e L, além de tempos computacionais muito altos em relação aos verificados inicialmente. Por fim, para $Re > 2000$, o código não era ao menos inicializado, reportando uma mensagem de erro de valor não permitido para Reynolds. Isso se deve ao fato do exemplo em questão ter sido proposto apenas para escoamentos laminares.

5 Resultados e discussão

Agora, observamos mais a fundo o comportamento das variáveis acompanhadas ao longo do tempo em cada um dos testes.

Ao compararmos as curvas de pressão (Figura 7), vemos que claramente as pressões aumentam significativamente com a diminuição da porosidade. Nos carpetes de Sierpinski de 4° Ordem, com geometria mais complexa, para todos os números de Reynolds testados, as pressões registradas foram muito mais elevadas do que os modelos de geometria mais simples simulados às mesmas condições. Observamos também que, conforme aumentamos o número de Reynolds, diminuimos a pressão máxima atingida pelo modelo para um mesmo tempo físico de simulação ($t = 10$, definido nas primeiras linhas de código). Por fim, temos que as pressões dos modelos de 2° Ordem apresentam um comportamento oscilatório nos 3 casos, em comparação com curvas de pressão muito mais “comportadas” nos casos dos outros Re simulados.

Focando então apenas nos modelos de segunda ordem, podemos ver que por volta dos tempos $t = 3,5$ e $t = 8,5$, para $Re = 20$ e $Re = 40$, e dos tempos $t = 2,0; 5,5; 7,5; 10,0$, para $Re = 10$, temos os picos de oscilação dessas funções.

Esse aumento também é verificado nas curvas de arraste e sustentação, que variam conjuntamente. Escolhemos aqui mostrar os resultados com $Re = 10$ para melhor visualização (Figura 8). Podemos perceber aqui como as variações na sustentação ocorrem brevemente antes das alterações nas outras curvas. Nesta simulação, aumentamos o tempo computacional de $t = 10$ para $t = 40$ de forma a verificar se as oscilações observadas anteriormente continuariam indefinidamente, se divergiriam ou convergiriam. Foi possível observar que todos os valores convergem, não apresentando mais variações bruscas a partir de $t = 25$.

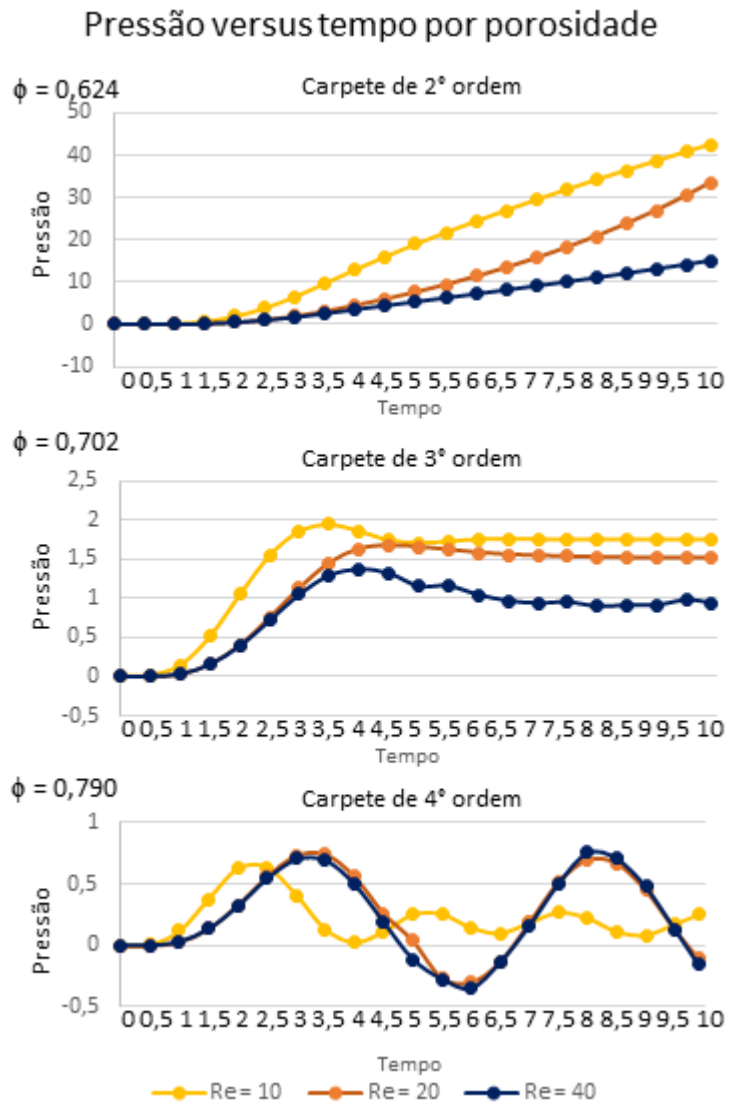


Figura 7: Curvas de pressão (em unidades de malha) versus tempo de simulação (em segundos) reportadas pelo código. São mostradas as variações em relação ao número de Reynolds e a porosidade.

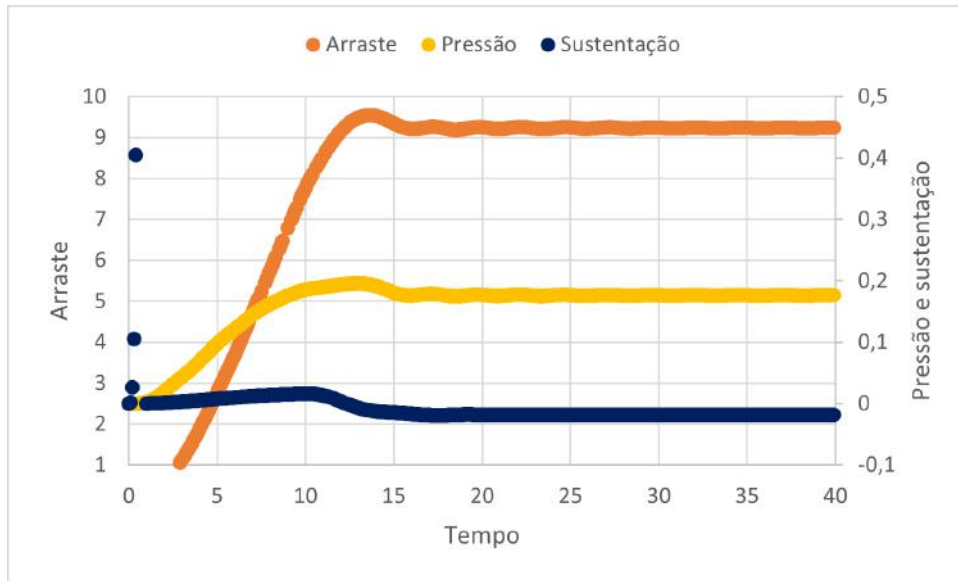


Figura 8: Curvas de pressão, sustentação e arraste para o Carpete de Sierpinski de 2º Ordem com Reynolds = 10.

Podemos olhar para os perfis de velocidade na Figura 9. Ao olhar atentamente para as plotagens das simulações nos tempos de pico das oscilações, nota-se a formação de pequenas recirculações (denotados por setas em vermelho) ao longo da extensão do volume de controle.

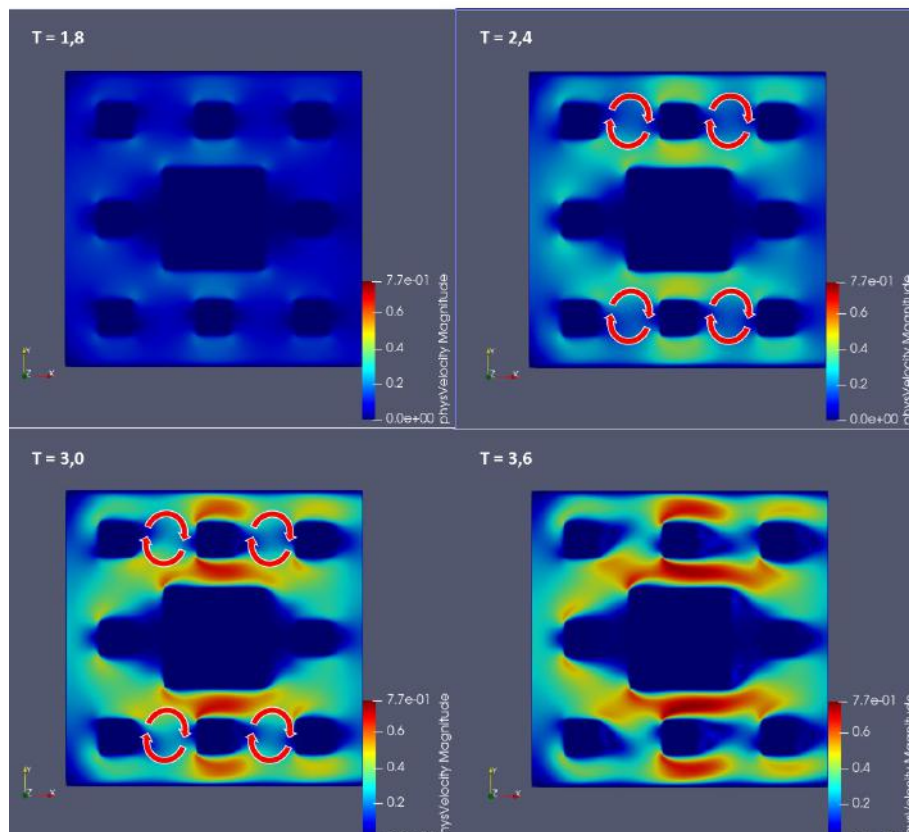


Figura 9: Formação de recirculações no Carpete de Sierpinski de 2º Ordem com Reynolds = 10

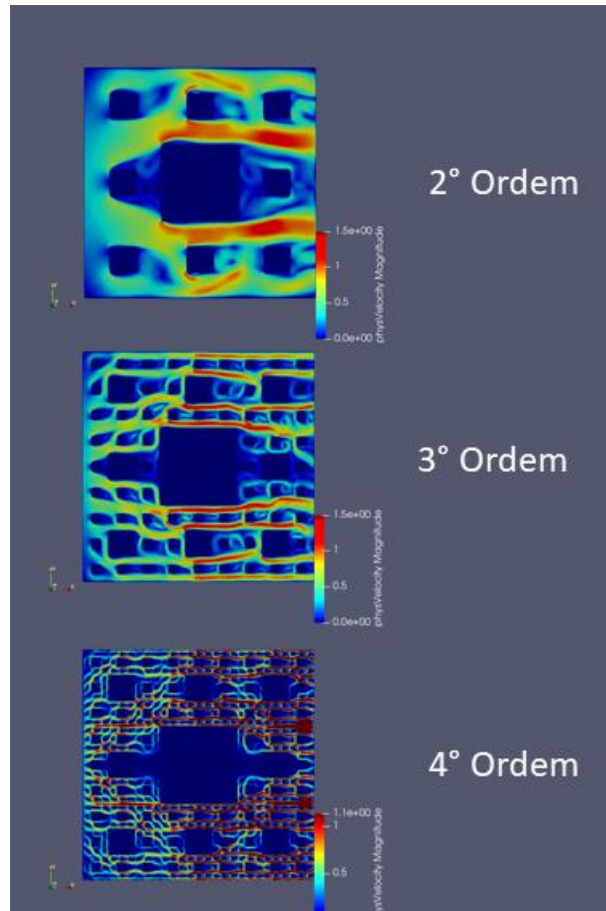


Figura 10: Comparativo entre as velocidades, a formação de recirculações e de caminhos preferenciais nos carpetes de Sierpinski de 2°, 3° e 4° Ordens para $Re = 20$

Para verificar a influência da formação dos caminhos preferenciais na velocidade do escoamento, comparamos as simulações com o mesmo número de Reynolds ($Re = 20$) e diferentes porosidades. Agrupamos os resultados na Figura 10, onde temos as velocidades de escoamento no tempo $t = 9,9$, denotando o padrão de recirculação mais evidente conforme aumentamos a porosidade. Em nosso Sierpinski de 4° ordem, quase não vemos a formação de recirculações, porém observamos os caminhos preferenciais bem demarcados.

Agora, fazemos uma análise da validade das leis de Darcy e Forchheimer para o Carpete de Sierpinski de 4° Ordem, por ser o meio mais complexo, com $Re = 20$, por ser o valor padrão do modelo.

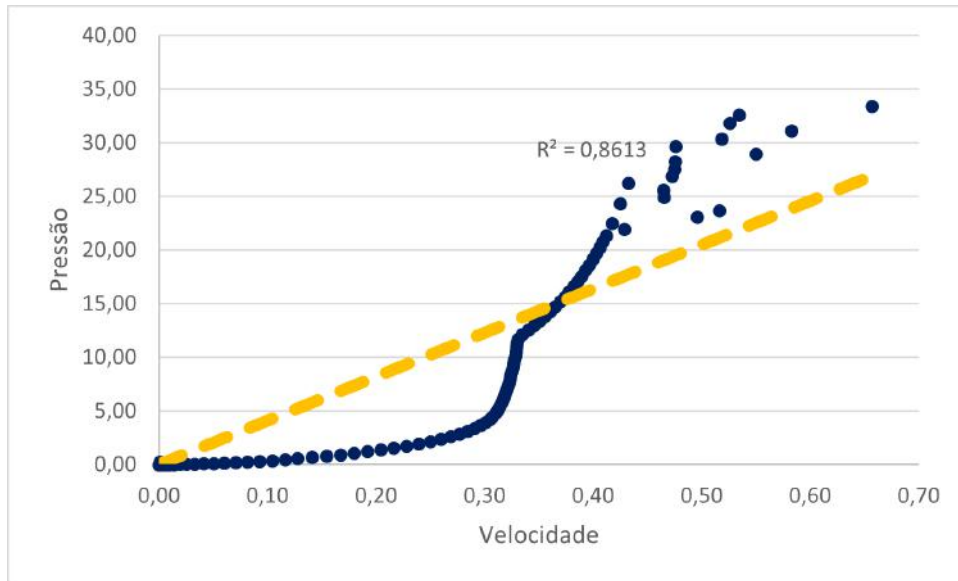


Figura 11: Recuperação da Lei de Darcy, que estabelece uma relação linear entre a queda de pressão versus velocidade máxima do fluido

Primeiramente, como a Lei de Darcy estabelece uma relação direta entre a queda de pressão e a velocidade, plotamos esses valores no gráfico da Figura 11:

Podemos perceber que conseguimos uma relação próxima da estabelecida por Darcy ($R^2 = 0,8613$), apesar de termos um aumento acentuado da velocidade máxima no começo em relação a pressão, que começa a subir mais devagar no início da simulação. Conforme a simulação avança e os resultados se estabilizam, vemos que a curva se aproxima do comportamento linear esperado. Ao excluirmos os pontos iniciais e focarmos a análise a partir da estabilização do modelo, obtemos um $R^2 = 0,929$ (Figura 12), comprovando a validade do modelo de Darcy.

Testamos agora a validade da equação de Forchheimer, que agora possui uma contribuição da velocidade ao quadrado, além de levar em consideração fatores como a variação da densidade do fluido. Calculamos os valores de $1/K_{app}$, e os plotamos versus a velocidade máxima vezes a densidade média na figura 13, obtendo um valor de $R^2 = 0,8997$. Neste caso, como ponderamos os valores de velocidade com os valores de densidade, temos uma curva

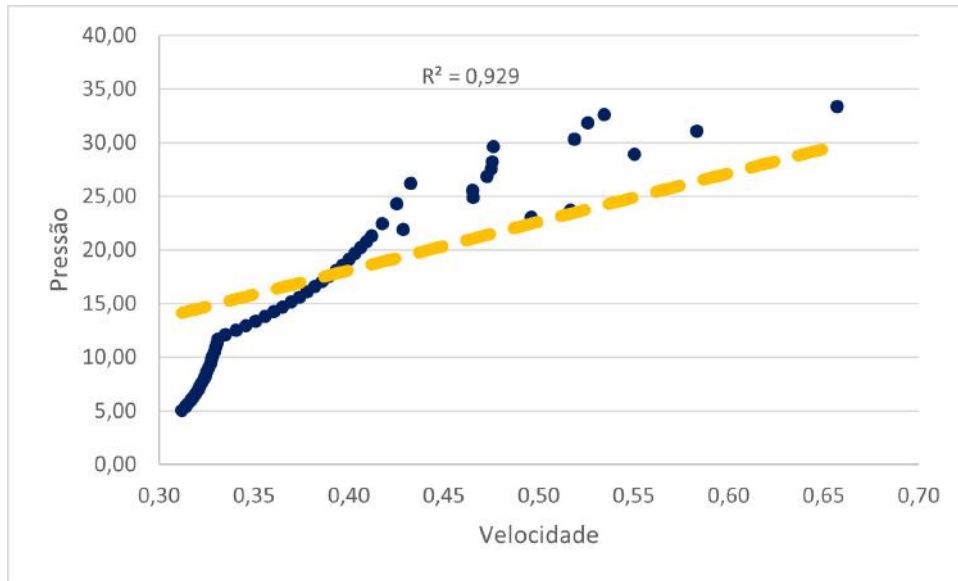


Figura 12: Queda de pressão versus velocidade máxima do fluido

mais suave em relação às encontradas anteriormente. Por fim, ao excluirmos apenas 5 pontos considerados outliers obtemos um $R^2 = 0,9407$, denotando um ótimo ajuste da curva experimental à equação proposta.

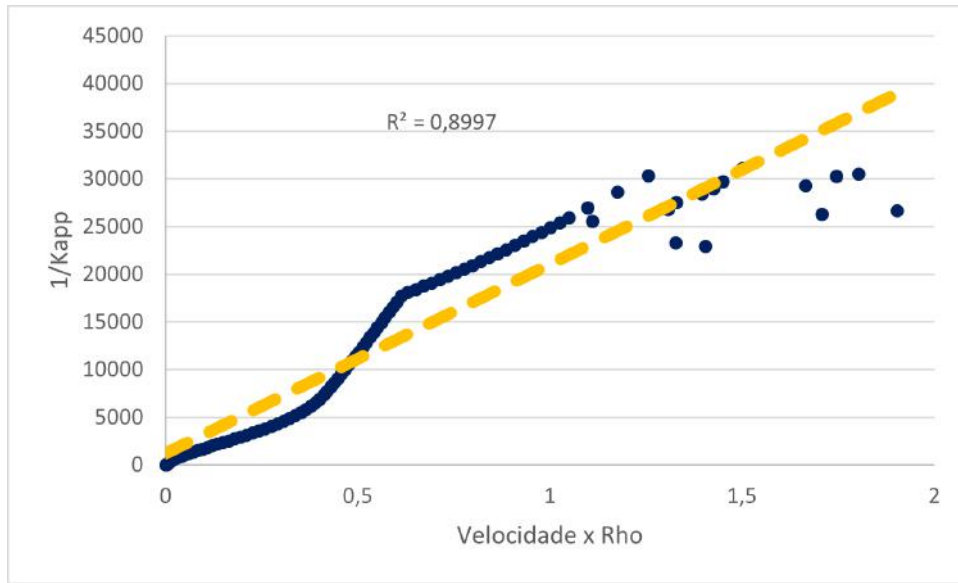


Figura 13: Lei de Forchheimer, $1/K_{app}$ versus a velocidade máxima vezes a densidade média

6 Conclusão

Neste trabalho colocou-se a prova a utilização do método de Lattice Boltzmann para a simulação de escoamentos em meios porosos. Para tal, partimos de uma revisão da mecânica dos fluidos clássica estudada em cursos de graduação através de livros como PRITCHARD (2011), WELTY et al. (2008) e BIRD et al. (2002), modelando escoamentos macroscópicos utilizando as equações de Navier-Stokes, para então estudarmos a teoria de meios porosos proposta por Darcy e finalizada por outros autores como Forchheimer. Após esta etapa, pudemos entender melhor as diferenças entre o escoamento macroscópico e o escoamento mesoscópico, advindo da Teoria Cinética dos Gases, que por sua vez é a base teórica do método de Lattice-Boltzmann. Nos baseamos no recente livro publicado por KRÜGER (2017), bem como no trabalho de diversos autores para tecer nosso raciocínio matemático e computacional.

Pudemos então utilizar a biblioteca “OpenLB”, em C++, para a realização de experimentos de escoamentos em meios porosos sob diferentes geometrias (e conseqüentemente porosidades) e números de Reynolds. As

geometrias utilizadas são advindas da Teoria Fractal, e foram Carpetes de Sierpinski de 2°, 3° e 4° ordens, de acordo com a metodologia proposta por LIU et al. (2020), validando seu uso como uma possível alternativa para a simulação de meios porosos computacionais. As alterações foram feitas diretamente no código fonte do exemplo laminar “Cylinder2d” disponível no pacote 1.4 do OpenLB, sendo que o trabalho na geometria foi feito pela inserção de “IndicatorsCuboid2D”, função intrínseca do software, e as variações do número de Reynolds foram feitas na definição de parâmetros da simulação, necessitando de uma escolha adequada da resolução e tamanho característico da malha para funcionarem.

Nossos principais resultados foram que a demanda computacional, medida através dos MLUPs, é afetada pela alteração das configurações iniciais do modelo, se afastando para mais ou para menos dos valores “de fábrica” do OpenLB. Foi possível perceber que o aumento da complexidade da geometria gera um impacto na performance dos cálculos, porém esse impacto é muito menor se comparado ao efeito causado pela variação do número de Reynolds ou da resolução da malha, que aumenta o número de pontos a serem calculados.

Verificou-se também que a diminuição da porosidade, através da substituição da geometria (ou aumento da ordem do tapete), levou a aumentos expressivos na pressão ao longo do tempo, bem como reduziu a formação de recirculações pela formação de caminhos preferenciais mais bem definidos. Também foi possível constatar um aumento da força de sustentação, que por sua vez aumentou o arraste e a pressão. Isso é decorrência direta da atuação das forças viscosas sobre o fluido, visto que nos tapetes de ordem superior temos uma maior superfície de contato do fluido com as paredes.

Testamos também a validade da Lei de Darcy para a simulação de escoamentos em meios porosos no Tapete de Sierpinski de 4° Ordem com $Re = 20$, obtendo um $R^2 = 0,7912$ para os dados puros e $R^2 = 0,8944$ selecionando apenas os valores já estabilizados. Esses valores mostram que a Lei de Darcy não se adequou completamente ao modelo proposto devido a suas restrições como a incompressibilidade, o que não é verificado em nosso modelo visto que a densidade aumenta ao longo do escoamento. Por estes

resultados, testamos também a Equação de Forchheimer por essa possuir menos restrições para o uso e também levar em conta o efeito da compressibilidade, dado que a densidade média aumenta continuamente ao longo do teste. Conseguimos garantir um ajuste de $R^2 = 0,8997$ para os dados puros, e $R^2 = 0,9407$ excluindo apenas 5 pontos outliers, mostrando que essa equação modelou de modo muito mais efetivo nosso escoamento.

Dessa forma, conclui-se que o OpenLB é um simulador eficaz, acurado e de fácil implementação para simulações de Lattice Boltzmann. Dentro de sua vasta biblioteca de exemplos, é possível trabalharmos diversos problemas recorrentes dos LBMs, como transferência de calor, equilíbrio de fases, meios porosos e geometrias complexas, assim como adaptá-los para novos problemas ainda não estudados, dado a gama de operadores colisão disponíveis em seu código fonte e a seu constante aprimoramento e atualização. É necessário, porém, pontuar que sua estabilidade e acurácia estudados neste texto só foram verificados para um exemplo laminar a baixos números de Reynolds. Para uma aplicação mais ampla de suas possibilidades, novos estudos devem ser conduzidos no sentido de aumentar a faixa de Re na qual é possível garantir uma simulação correta.

Além disso, pode-se mostrar que a utilização de fractais como modelos para meios porosos é efetiva em simular a variação de propriedades físicas em função da porosidade, que é consequência direta da geometria, mesmo não tendo seguido a risca a metodologia proposta por LIU et al. (2020), que se utiliza também da Equação de Weierstrass-Mandelbrot para melhor simular a rugosidade das paredes. Essa alteração, se feita, provavelmente nos proporcionaria uma influência ainda maior das forças viscosas com o aumento da superfície de contato devido as dimensões fractais.

Com o rápido aumento da capacidade computacional ao longo das últimas décadas, o advento da computação científica nunca esteve tão em voga, mostrando que o método de Lattice-Boltzmann não só é uma alternativa viável como também necessária para se lidar com problemas de Engenharia Química que por muito tempo não tiveram uma modelagem computacional adequada, acurada e eficaz. O método, combinado com o advento da teoria fractal, nos possibilita refinar e aprimorar o que se conhece atualmente da modelagem de

meios porosos, para que no futuro consigamos ter resultados cada vez mais precisos e que resolvamos problemas cada vez mais complexos.

Referências

- AGARWAL, A. et al. A comparative study of three-dimensional discrete velocity set in lbm for turbulent flow over bluff body. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, v. 43, n. 39, 2021.
- AL-RAOUSH, R. et al. Comparison of network generation techniques for unconsolidated porous media. *Soil Science Society of America Journal*, v. 67, n. 6, 2003.
- BERRE, I. Flow in fractured porous media: A review of conceptual models and discretization approaches. *Transport in porous media*, v. 130, n. 215-236, 2019.
- BIRD, B. et al. *Transport phenomena*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 2ed, 2002.
- BOEK, E.; VENTURIOLI, M. Lattice boltzmann studies of fluid flow in porous media with realistic rock geometries. *Computers and Mathematics with applications*, v. 59, n. 4, 2010.
- BOER, R. Theory of porous media - past and present. *Math, Mech*, v. 78, n. 7, 1998.
- BORUJENI, A. A deep learning approach to predicting permeability of porous media. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 208, n. 1, 2022.
- BRUSH, S. G. The development of the kinetic theory of gases iv. maxwell. *Annals of Science*, v. 14, n. 6, 2006.
- CMI. *Clay Math Institute, Navier-Stokes Equation*. 2022. Acesso em 21/02/2022. Disponível em: <https://www.claymath.org/millennium-problems/navier%E2%80%93stokes-equation>.
- COON, E. et al. Taxila lbm: a parallel, modular lattice boltzmann framework for simulating pore-scale flow in porous media. *Computers and Geosciences*, v. 18, n. 17-27, 2014.
- HEUVELINE, V. Towards a hybrid parallelization of lattice boltzmann methods. *Computers Mathematics with Applications*, v. 58, n. 1071-1080, 2009.

- HOLZER, A. et al. Lattice boltzmann simulations to determine drag, lift and torque acting on non-spherical particles. *Computers and Fluids*, v. 38, n. 3, 2009.
- IRMAY, S. On the theoretical derivation of darcy and forchheimer formulas. *Transactions, American Geophysical Union*, v. 39, n. 4, 1958.
- JEONG, W. Comparison of effects on technical variances of computational fluid dynamics (cfd) software based on finite element and finite volume methods. *International Journal of Mechanical Sciences*, v. 78, n. 19-26, 2014.
- KANG, Q. Lattice boltzmann method for reacting flows in porous media. *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, v. 2, n. 5, 2010.
- KATOPODES, N. *Free-Surface Flow: Computational Methods*. [S.l.]: Butterworth-Heinemann, 1ed, 2018.
- KRAUSE, M. et al. Openlb - open source lattice boltzmann code. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 81, n. 258-288, 2021.
- KRÜGER, T. *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. [S.l.]: Springer, 2017.
- LACHOWICZ, M. Microscopic, mesoscopic and macroscopic descriptions of complex systems. *Probabilistic Engineering Mechanics*, v. 26, n. 54-60, 2011.
- LATT, J. et al. Palabos: Parallel lattice boltzmann solver. *Computers Mathematics with Applications*, v. 81, n. 334-350, 2021.
- LI, K. More general capillary pressure and relative permeability models from fractal geometry. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 111, n. 1, 2010.
- LIU, Y. et al. Influence of fractal surface roughness on multiphase flow behavior: Lattice boltzmann simulation. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 134, n. 10, 2020.
- LOURENÇO, R. *Lattice Boltzmann Method Applied to Multiphase Flows and Preferential Paths in Porous Media*. 2021.
- MANDELBROT, B. Fractal geometry: what is it, and what does it do? *The Royal Society Publishing*, v. 423, n. 5, 1989.

- MCCRACKEN, M. E. Multiple-relaxation-time lattice-boltzmann model for multiphase flow. *Physical Review*, v. 71, n. 3, 2005.
- NOLTE, D. *Galileo Unbound: A Path Across Life, the Universe and Everything*. [S.l.]: OUP Oxford, 2018.
- PERUMAL, A. A review on the development of lattice boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer. *Alexandria Engineering Journal*, v. 54, n. 4, 2015.
- PICKOVER, C. *The Pattern Book: Fractals, Art and Nature*. [S.l.]: World Scientific, 1995.
- PRITCHARD, P. *Introduction to Fluid Mechanics*. [S.l.]: John Wiley Sons, 2011.
- REICHARDT, J. The interplay between microscopic and mesoscopic structures in complex networks. *PLOS ONE*, v. 6, n. 8, 2011.
- SHARMA, K.; TAVARES, F.; STRAKA, R. Lattice boltzmann method for industrial applications. *Industrial Engineering Chemistry Research*, v. 58, n. 36, 2019.
- STERLING, J. D. Stability analysis of lattice boltzmann methods. *Journal of Computational Physics*, v. 123, n. 1, 1996.
- TRAN, N. et al. Performance optimization of 3d lattice boltzmann flow solver on a gpu. *Scientific Programming*, v. 2017, n. 16 pages, 2017.
- WELLEIN, G. Towards optimal performance for lattice-boltzmann applications on terascale computers. *Parallel Computational Fluid Dynamics*, v. 2006, n. 31-40, 2006.
- WELTY, J. et al. *Fundamentals of Momentum, Heat, and Mass Transfer*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 5ed, 2008.
- WU, Z. et al. A fractal model for quantitative evaluating the effects of spontaneous imbibition and displacement on the recovery of tight reservoirs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 198, n. 3, 2021.
- XING, J. A short review on lattice boltzmann method: comprehensive historic resources and theoretical problems to be addressed. *Chinese Quarterly of Mechanics*, v. 42, n. 3, 2021.

- XIONG, Q. et al. Review of pore network modelling of porous media: Experimental characterisations, network constructions and applications to reactive transport. *Journal of contaminant hydrology*, v. 192, n. 9, 2016.
- XU, P. A discussion on fractal models for transport physics of porous media. *Fractals*, v. 23, n. 3, 2015.
- YA-LING, H. Lattice boltzmann methods for single-phase and solid-liquid phase-change heat transfer in porous media: A review. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 129, n. 2, 2019.
- YAN, G. Transient two-phase flow in porous media: A literature review and engineering application in geotechnics. *Geotechnics*, v. 2, n. 1, 2022.
- YANG, J.; BOEK, E. et al. A comparison study of multi-component lattice boltzmann models for flow in porous media applications. *Computers Mathematics with Applications*, v. 65, n. 6, 2013.
- YONG, S. Experimental study on pore structure evolution of coal in macroscopic, mesoscopic, and microscopic scales during liquid nitrogen cyclic cold-shock fracturing. *FUEL*, v. 291, n. 120-150, 2021.
- YU, B. Analysis of flow in fractal porous media. *Applied Mechanics Review*, v. 61, n. 5, 2008.
- ZAWAWI, M. *A review: Fundamentals of computational fluid dynamics (CFD)*. [S.l.]: AIP Conference Proceedings 2030, 2018.
- ZHU, Y. Modeling the spontaneous imbibition of non-newtonian fluids into the fractal porous media of tight reservoirs. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 209, n. 2, 2022.
- ZUBELDIA, E. et al. Cellular automata and x-ray microcomputed tomography images for generating artificial porous media. *International Journal of Geomechanics*, v. 16, n. 2, 2016.