



**SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIOS
POROSOS UTILIZANDO O MÉTODO LATTICE-
BOLTZMANN**

Rafael Pereira do Carmo

Projeto de Final de Curso

Orientador:

Prof.^a Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Dezembro de 2013

SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS UTILIZANDO O MÉTODO LATTICE-BOLTZMANN

Rafael Pereira do Carmo

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Químico Industrial.

Aprovado por:

Prof. Frederico Wanderley Tavares, D.Sc.

Prof. Wladimir Augusto das Neves, D.Sc.

Cauê Torres de Oliveira Guedes Costa, M.Sc.

Orientado por:

Prof.^a Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Rio de Janeiro, RJ – Brasil

Dezembro de 2013

DO CARMO, Rafael Pereira.

Simulação do escoamento em meios porosos utilizando o método lattice-Boltzmann. Rafael Pereira do Carmo.

Rio de Janeiro: UFRJ / EQ, 2013.

ix, 98p; il.

(Projeto Final)- Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de química, 2013.

Orientador: Professora Heloísa Lajas Sanches.

1. lattice-Boltzmann. 2. Meio poroso. 3. Simulação. 4. Projeto Final (Graduação – UFRJ/EQ).

5. Professora Heloísa Lajas Sanches. I. Título.

AGRADECIMENTOS

À professora Heloísa, por ter confiado na minha capacidade e pelo incentivo, preocupação e paciência nos momentos mais difíceis relacionados tanto ao projeto final quanto a problemas pessoais. Sem dúvida, é não só um dos melhores professores que tive na vida, como uma das melhores pessoas que já conheci.

Aos meus pais e minha irmã, por terem me dado todo o apoio necessário nessa jornada de cinco anos pela qual passei, sempre se preocupando comigo, sendo compreensivos nos momentos de estresse e me incentivando a seguir meus sonhos. Pode não ser a família perfeita, mas é a que tenho, é a que amo.

À minha tia Fátima, que se preocupou comigo como uma mãe, me incentivou e me ajudou a saltar obstáculos encontrados na graduação. Sem ela, provavelmente não teria o currículo que tenho hoje.

A todos os meus amigos: Os que conheço há mais de dez anos, que conheci no ensino fundamental, no Martins, no ensino médio, no PH, e os que conheci na faculdade. Eles foram minha principal válvula de escape ao longo da graduação e, provavelmente, continuarão sendo após ela. Todos eles são amizades verdadeiras, as quais tenho certeza que continuarão me acompanhando pelo resto de minha vida.

Resumo do Projeto de Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Químico Industrial.

SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS UTILIZANDO O MÉTODO LATTICE-BOLTZMANN

Rafael Pereira do Carmo

Dezembro, 2013

Orientador: Prof.^a Heloísa Lajas Sanches, D.Sc.

Com a crescente demanda por petróleo, cada vez mais se mostra necessário otimizar o seu processo de extração. Um dos métodos de recuperação secundária mais utilizados consiste em injetar água no reservatório, de forma a pressurizá-lo, extraíndo o óleo. Este método, porém, envolve uma gama de variáveis, como a interface entre a água e o óleo e a complexa geometria das rochas porosas, as quais os métodos convencionais de CFD vêm encontrando dificuldades para simular.

Um método recente, baseado na discretização da equação de Boltzmann, vem mostrando-se capaz de superar tais dificuldades sem exigir horas gastas com programação de códigos ou desenvolvimento de malhas. O método Lattice-Boltzmann, como é conhecido, inova no ramo da fluidodinâmica computacional e, com isso, vem ganhando crescente interesse por parte dos pesquisadores ao redor do mundo.

Neste trabalho, foram explicados os conceitos básicos por trás do método, introduzidos os códigos necessários para simular desde casos mais simples até o escoamento multifásico em meios porosos e analisados seus limites de precisão e estabilidade. O método provou ser capaz de reproduzir situações de escoamento multifásico em meios porosos e mostra a formação de instabilidades interfaciais que podem comprometer a recuperação de óleo em reservatórios. Entretanto, é necessário melhorar algumas questões de estabilidade do método para que ele possa reproduzir resultados em condições mais próximas das de alguns reservatórios, como nos casos em que a razão entre viscosidades do óleo e da água é mais alta.

ÍNDICE

I – Introdução	1
II – Revisão Bibliográfica	4
II.1 – Conceitos Relacionados ao Escoamento em Meios Porosos.....	4
II.1.1 – Princípios de Conservação de Massa e Momento Linear.....	4
II.1.2 – Lei de Darcy.....	8
II.1.3 – Tensão Superficial.....	9
II.1.4 – Equação de Estado.....	12
III – O Método Lattice-Boltzmann	15
III.1 – Autômatos Celulares.....	15
III.2 – Autômatos Celulares do tipo Lattice-Gas.....	16
III.3 – A Equação de Boltzmann.....	20
III.4 – Princípios de Conservação.....	22
III.5 – Equação de Lattice-Boltzmann.....	24
IV – Algoritmo e Características do Método Lattice-Boltzmann Utilizado	29
IV.1 – Modelo Monofásico.....	29
IV.2 – Condição de Contorno.....	34
IV.3 – Conversão de Unidades.....	40
IV.4 – Modelo Multifásico Monocomponente.....	45
IV.4.1 – Forças de Atração.....	45
IV.4.2 – As Equações de Estado e o Método Lattice-Boltzmann.....	47
IV.4.3 – Interação Fluido-Sólido.....	49
IV.5 – Modelo Multifásico Multicomponente.....	51
V – Resultados	55
V.1 – Escoamento de Poiseuille.....	55
V.2 – Escoamento Cruzado ao Redor de um Cilindro.....	60
V.3 – Equilíbrio Líquido-Vapor.....	62
V.4 – Gotejamento.....	66
V.5 – Escoamento em Meio Poroso.....	71
VI – Conclusão	78
VII – Referências Bibliográficas	79
VIII – Apêndice A	83
IX – Apêndice B	88
X – Apêndice C	91

NOMENCLATURA

LETRAS LATINAS

Símbolo	Descrição
V	Volume
VC	Volume de Controle
SC	Superfície de Controle
t	Tempo
u	Velocidade
A	Área
P	Pressão
k	Permeabilidade
l	Comprimento
q	Velocidade Superficial
L	Comprimento
r	Raio de Curvatura
T	Temperatura
R	Constante Universal dos Gases
δx	Parâmetro Espacial
δt	Parâmetro Temporal
e	Velocidade Microscópica
G	Força de Interação
F	Força Externa
f	Função de Distribuição
n	Variável Booleana
c	Velocidade da Partícula
x	Posição
s	Sólido

m	Massa
p	Momento Linear
lu	Unidade de Lattice (<i>Lattice unit</i>)
ts	Passo de Tempo (<i>Timestep</i>)
mu	Unidade de Massa (<i>Mass unit</i>)

LETRAS GREGAS

Símbolo	Descrição
ρ	Densidade
$\tilde{\tau}$	Tensor Tensão
τ	Tempo de Relaxação
γ	Tensão Superficial
μ	Viscosidade Dinâmica
ξ	Velocidade Microscópica
ϵ	Número de Knudsen
Ω	Operador Colisão
ψ	Potencial de Interação
ν	Viscosidade Cinemática
θ	Ângulo de Contato
Φ	Força Externa por Unidade de Volume

SOBRESCRITO

Símbolo	Descrição
eq	Equilíbrio
σ	Componente

SUBSCRITOS

Símbolo	Descrição
s	Superfície
m	Molar
i	Direção
a	Direção
x	Eixo x
y	Eixo y
0	Característico
ads	Adesão
ext	Externa
ref	De Referência
eq	Equilíbrio
d	Adimensional
crit	Crítico
lb	Escala Virtual
vap	Vapor
líq	Líquido
σ	Componente

GRUPOS ADIMENSIONAIS

Símbolo	Descrição
$Re = \rho u l_0 / \mu$	Número de Reynolds
$Ca = u_0 v / \gamma$	Número Capilar
$Ma = u / u_{som}$	Número de Mach

I. Introdução

É comum encontrar materiais sólidos que apresentam fraturas ou poros ao longo de sua estrutura, ou ainda, encontrar sólidos em forma granular. Os *meios porosos* são materiais que consistem de uma matriz sólida com vazios interconectados. O escoamento de fluidos através de meios porosos é um tema que recebe especial atenção das indústrias química (nas quais *meios porosos artificiais* são encontrados em diversos equipamentos como filtros e colunas de destilação) e de petróleo (os reservatórios de petróleo são exemplos de *meios porosos geológicos*) (NIELD e BEJAN, 2006). A capacidade de produção de petróleo em um reservatório está diretamente ligada às características de seu escoamento através deste.

O petróleo e seus derivados constituem a principal fonte energética mundial (ANEEL, 2008), sendo de extrema importância para a movimentação da economia mundial. Sua exploração pode ser dividida em três etapas: na primeira, assim que o poço é perfurado, as elevadas pressões existentes no reservatório fazem o petróleo escoar em direção ao poço, onde a pressão é menor. Este processo é conhecido como *recuperação primária*. Com o passar do tempo e a redução da quantidade de óleo no reservatório, sua pressão diminui, o que reflete diretamente na quantidade de petróleo extraído utilizando-se a metodologia de recuperação primária. A fim de contornar este problema, é realizada a *recuperação secundária* do petróleo, em que o fluido no reservatório é deslocado através da injeção de água ou outro fluido, caracterizando o processo conhecido como *alagamento* ou *waterflooding*. Neste processo, a água injetada permeia pelos vazios do reservatório, visando a arrastar o óleo para fora destes, em direção ao poço. A terceira etapa, conhecida como recuperação terciária, ou recuperação avançada, almeja facilitar a extração do petróleo. Alguns exemplos de processos realizados nesta etapa são a redução da viscosidade do óleo através do chamado TEOR (Thermal Enhanced Oil Recovery) e a redução da tensão interfacial entre a água e o óleo através do MEOR (Microbial Enhanced Oil Recovery) (WILLHITE, 1986).

A eficiência do processo de alagamento depende de uma série de variáveis, dentre elas a diferença de viscosidade entre a água injetada e o óleo presente no reservatório, a origem mineral da rocha constituinte do reservatório, a pressão com que a água é injetada e

a porosidade da rocha. Tendo em vista a complexidade envolvida no processo de recuperação secundária, muitas pesquisas vêm sendo realizadas a fim de reproduzir computacionalmente as condições de reservatório durante a recuperação do óleo, propiciando uma análise mais minuciosa da situação e, conseqüentemente, possibilitando maior eficiência na extração do óleo.

Apesar dos esforços, os métodos de CFD convencionais, baseados na discretização de equações diferenciais que representam os princípios de conservação, como as equações de Navier-Stokes, possuem alguns empecilhos com relação à simulação de recuperação de óleo. Um deles reside na criação da geometria. O desenho de uma malha que consiga reproduzir o meio poroso presente nos reservatórios exige uma quantidade de tempo muito grande para ser criado (XFLOW, 2013). Outro empecilho diz respeito à complicada modelagem da movimentação da interface entre a água e o óleo, bem como a influência do ângulo de contato no processo (KANG et al., 2003).

As dificuldades envolvendo os métodos tradicionais de CFD abriram espaço para o crescimento de uma metodologia relativamente recente com potencial para solucionar os desafios da simulação de ambientes de reservatório. O método *Lattice-Boltzmann* difere dos anteriores por ser oriundo da discretização de uma equação microscópica de balanço: a *equação de Boltzmann*. O método se baseia na movimentação de partículas de fluido em nível mesoscópico, ou seja, em escalas de tempo e comprimento entre as dos níveis microscópico e macroscópico (contínuo). O crescente número de pesquisas envolvendo o método deve-se às vantagens que apresenta, como:

- Simples implementação do código;
- Fácil aplicação das condições de contorno;
- Elevado poder de paralelismo computacional;
- Fácil criação da malha, mesmo para geometrias complexas;
- Menor dificuldade na modelagem de interfaces móveis.

Tendo em vista a carência de um método capaz de simular eficientemente os ambientes de recuperação de petróleo por parte das indústrias petrolíferas e as diversas vantagens oferecidas pela metodologia Lattice-Boltzmann, o presente trabalho terá como objetivos apresentar e implementar em uma rotina computacional o método Lattice-Boltzmann, estudar a sua funcionalidade, seus limites de precisão e estabilidade e simular processos de recuperação secundária de óleo através do alagamento com água.

II. Revisão Bibliográfica

II.1. Conceitos Relacionados ao Escoamento em Meios Porosos

II.1.1. Princípios de Conservação de Massa e de Momento Linear

Em todo sistema real, haverá a conservação de algumas propriedades como a massa, a energia ou a quantidade de movimento, por exemplo. Em outras palavras, a partir de um volume de controle que delimita um sistema real, é possível escrever equações de balanço destas propriedades. Para que o potencial do método *Lattice-Boltzmann* em simular sistemas reais seja mais bem compreendido posteriormente, duas leis de conservação em especial deverão ser mencionadas: a conservação de massa e a conservação de quantidade de movimento (ou momento linear).

Suponha um volume de controle (VC) com formato aleatório, que delimita o sistema através de sua superfície de controle (SC). A variação ou acúmulo de massa no volume de controle com o tempo pode representada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho dV, \quad (1)$$

em que o produto ρdV corresponde a um fragmento infinitesimal de massa (dm). É necessário conhecer também as taxas de entrada e saída de massa através da SC. Estas podem ser expressas da seguinte forma:

$$- \iint_{SC} \rho \vec{u} d\vec{A}, \quad (2)$$

em que \vec{u} é o vetor velocidade de entrada/saída de massa através da SC. Finalmente, podemos igualar as expressões (1) e (2) a fim de equacionar o balanço de massa em um volume de controle integral:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho dV = - \iint_{SC} \rho \vec{u} d\vec{A}. \quad (3)$$

A equação de balanço de massa pode também ser escrita na forma diferencial. Para isso, definem-se os volumes de controle infinitesimais conforme a Figura (I).

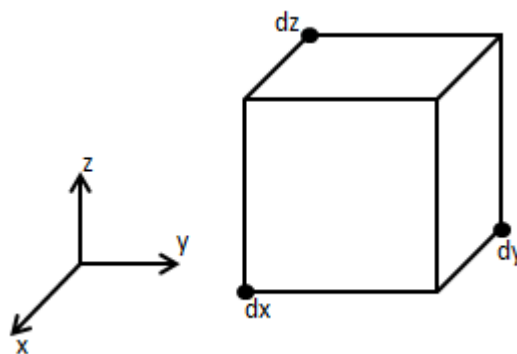


Figura I Volume de Controle

Aplicando a Equação (3) ao volume de controle infinitesimal da Figura (I), o lado esquerdo da Equação (3) se torna:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{VC} \rho dV = \frac{\partial(\rho dx dy dz)}{\partial t}. \quad (4)$$

Considerando cada face do cubo como uma superfície de controle infinitesimal por onde ocorrerá a transferência de massa com o meio, o lado direito da Equação (3) será então expresso por:

$$\iint_{SC} \rho \vec{u} d\vec{A} = \rho_{x+dx} u_{x+dx} dydz - \rho_x u_x dydz + \rho_{y+dy} u_{y+dy} dx dz - \rho_y u_y dx dz + \rho_{z+dz} u_{z+dz} dx dy - \rho_z u_z dx dy. \quad (5)$$

Substituindo as Equações (5) e (4) na Equação (3) e dividindo-se ambos os lados por “ $dx dy dz$ ”, obtém-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left[\frac{(\rho_{x+dx} u_{x+dx} - \rho_x u_x)}{dx} + \frac{(\rho_{y+dy} u_{y+dy} - \rho_y u_y)}{dy} + \frac{(\rho_{z+dz} u_{z+dz} - \rho_z u_z)}{dz} \right] \quad (6)$$

Aplicando o limite quando dx , dy e dz tendem a zero, obtemos, pela definição de derivada:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left[\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial z} \right] = -\nabla \cdot (\rho \vec{u}) \quad (7)$$

A Equação (7) é conhecida como *equação da continuidade*. Para escoamentos incompressíveis, alvo do atual trabalho, a equação da continuidade se reduz a:

$$\rho \nabla \cdot \vec{u} = 0. \quad (8)$$

Para chegar à equação de conservação de momento linear, deve-se realizar procedimento análogo ao realizado acima, tomando-se como base a segunda lei de Newton. Como resultado, será obtida uma equação para cada componente de velocidade. O sistema de Equações (9), (10) e (11) é denominado *equação do movimento*, considerando que a única força externa a atuar sobre o sistema é a força gravitacional.

$$\rho \frac{Du_x}{Dt} = \rho g_x + \frac{\partial \tilde{\tau}_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{zx}}{\partial z} \quad (9)$$

$$\rho \frac{Du_y}{Dt} = \rho g_y + \frac{\partial \tilde{\tau}_{yy}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{zy}}{\partial z} \quad (10)$$

$$\rho \frac{Du_z}{Dt} = \rho g_z + \frac{\partial \tilde{\tau}_{zz}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{xz}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{\tau}_{yz}}{\partial z} \quad (11)$$

O operador derivada substantiva ou material D/Dt , em coordenadas cartesianas, é definido por:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z}. \quad (12)$$

Para fluidos newtonianos, a tensão de cisalhamento ($\tilde{\tau}$) é expressa em termos da viscosidade dinâmica e da taxa de deformação, enquanto a tensão normal leva em conta também um termo relativo à pressão (FOX e MCDONALD, 1998). Com isso, chegamos às equações de conservação de quantidade de movimento para fluidos newtonianos, mais conhecidas como *equações de Navier-Stokes*:

$$\rho \frac{Du_x}{Dt} = \rho g_x - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right), \quad (13)$$

$$\rho \frac{Du_y}{Dt} = \rho g_y - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right), \quad (14)$$

$$\rho \frac{Du_z}{Dt} = \rho g_z - \frac{\partial P}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right). \quad (15)$$

II.1.2. Lei de Darcy

Em 1856, Henry Darcy envolveu-se em um projeto envolvendo filtros de areia, onde tentou descrever, através de experimentos, os possíveis fatores responsáveis pelo deslocamento de água ao longo de uma coluna de areia (FITTS, 2002). Darcy conseguiu definir princípios empíricos acerca do escoamento de água através de um meio arenoso, os quais puderam ser generalizados para o escoamento de um fluido através de um meio poroso a partir de uma equação desenvolvida por ele, hoje conhecida como *lei de Darcy*.

$$q = \frac{k (-\Delta P)}{\mu L} \quad (16)$$

Na Equação (16), q é a velocidade superficial do fluido, que é definida como a razão entre a vazão volumétrica do fluido que escoar pelo meio poroso e a área de seção transversal total deste. O parâmetro k é o coeficiente de permeabilidade do meio poroso, μ a viscosidade do fluido, $(-\Delta P)$ é a queda de pressão ao longo do meio e L o seu comprimento (RICHARDSON et al., 2002).

Uma curiosidade acerca da equação desenvolvida por Darcy diz respeito à sua estrutura, a qual é bem semelhante à de outras equações já existentes para a descrição de outros fenômenos, como a lei de Fick, para difusão, e a lei de Fourier, para condução térmica (ZIMMERMAN, 2003).

Deve-se ressaltar que, apesar de sua funcionalidade, a lei de Darcy possui alguns limites de aplicabilidade. O número de Reynolds referente ao escoamento do fluido ao longo do meio poroso deve possuir valor máximo igual a dez (CHARBENEAU, 2006). Esse tipo de escoamento é conhecido como *creeping flow* ou escoamento de Stokes. Além disso, como pode ser observado na Equação (16), a lei de Darcy foi estipulada para escoamentos unidimensionais.

Muitas tentativas já foram realizadas a fim de deduzir expressões que descrevam o movimento de fluidos em meios porosos, assim como chegar à lei de Darcy de forma

analítica (AALTOSALMI, 2005). Na maioria das vezes, tentou-se solucionar as equações de Navier-Stokes ou de Stokes para o escoamento no meio poroso. Algumas relações analíticas para o movimento puderam ser obtidas, como o realizado por TENG e ZHAO (1999), e para a permeabilidade.

II.1.3. Tensão Superficial

Johannes Diderik van der Waals, ao desenvolver sua equação de estado, propôs, como uma das modificações com relação à lei dos gases ideais, a adição de um termo referente às interações intermoleculares. Estas interações de curto alcance são responsáveis por diversos fenômenos físico-químicos, dentre eles a tensão superficial. Este fenômeno está diretamente relacionado ao modo como se comportam dois fluidos distintos ao entrarem em contato, como no caso da recuperação secundária de petróleo.

De acordo com SHAW (1992), a tensão superficial pode ser definida como o trabalho necessário para expandir a área superficial de forma isotérmica e reversível. O termo tensão superficial normalmente diz respeito à interação entre um fluido na fase líquida e o seu próprio vapor. Apesar de possuir significado físico similar, a interação entre dois fluidos de diferentes espécies costuma ser nomeada de tensão interfacial.

Para que este fenômeno possa ser mais bem descrito, suponha um sistema composto por dois fluidos diferentes, como água e óleo. As moléculas de óleo presentes no centro da massa oleosa, ou no *bulk*, estarão sujeitas a interações intermoleculares de curta distância em todas as direções. As moléculas próximas à interface água-óleo estarão sujeitas às mesmas forças intermoleculares, porém apenas no sentido da fase óleo, gerando um desequilíbrio entre as forças. Com isso, as moléculas tenderão a migrar para o interior do óleo, de forma que a área superficial de contato do óleo com a água seja a menor possível.

A variação dos valores da tensão superficial para diferentes espécies está conectada com os tipos de interação intermolecular presentes no fluido. É muito comum encontrar moléculas interagindo através de forças de van der Waals, que são relativamente fracas. A

água, por exemplo, que apresenta tensão superficial relativamente elevada, conta com a presença de ligações de hidrogênio, que são interações mais fortes (SHAW, 1992).

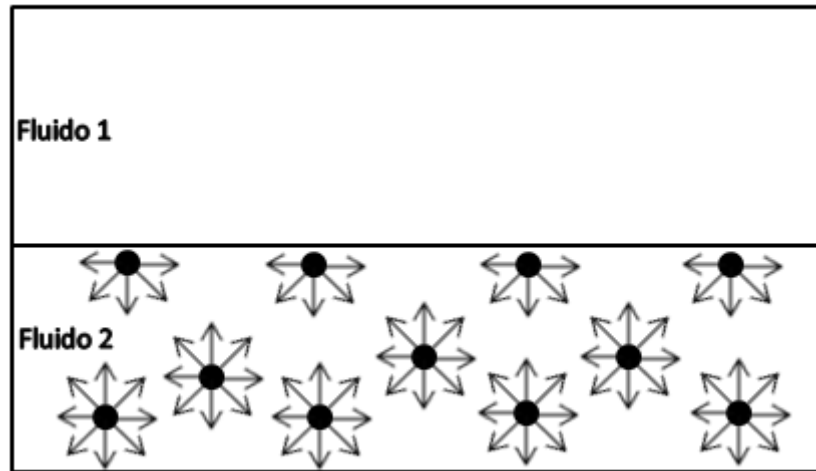


Figura ii Interação entre as moléculas de um fluido ao entrar em contato com outro.

Como consequência do fenômeno em questão, é comum que a interface entre os fluidos adquira uma curvatura, proveniente da introspecção das moléculas próximas à interface. Adicionalmente, é gerada uma diferença de pressão entre o interior da curvatura, parte côncava, e o exterior. Esta diferença de pressão entre os fluidos pode ser relacionada com a tensão superficial e ao raio de curvatura através da Lei de Laplace, a qual, para uma superfície esférica, possui a seguinte forma:

$$\Delta P = P_{interna} - P_{externa} = \frac{\gamma}{r} \quad (17)$$

em que r é o raio da esfera e γ é a tensão superficial entre os fluidos.

Quando superfícies sólidas são inseridas no sistema contendo dois fluidos, estes interagirão com elas a partir de forças coesivas e de adesão. As forças de adesão são as responsáveis pelo fluido molhar a superfície, enquanto as forças de coesão são responsáveis pela retração do fluido e geração do formato esférico.

O balanço entre essas forças pode ser visualizado a partir do ângulo de contato entre um fluido e a superfície. O ângulo de contato é definido como o ângulo formado entre a linha interfacial entre os dois fluidos presentes no meio e a linha interfacial entre um dos fluidos e a superfície sólida (SHAW, 1992), como exibido na Figura (III). A medida do ângulo de contato é inversamente proporcional à capacidade de um fluido molhar uma superfície, ou seja, ângulos de contato pequenos estão relacionados ao molhamento perfeito da superfície, enquanto ângulos de contato grandes representam baixa força de adesão entre um fluido e o sólido.

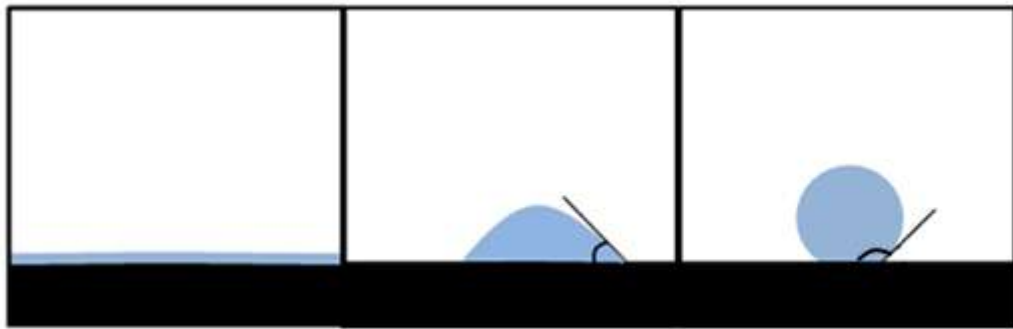


Figura iii Fluido formando diferentes ângulos de contato com a superfície.

O ângulo de contato pode ser definido como resultante do equilíbrio mecânico entre uma gota de fluido em uma superfície sólida sob ação de três interfaces: Fluido 1–superfície, fluido 2–superfície e fluido 1–fluido 2 (BRACCO e HOLST, 2013). Com isso, Young desenvolveu uma equação para o cálculo do ângulo de contato com bases nestas interações, conforme demonstrado abaixo.

$$\gamma_{12} \cos \theta = \gamma_{s2} - \gamma_{s1} \quad (18)$$

Onde γ_{12} corresponde à tensão superficial entre os dois fluidos, γ_{s1} à tensão entre a superfície e o fluido 1, γ_{s2} à tensão entre a superfície e o fluido 2 e θ o ângulo de contato.

II.1.4. Equação de Estado

Para descrever as propriedades de um fluido e prever seu estado físico, uma equação de estado será necessária. Em reservatórios de petróleo, é comum que as condições de temperatura e pressão façam com que parte do óleo migre para a fase vapor enquanto outra parte permanece na fase líquida, fato que torna necessária a utilização de equações de estado para predição do evento. As equações de estado são relações matemáticas utilizadas para relacionar funções de estado em um sistema em equilíbrio termodinâmico, mais comumente pressão, volume específico e temperatura (relações PVT). A equação de Clapeyron, ou lei dos gases ideais, é uma das equações de estado mais simples. Por ser uma equação desenvolvida com base na teoria dos gases ideais, ela possui poder preditivo bem restrito para gases submetidos a elevadas pressões e/ou baixas temperaturas. A equação de estado de van der Waals foi a primeira tentativa de se corrigirem estes problemas (SUKOP e THORNE JR, 2006):

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - a \left(\frac{1}{V_m} \right)^2 . \quad (19)$$

Como podemos observar na Equação (19), a equação de estado de van der Waals apresenta diferenças em relação à lei dos gases ideais. A primeira, no denominador do primeiro termo, referente à diferença entre o volume molar ocupado pelo composto em dada pressão (V_m) e o volume ocupado por um mol de moléculas submetido ao máximo fator de empacotamento possível, ou volume de esfera rígida (b). A segunda, na adição do parâmetro a , responsável por inserir o efeito das forças atrativas intermoleculares do composto. O sinal é negativo, pois, como as forças são de atração, ocorre uma redução da pressão em relação à calculada pela lei dos gases ideais.

Traçando-se o gráfico pressão x volume da equação de van der Waals a temperatura constante, pode-se obter uma sequência de isotermas, como observado na Figura (IV). Com a redução da temperatura, as curvas deixam de ter um aspecto monotônico e passam a apresentar um mínimo.

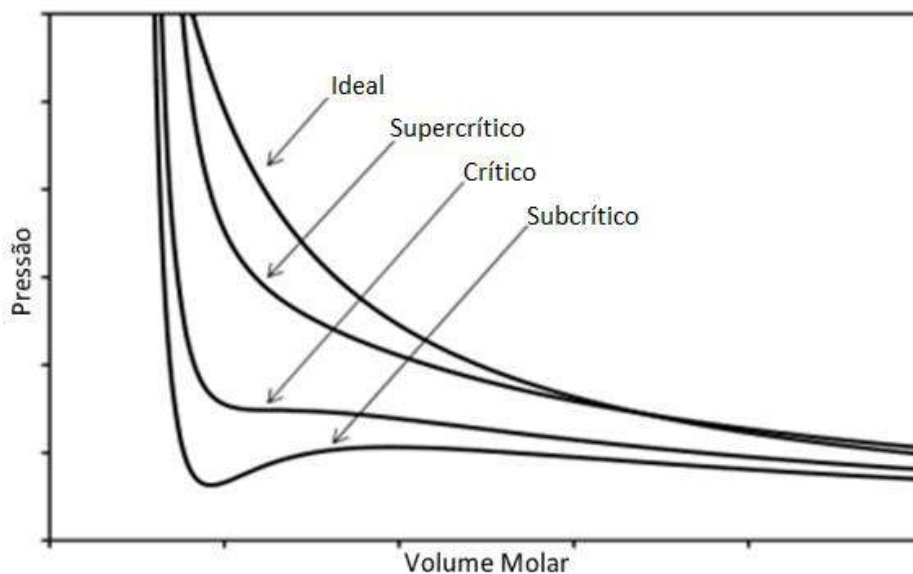


Figura iv Isotermas da equação de van der Waals comparada a uma isoterma de gás ideal. Figura adaptada de (SUKOP e THORNE JR, 2006)

Este comportamento ocorre pois, em temperaturas mais elevadas que o ponto crítico (caracterizado por um ponto de inflexão na curva PV), o fluido apresenta-se no estado supercrítico, onde ele encontra-se no estado gasoso, sendo impossível isotermicamente liquefazê-lo, por mais que se eleve a pressão. Em outras palavras, a separação de fases não ocorre em fluidos submetidos a condições supercríticas. Abaixo da temperatura crítica, o fluido encontra-se no estado subcrítico, onde é possível haver separação de fases. Nessa região, traçando-se uma reta isobárica, é possível obter três raízes de qualquer isoterma. A menor referente ao volume molar do líquido na dada pressão, a maior referente ao volume molar do vapor e a do meio sem significado físico, uma vez que ela, inconsistentemente, simboliza um estado em que há aumento no volume do fluido com o aumento da pressão. Outro dado importante que pode ser retirado do gráfico diz respeito à compressibilidade do fluido. Na região a direita da maior raiz, um leve aumento na pressão faz com que o volume molar reduza drasticamente. Por outro lado, a esquerda da menor raiz, um aumento na pressão faz com que o volume molar tenha uma redução ínfima. Com isso, ficam caracterizadas, respectivamente, a alta compressibilidade inerente ao vapor e a baixa compressibilidade inerente ao líquido.

A introdução da equação de van der Waals simbolizou um marco no estudo das equações de estado. Posteriormente, surgiram aprimoramentos dela, como as equações de

Peng-Robinson, Redlich-Kwong e Soave Redlich-Kwong, possibilitando a obtenção de melhores resultados nas previsões das funções de estado.

III. O Método Lattice-Boltzmann

III.1. Autômatos Celulares

Os autômatos celulares podem ser considerados um dos pilares para o desenvolvimento do método Lattice-Boltzmann. Eles consistem em uma rede de células, cada uma com seu próprio estado, que são atualizadas a cada passo de tempo com base em regras pré-determinadas. O domínio pode ser reproduzido em uma, duas ou três dimensões (KOMORI, 2012), podendo as células possuir diversos formatos, como triangular, quadrado ou hexagonal, dependendo do número de direções com que ela irá interagir com células vizinhas. Os estados das células consistem em variáveis Booleanas (WOLF-GLADROW, 2005), ou seja, podem possuir apenas dois valores possíveis, 1 ou 0. O programador pode determinar o funcionamento do autômato com base em regras escritas de forma explícita (declarando cada uma) ou por meio da criação de uma função que as descreva. Com isso, o autômato analisará o estado de uma célula e das células adjacentes, atualizando, com base nas regras determinadas pelo programador, o estado da célula central no próximo passo de tempo (SUKOP e THORNE JR, 2006).

Um exemplo clássico de autômato celular é o chamado *Game of Life* ou *Life*. Foi desenvolvido em 1970 por John Horton Conway (WOLF-GLADROW, 2005) e consegue demonstrar, de certa forma, o poder dos autômatos celulares em reproduzir dinâmicas complexas mesmo quando regido por regras simples. Um exemplo de utilização do *Game of Life* encontra-se ilustrado na Figura (V).

A partir dos conceitos discutidos acima, foi desenvolvido o autômato celular chamado *Lattice-Gas*, o qual pode ser considerado o precursor do método Lattice-Boltzmann e que será discutido na seção seguinte.

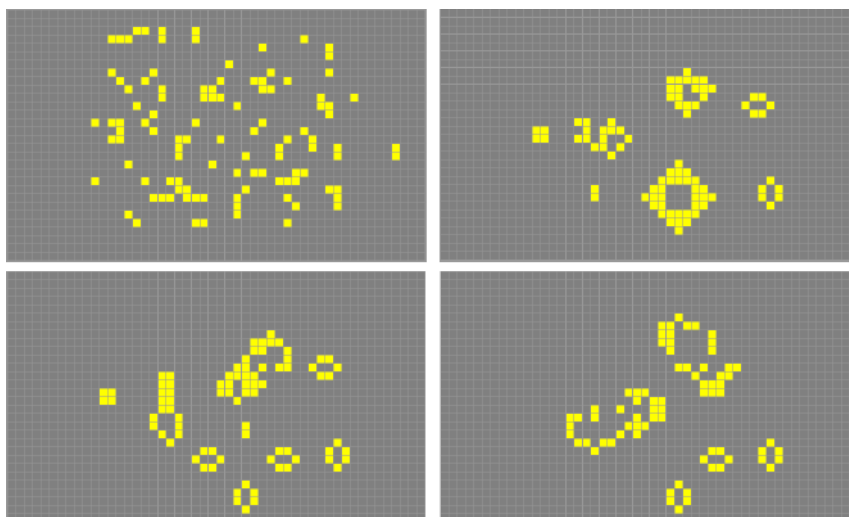


Figura v Simulação exemplar realizada no autômato Game of Life. Imagens retiradas após 0, 10, 20 e 100 passos de tempo. (fonte: www.bitstorm.org/gameoflife)

III.2. Autômatos do tipo *Lattice-Gas*

Este tipo de autômato celular surgiu mediante esforços para tentar simular o escoamento de fluidos e, mais adiante, visando obter resultados condizentes com os previstos pelas equações de Navier-Stokes. De forma geral, os autômatos do tipo Lattice-Gas são simples autômatos celulares capazes de obedecer as leis de conservação em nível microscópico (ADHVARYU, 2008).

A estrutura deste tipo de autômato é composta por uma fase de propagação, ou advecção, e uma de colisão, que se repetem a cada passo de tempo. Em cada ponto da rede há um número de direções pré-determinado, sendo possível haver apenas uma partícula deslocando-se em cada direção em um mesmo ponto de rede. Estas partículas são representadas pela variável booleana n_i , que adquire o valor 1 na presença de uma partícula deslocando-se em certa direção e 0 na sua ausência (SUKOP e THORNE JR, 2006). Inicialmente ocorre a fase de propagação, em que cada partícula se desloca para o ponto vizinho conforme a direção de sua velocidade. Após esta etapa ocorre a colisão, onde partículas no mesmo ponto, com direções opostas, são “rebatidas” conforme alguma regra a ser estipulada. Esta rotina pode ser representada pela equação abaixo.

$$n_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) = n_i(x, t) + \Delta_i \quad (20)$$

Δ_i é o operador de colisão, responsável pelas regras de colisão e que deve garantir a conservação de massa e momento durante o processo. As variáveis x , t e c_i são, respectivamente, a localização da partícula, o passo de tempo em andamento e a velocidade da partícula na rede, a qual pode ser calculada a partir da Equação (21). Como o espaçamento entre dois pontos na rede é de 1 unidade de rede (*lattice unit*) e Δt corresponde a 1 passo de tempo, então a velocidade das partículas é constante e igual a um.

$$c_i = \frac{\Delta x}{\Delta t} = \frac{1}{1} = 1 \quad (21)$$

Dentro desta classe de autômatos, dois esquemas obtiveram maior destaque: o HPP e o FHP.

O modelo HPP (HARDY et al., 1976) corresponde a um autômato de rede quadrada, em que as partículas podem se deslocar em quatro direções distintas ou permanecer na posição de índice zero, ou seja, parada, como é possível visualizar na Figura (VII). Este modelo comporta apenas colisões entre duas partículas, podendo cada colisão gerar apenas um tipo de resposta, como exemplificado na Figura (VI). Graças a isso, o modelo HPP possui uma propriedade nomeada invariância reversa do tempo, que torna possível reobter cada estado exato adquirido pelo sistema em qualquer passo de tempo passado.

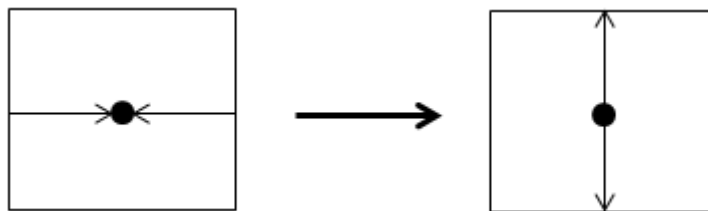


Figura vi Colisão entre duas partículas no autômato HPP e estado posterior.

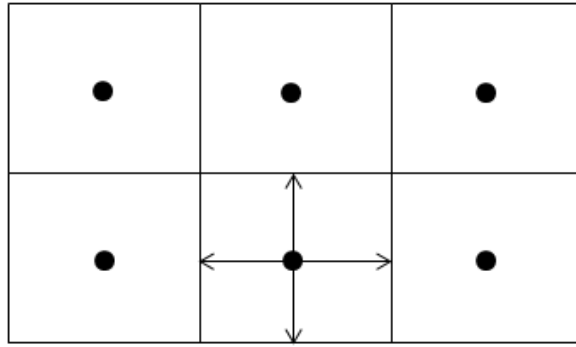


Figura vii Geometria de transmissão de informação no autômato HPP.

Tendo em vista o objetivo inicial de simular o movimento de fluidos, esse modelo conta com equações responsáveis por calcular a densidade macroscópica e momento, representadas respectivamente pelas Equações (22) e (23). A partir dessas duas equações, pode-se calcular a velocidade macroscópica (WOLF-GLADROW, 2005). Conhecendo-se a densidade e a velocidade macroscópicas na simulação, seria possível comparar seus resultados com os dados reais do problema. Então, definimos

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=0}^4 n_i(\vec{x}, t), \quad (22)$$

$$\rho(\vec{x}, t)\vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^4 n_i(\vec{x}, t)\vec{c}_i. \quad (23)$$

O modelo HPP possui as vantagens de necessitar de pouco espaço para armazenar informações, inexistência de erros de arredondamento, devido à natureza Booleana da variável n_i e elevada capacidade de paralelismo, uma vez que somente a etapa de propagação necessita de informações de pontos vizinhos, sendo os cálculos de velocidade, densidade e momento macroscópicos e etapa de colisão dependentes apenas do próprio ponto na rede (VIGGEN, 2009). O modelo, por outro lado, sofre com ruídos inerentes à utilização da variável n_i (ADHVARYU, 2008) e não é capaz de gerar resultados concordantes

com as equações de Navier-Stokes devido à anisotropia do sistema, o que não será discutido a fundo neste trabalho devido à necessidade de conceitos mais complexos.

O modelo FHP (FRISCH et al., 1986) é similar ao modelo HPP, com exceção de que sua rede possui um formato hexagonal, podendo a partícula se deslocar ao longo de seis direções, como demonstrado na Figura (VIII). Esse modelo prevê mais de uma possibilidade de configuração após a colisão entre duas partículas, que deve ser escolhida aleatoriamente. Além disso, reproduz colisões entre três partículas, gerando, estas, apenas um resultado possível (WOLF-GLADROW, 2005). Exemplos de colisões entre duas e três partículas podem ser observados respectivamente nas Figuras (X) e (IX).

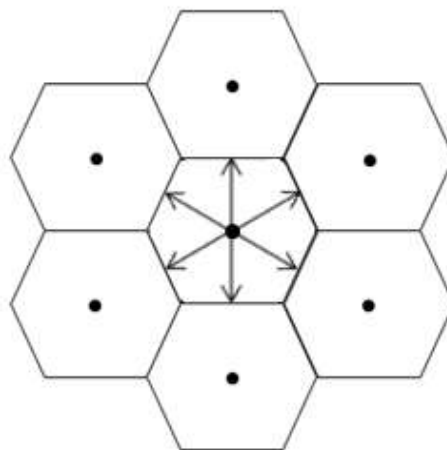


Figura viii Geometria de transmissão de informação no autômato FHP.

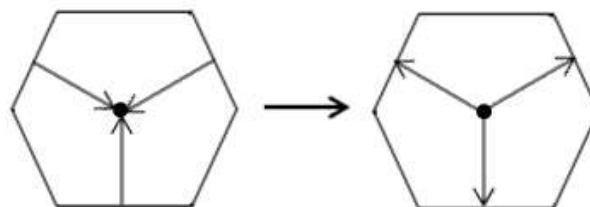


Figura ix Colisão entre três partículas no autômato FHP e estado posterior.

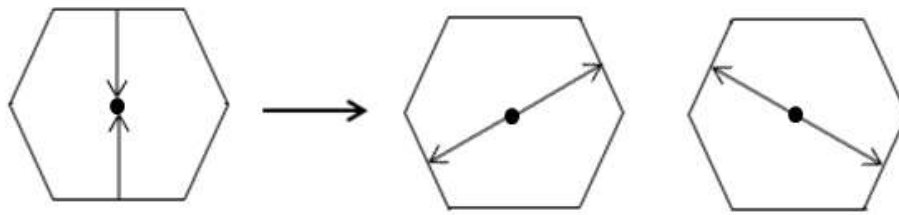


Figura x Colisão entre duas partículas no autômato FHP e possíveis estados posteriores.

Apesar de o modelo FHP contar, da mesma forma que o HPP, com a presença de ruídos, a modificação do formato de rede e aumento do número de direções possíveis em que as partículas podem se deslocar conferem ao modelo isotropia, o que era um dos principais entraves no modelo anterior. Com esse avanço, foi possível reproduzir resultados condizentes com as equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis (VIGGEN, 2009).

III.3. A Equação de Boltzmann

O método Lattice-Boltzmann consiste em uma discretização da equação de Boltzmann, como será demonstrado mais adiante. Sendo assim, conhecer a equação de Boltzmann torna-se fundamental para um melhor entendimento do método.

A equação de Boltzmann, embasada na teoria cinética dos gases, é uma equação integro-diferencial com relação a uma função de distribuição (WOLF-GLADROW, 2005). Na tentativa de explicar o significado físico desta função de distribuição, duas explicações são muito difundidas. A primeira, e que será utilizada neste trabalho, define a função como a probabilidade, em um dado instante de tempo “ t ”, de encontrar uma molécula com localizada em “ r ” e com momento “ p ”. A outra interpretação define a função de distribuição não como uma probabilidade, mas como o número de moléculas nos mesmos intervalos estipulados de espaço e momento. Independentemente da interpretação que será utilizada, a função pode ser descrita como $f(r,p,t)$.

Supondo que as moléculas movimentem-se livremente no meio, muito distantes uma das outras, de forma que não ocorram colisões entre elas, então, no instante de tempo $t+dt$,

suas novas posições serão definidas como $x+dx$ e o novo momento será $p+dp$, o que leva a (MOHAMAD, 2011):

$$f(x + dx, p + dp, t + dt)dxdp = f(x, p, t)dxdp . \quad (24)$$

Contudo, deve-se levar em conta também as colisões existentes entre as moléculas. Sabendo-se que algumas moléculas que saem de uma posição x_1 com destino a x_2 colidem no meio do caminho e não chegam em x_2 , assim como algumas moléculas com outros rumos colidem entre si e são desviadas para a posição x_2 , pode-se afirmar que haverá uma diferença no número de moléculas no intervalo $drdp$, violando a Equação (24). Sendo assim, deve-se adicionar um termo representativo das colisões, o qual irá reajustar a Equação (24), levando a (MOHAMAD, 2011):

$$f(x + dx, p + dp, t + dt)dxdp - f(x, p, t)dxdp = \Omega(f)drdpdt . \quad (25)$$

Onde Ω é o operador colisão e é função da função de distribuição. Dividindo-se ambos os lados da equação por $drdpdt$ e aplicando o limite $dt \rightarrow 0$, temos:

$$\frac{df}{dt} = \Omega(f) . \quad (26)$$

Tendo em vista que f é função de r , p e t , pode-se escrever a taxa de variação de f como a seguinte função:

$$df = \frac{\partial f}{\partial r} dr + \frac{\partial f}{\partial p} dp + \frac{\partial f}{\partial t} dt , \quad (27)$$

e derivando ambos os lados em função do tempo, obtemos:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{dr}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t} = \vec{\xi} \frac{\partial f}{\partial r} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (28)$$

onde a variável $\vec{\xi}$ corresponde às velocidades das moléculas e a variável \vec{F} às forças externas. Por último, igualando-se a Equação (28) à Equação (26), chegamos à equação de Boltzmann (MOHAMAD, 2011).

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \nabla_x f + \vec{F} \nabla_p f = \Omega(f) \quad (29)$$

Alternativamente, segundo SUKOP e THORNE JR (2006), expandindo-se o primeiro termo ao lado esquerdo da Equação (25) e agrupando os termos de primeira ordem, é possível chegar também à equação de Boltzmann.

Escrito de forma explícita, o operador colisão é um operador integral. A equação de Boltzmann, portanto, é uma equação integro-diferencial. Tendo em vista tal dificuldade, diversas aproximações foram desenvolvidas visando simplificar o cálculo das colisões moleculares e, conseqüentemente, a resolução da equação de Boltzmann.

III.4. Princípios de conservação

É comum representar a função de distribuição em termos da velocidade, ou seja, como uma função $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$. Neste caso, mantém-se a notação f , embora $f(\vec{x}, \vec{p}, t)$ e $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$ sejam matematicamente distintas. A equação de Boltzmann é, para $f(\vec{x}, \vec{\xi}, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{\vec{F}}{m} \cdot \nabla_{\vec{\xi}} f = \Omega. \quad (30)$$

As leis de conservação de massa e momento linear podem ser deduzidas a partir da equação de Boltzmann (WOLF-GLADROW, 2005). Utilizando-se a definição da densidade

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int m f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \quad (31)$$

e multiplicando-se por m e integrando-se todos os termos da equação de Boltzmann em relação a ξ_1 , ξ_2 e ξ_3 , tem-se

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \int m \vec{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f dv_1 dv_2 dv_3 - \int \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{\xi}} f dv_1 dv_2 dv_3 + \int \Omega m dv_1 dv_2 dv_3. \quad (32)$$

O último termo do lado direito da Equação (32) refere-se à variação de massa durante uma colisão entre partículas. Como a massa é conservada durante a colisão, este termo é nulo. Desconsiderando-se a ação de forças externas, o segundo termo do lado direito também se torna nulo. O primeiro termo do lado direito pode ser reescrito com a definição do vetor velocidade média \vec{u} (WOLF-GLADROW, 2005):

$$\vec{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{\int \mathbf{v} f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3}{\int f(\vec{x}, \vec{\xi}, t) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3}. \quad (33)$$

Assim, a Equação (32) pode ser reescrita como a Equação (34), que é conhecida como a equação da continuidade.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (34)$$

O princípio de conservação do momento linear também pode ser obtido a partir da Equação (30), ao multiplicá-la por $m\mathbf{v}$ e realizar a integração em relação a ξ_1 , ξ_2 e ξ_3 :

$$\begin{aligned}
\int m_{\vec{\xi}} \cdot \frac{\partial f}{\partial t} d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 &= \frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} \\
&= - \int m_{\vec{\xi}} \vec{\xi} \cdot \nabla_x f d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 - \int \vec{\xi} \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{\xi}} f d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 \\
&+ \int \vec{\xi} \Omega d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 .
\end{aligned} \tag{35}$$

O termo de colisão, novamente, é nulo, pois o momento linear se conserva na colisão. É possível mostrar que, se a velocidade é escrita como a soma da velocidade média \vec{u} e de uma correção com média zero \vec{V} (WOLF-GLADROW, 2005),

$$\vec{\xi} = \vec{u} + \vec{V}, \tag{36}$$

a Equação (35) se reduz à Equação do Movimento,

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = \vec{\Phi} - \nabla \cdot \vec{\tau}, \tag{37}$$

em que $\vec{\tau}$ é o tensor tensão (ou tensor fluxo de momento), com componentes

$$\tau_{ij} = m \int \vec{V}_i \vec{V}_j f(\vec{x}, \vec{u} + \vec{V}, t) d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3, \tag{38}$$

e $\vec{\Phi}$ é o termo de força externa por unidade de volume de fluido.

III.5. Equação de Lattice-Boltzmann

A utilização dos autômatos celulares, principalmente do tipo Lattice-Gas, para a simulação do escoamento de fluidos, a fim de reproduzir o comportamento hidrodinâmico das equações de Navier-Stokes, necessitava do apoio de muitos recursos computacionais para que fosse amenizado o efeito dos ruídos, intrínsecos ao método. Em 1988, MCNAMARA e ZANETTI, sugeriram a utilização de uma técnica alternativa, na qual seria

possível modelar um autômato celular com base na equação de Boltzmann. Este novo método seria capaz de superar o problema do ruído a partir da utilização da função de distribuição de Boltzmann, que pode adquirir valores reais, para o cálculo da densidade ao invés da variável “n” utilizada até então, que só possuía dois valores possíveis: um ou zero.

O método, conhecido como Lattice-Boltzmann, é obtido a partir da discretização da velocidade microscópica ξ na Equação (30), que originalmente possui forma contínua, em um número finito “a” de direções possíveis (YU et al., 2003). Com isso, a equação de Boltzmann, desprezando a ação de forças externas, adquire a seguinte forma:

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \xi_a \nabla_x f_a = \Omega(f_a). \quad (39)$$

Aplicando-se o modelo para colisões desenvolvido por BHATNAGAR, GROSS e KROOK (1953), ou modelo BGK, o operador de colisão é simplificado, resumindo a Equação (39) a:

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + \xi_a \nabla_x f_a = -\frac{1}{\tau} (f_a - f_a^{eq}), \quad (40)$$

onde τ é o tempo de relaxação e f_a^{eq} é a função distribuição de equilíbrio, a função de distribuição de Maxwell-Boltzmann (YU et al., 2003). Uma discretização possível para a Equação (40) é dada por:

$$\begin{aligned}
& \frac{f_a(x, y, z, t + \Delta t) - f_a(x, y, z, t)}{\Delta t} \\
& + \xi_{ax} \frac{f_a(x + \Delta x, y, z, t + \Delta t) - f_a(x, y, z, t + \Delta t)}{\Delta x} \\
& + \xi_{ay} \frac{f_a(x, y + \Delta y, z, t + \Delta t) - f_a(x, y, z, t + \Delta t)}{\Delta y} \\
& + \xi_{az} \frac{f_a(x, y, z + \Delta z, t + \Delta t) - f_a(x, y, z, t + \Delta t)}{\Delta z} \\
& = -\frac{1}{\tau} (f_a - f_a^{eq}).
\end{aligned} \tag{41}$$

A Equação (41) pode ser adimensionalizada com o uso de uma velocidade de referência U , um comprimento característico L e um tempo entre colisões t_c , de forma que:

$$e_a = \frac{\xi_a}{U}, \quad \Delta \hat{x} = \frac{\Delta x}{L}, \quad \Delta \hat{y} = \frac{\Delta y}{L}, \quad \Delta \hat{z} = \frac{\Delta z}{L}, \quad \Delta \hat{t} = \frac{\Delta t U}{L}, \quad \hat{t} = \frac{\tau}{t_c} \tag{42}$$

Adotando-se as *velocidades do lattice* como:

$$e_{ax} = \frac{\Delta \hat{x}}{\Delta \hat{t}}, \quad e_{ay} = \frac{\Delta \hat{y}}{\Delta \hat{t}}, \quad e_{az} = \frac{\Delta \hat{z}}{\Delta \hat{t}} \tag{43}$$

Com algum algebrismo, fazendo-se $\Delta t = t_c$, e retirando a notação para variáveis adimensionais, temos a equação *lattice-Boltzmann* com a aproximação *BGK* (HE e LUO, 1997; WOLF-GLADROW, 2000):

$$f_a(x_i + e_a \Delta t, t + \Delta t) - f_a(x_i, t) = -\frac{1}{\tau} [f_a(x_i, t) - f_a^{eq}(x_i, t)] \tag{44}$$

Onde Δt é o passo de tempo e x_i um ponto no espaço discretizado. Na Equação (44), chamada de equação de Lattice-Boltzmann o lado esquerdo é representativo do movimento advectivo das partículas e o lado direito representativo das colisões entre partículas.

A fim de tornar a equação de Lattice-Boltzmann capaz de simular o comportamento das equações de Navier-Stokes, deve-se realizar um tratamento matemático conhecido como expansão de Chapman-Enskog, o qual se baseia em uma expansão de multi-escala de caráter assintótico (YU et al., 2003). Com ela, será determinada uma relação para a viscosidade do fluido, o que adaptará o método a comportar-se como as equações de Navier-Stokes. Em linhas gerais, a expansão é realizada sobre o tempo, o espaço e a função de distribuição, sendo o primeiro expandido em dois termos, o segundo em um e o último em três termos, como demonstrado abaixo.

$$t = \epsilon t_1 + \epsilon^2 t_2 \quad (45)$$

$$x = \epsilon x_1 \quad (46)$$

$$f_a = f_a^{(0)} + \epsilon f_a^{(1)} + \epsilon^2 f_a^{(2)} + \dots \quad (47)$$

Onde ϵ é o número de Knudsen, definido como

$$\epsilon = \frac{\text{caminho livre médio das moléculas}}{\text{comprimento característico do sistema}} = \frac{\lambda}{L}. \quad (48)$$

Para esta expansão, é considerado que o número de Knudsen é muito pequeno, ou seja, o caminho livre médio entre as partículas é muito pequeno se comparado a um comprimento característico (BHATNAGAR et al., 1953). Esta suposição abre caminho para a reprodução do comportamento de um fluido, o qual não é rarefeito e, conseqüentemente, as moléculas encontram-se relativamente próximas. Para números de Knudsen superiores a um, o fluido não pode ser considerado um meio contínuo (STEINHAUSER, 2008). Na Equação (47), o

termo de índice zero corresponde à função distribuição de equilíbrio. A equação de Euler é obtida quando a série é truncada no termo de primeira ordem. A de Navier-Stokes, no termo de segunda ordem. A inclusão de termos posteriores no truncamento torna-se necessária na modelagem de escoamentos mais complexos, como o de fluidos viscoelásticos (LUTSKO, 2006).

Prosseguindo-se na expansão de Chapman-Enskog, as equações de Navier-Stokes podem ser recuperadas no limite de incompressibilidade, ou seja, deve-se supor que o número de Mach, que é definido como a razão entre a velocidade do fluido e a velocidade do som no fluido, é menor que 0,3. Mais uma vez, a expansão de Chapman-Enskog abrange muito mais do que o explicado aqui. Sua teoria é bem extensa e foge ao escopo do trabalho. Para maiores referências acerca da aplicação da expansão sobre a equação de Lattice-Boltzmann, aconselha-se a leitura dos trabalhos de LATT (2007) e, para uma leitura mais avançada, LUTSKO (2006).

Com as suposições e os níveis de truncamento realizados na expansão, o modelo obtido é capaz de prover soluções para as equações incompressíveis de Navier-Stokes com precisão de segunda ordem (STERLING e CHEN, 1993). Por outro lado, devido aos limites de incompressibilidade, o método Lattice-Boltzmann peca na predição de resultados para escoamentos com números de Mach elevados (MCNAMARA e ZANETTI, 1988).

IV. Algoritmo e Características do Método Lattice-Boltzmann Utilizado

A Equação (44) é o cerne do método Lattice-Boltzmann aqui utilizado. Esta equação admite somente um tempo de relaxação. Neste trabalho, será utilizado o modelo D2Q9. O termo “D2” expressa o número de dimensões do domínio, ou seja, domínio possui duas dimensões. O termo “Q9” determina o número de direções no qual a velocidade foi discretizada, podendo, neste caso, as partículas se deslocarem ao longo de nove direções.

A rotina que será apresentada para o modelo monofásico é o esqueleto para todo o posterior desenvolvimento do método. Mais a frente, serão apresentadas adaptações desta rotina principal a fim de simular escoamentos multifásicos e com mais de um componente.

IV.1. Modelo Monofásico

Antes de dar início a qualquer rotina, é necessário que sejam estipuladas as condições iniciais do problema. Sendo assim, as matrizes de velocidade e densidade macroscópicas devem ser inicializadas de acordo com o problema a ser simulado, assim como a matriz referente à função de distribuição. Em grande parte da literatura pesquisada, mostrou-se que a função de distribuição seja inicializada a partir do cálculo da função de equilíbrio.

Inicialmente, é preciso inicializar os vetores referentes às velocidades microscópicas e a matriz de sólidos no domínio, que será utilizada mais a frente quando for discutida a condição de contorno para barreiras sólidas. As velocidades microscópicas dizem respeito às possíveis direções a que as partículas podem se deslocar, tendo seus valores, para o modelo D2Q9, expostos nas Equações (49) e (50) e visualmente descritos pela Figura (XI).

$$e_x = [0 \ 1 \ 0 \ -1 \ 0 \ 1 \ -1 \ -1 \ 1] \quad (49)$$

$$e_y = [0 \ 0 \ 1 \ 0 \ -1 \ 1 \ 1 \ -1 \ -1] \quad (50)$$

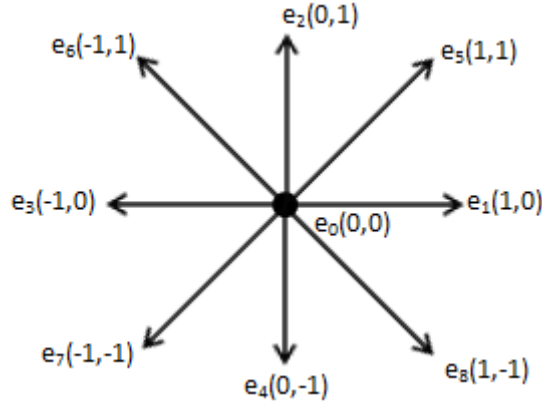


Figura xi Direções do modelo D2Q9 e os respectivos índices referentes velocidades microscópicas.

Uma vez devidamente inicializadas todas as matrizes e vetores necessários, pode-se dar início ao loop principal. A primeira etapa consiste no cálculo das velocidades e densidade macroscópicas para cada célula do domínio, as quais são calculadas com base nas velocidades microscópicas e nas funções de distribuição, conforme demonstrado abaixo.

$$\rho = \sum_{a=0}^8 f_a \quad (51)$$

$$u_x = \frac{\sum_{a=0}^8 f_a e_{x_a}}{\rho} \quad (52)$$

$$u_y = \frac{\sum_{a=0}^8 f_a e_{y_a}}{\rho} \quad (53)$$

Onde os numeradores das Equações (52) e (53) representam, respectivamente, as componentes do momento no eixo x e no eixo y.

Após ter calculados as variáveis macroscópicas, o próximo passo será calcular as velocidades de equilíbrio. Essas velocidades serão utilizadas para o posterior cálculo da função de equilíbrio. Além disso, caso haja alguma força externa atuando sobre o sistema, esta deve ser inserida na velocidade de equilíbrio na forma de variação no momento. Caso não haja forças externas atuantes, as velocidades de equilíbrio resumem-se às próprias velocidades macroscópicas calculadas anteriormente. As etapas para adição de forças e cálculo das velocidades de equilíbrio podem ser demonstradas segundo as seguintes equações:

$$F_{ext_x} = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{\Delta(\rho u_x)}{\Delta t} \quad (54)$$

Na qual p é o momento.

$$\rho u_x^{eq} = \rho u_x + \tau F_{ext_x} \quad (55)$$

Em que τ é o tempo de relaxação do modelo BGK.

$$u_x^{eq} = u_x + \tau \frac{F_{ext_x}}{\rho} \quad (56)$$

Seguindo o mesmo raciocínio, a velocidade de equilíbrio no eixo y é dada por:

$$u_y^{eq} = u_y + \tau \frac{F_{ext_y}}{\rho} \quad (57)$$

Tendo já obtidos os valores da densidade macroscópica e das velocidades macroscópicas e de equilíbrio, a função de equilíbrio pode então ser calculada a partir da seguinte equação:

$$f_{eq_a}(x, t) = w_a \rho \left[1 + 3 \left(e_{x_a} u_x^{eq} + e_{y_a} u_y^{eq} \right) + \frac{9}{2} \left(e_{x_a} u_x^{eq} + e_{y_a} u_y^{eq} \right)^2 - \frac{3}{2} \left((u_x^{eq})^2 + (u_y^{eq})^2 \right) \right], \quad (58)$$

a qual consiste em uma expansão de Taylor da distribuição de Maxwell-Boltzmann truncada no segundo termo. Sua dedução completa pode ser encontrada no livro escrito por ZHOU (2004). w_a corresponde a pesos atribuídos a cada direção e é representado pelo vetor:

$$w_a = \left[\frac{4}{9} \frac{1}{9} \frac{1}{9} \frac{1}{9} \frac{1}{9} \frac{1}{36} \frac{1}{36} \frac{1}{36} \frac{1}{36} \right] \quad (59)$$

Com isso, restam ser realizadas as duas principais etapas do procedimento: A colisão e a propagação. Na etapa de colisão, a função de distribuição será atualizada. Para isso, é calculada a diferença entre a função de distribuição atual e a função de equilíbrio, diferença a qual é relaxada pelo parâmetro τ . Esta é então reduzida da função de distribuição atual, sendo assim gerada uma nova função de distribuição, como na Equação (60).

$$f(x, t)'_a = f(x, t)_a - \frac{\left(f(x, t)_a - f_{eq_a}(x, t) \right)}{\tau} \quad (60)$$

Por fim, é realizada a etapa de propagação, onde as partículas de fluido presentes em cada célula movimentam-se para as células vizinhas conforme as direções preditas pelo vetor e_a .

$$f\left(x + e_{x_a}, y + e_{y_a}, t + \Delta t\right)_a = f(x, y, t)_a \quad (61)$$

Esta etapa é a única que deve ser realizada também nas células contendo sólidos. Todas as demais devem ser realizadas apenas na parte fluida do domínio.

Ao final da etapa de propagação, deve-se iniciar um novo loop em torno da rotina principal, onde todas as etapas, começando pelo cálculo das variáveis macroscópicas, deverão ser realizadas novamente. Para que a simulação seja encerrada, o programador deverá fixar alguma regra para tal, seja ela fixar o número máximo de passos de tempo ou, por exemplo, designar uma diferença entre a velocidade no passo anterior e o passo atual para a qual o loop será concluído.

Como pode ser observado, com exceção da etapa de propagação, todo o procedimento ocorre de forma local, ou seja, os cálculos são quase todos realizados com base em uma única célula do domínio. Essa característica do método Lattice-Boltzmann o confere elevado poder de paralelismo, podendo-se utilizar simultaneamente diversas CPUs para a realização dos cálculos.

Sabendo-se que o método é relativamente recente e que diversas pesquisas vêm sendo efetuadas acerca do mesmo, deve-se observar que a aproximação BGK, de simples aplicação, não possui uma ampla faixa de estabilidade. Dentre outras aproximações para a etapa de colisão, uma das mais citadas é o MRT (Multiple Relaxation Time). Esta aproximação consiste na utilização de uma matriz contendo diversos tempos de relaxação. Para maiores informações acerca do MRT, o qual provou aperfeiçoar consideravelmente a estabilidade do método, é recomendada a leitura do artigo que o introduziu em 1992, escrito por D'HUMIERES.

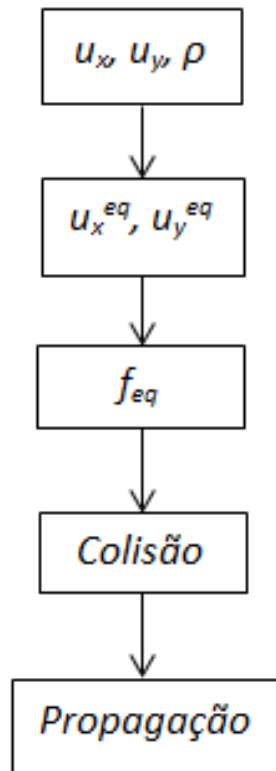


Figura xii Etapas a serem realizadas durante a rotina principal.

O código referente à rotina discutida acima se encontra disponível no Apêndice A.

IV.2. Condições de Contorno

Neste trabalho, serão utilizadas as condições de contorno de velocidade, de pressão, periódicas e “*half-way bounceback*”, responsável por refletir as partículas que se encontram com as células sólidas.

As condições de contorno periódicas interligam as extremidades do domínio, assim, a simulação ocorre como se se passasse em um domínio que é rodeado por cópias idênticas dele mesmo. No caso bidimensional, o que sair pela esquerda do domínio, entra pela direita e vice-versa. O mesmo ocorre quanto ao sul e o norte do domínio.

O “*half-way bounceback*” é uma condição de contorno de simples aplicação responsável por refletir as partículas que chegam até as células de origem sólida na direção oposta. Com a utilização desta condição de contorno, é possível obter a condição de não escorregamento, que garante que a velocidade do fluido rente à parede é zero (CORNUBERT et al., 1991). O nome “*half-way*” refere-se ao fato da interface entre o sólido e o fluido estar localizada exatamente na metade do caminho entre o nó sólido e o nó fluido (ZOU e HE, 1996).

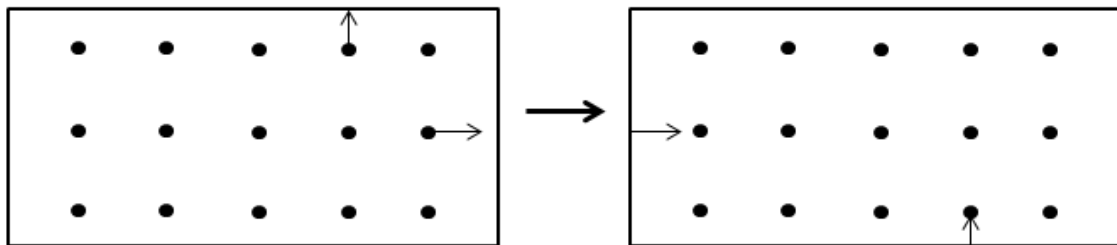


Figura xiii Condição de contorno periódica.

O “*half-way bounceback*” é uma condição de contorno de simples aplicação responsável por refletir as partículas que chegam até as células de origem sólida na direção oposta. Com a utilização desta condição de contorno, é possível obter a condição de não escorregamento, que garante que a velocidade do fluido rente à parede é zero (CORNUBERT et al., 1991). O nome “*half-way*” refere-se ao fato da interface entre o sólido e o fluido estar localizada exatamente na metade do caminho entre o nó sólido e o nó fluido (ZOU e HE, 1996).

A condição de contorno do tipo *bounceback* pode ser descrito em quatro etapas. Inicialmente, uma partícula dirige-se ao nó sólido em uma dada direção. Ao se encontrar com o nó sólido, a partícula passa pela etapa de propagação, onde irá adentrar o sólido com a mesma direção. A terceira etapa consiste no espelhamento de sua direção, que consiste na etapa de *bounceback* propriamente dita. Na última etapa, a partícula passa novamente pela etapa de propagação, saindo do nó sólido para um nó fluido com a nova direção estipulada pelo espelhamento. O procedimento acima explicado encontra-se ilustrado na Figura (XIV).

Segundo ZOU E HE (1996), o “*half-way bounceback*” foi desenvolvido visando obter-se uma alternativa à regra *bounceback* até então existente, na qual a parede localizava-se exatamente em cima do nó sólido, o que desencadeava erros de primeira ordem na velocidade.

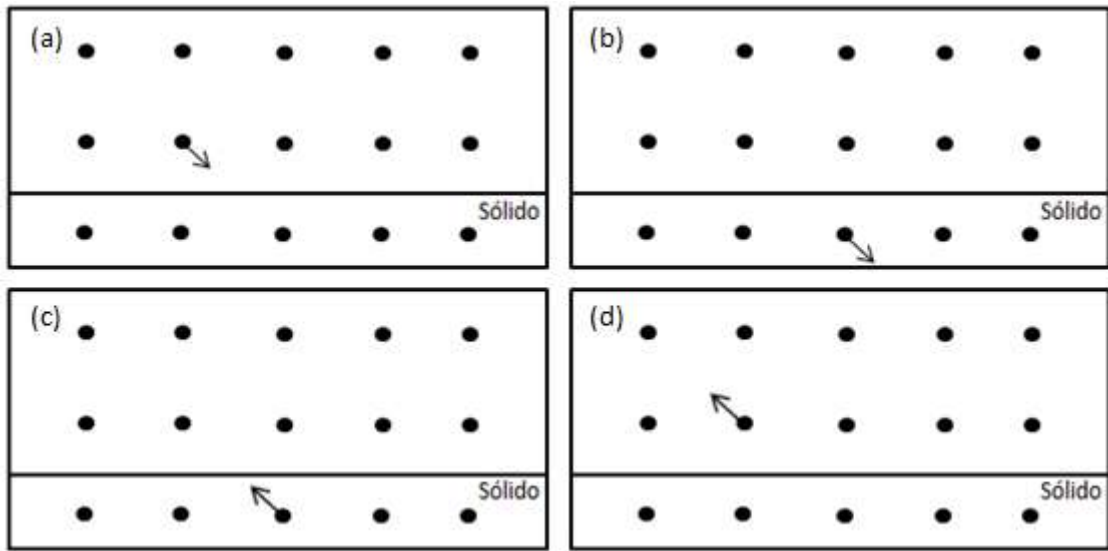


Figura xiv Condição de contorno 'bounceback'.

As condições de contorno de velocidade e pressão, também propostas por ZOU E HE (1996), são utilizadas quando se deseja simular uma abertura do domínio para o ambiente (“*opening*”). Sendo assim, estipula-se uma velocidade fixa, ou pressão, que se adeque ao caso a ser simulado. Por envolver uma grande quantidade de algebrismos, esta condição de contorno será mais bem explicada a partir de um exemplo.

Suponha um domínio onde a entrada, a oeste, possui velocidade conhecida, enquanto a saída, a leste, possui pressão conhecida.

As funções de distribuição assinaladas em vermelho na Figura (XV) são, a princípio, desconhecidas, uma vez que as respectivas partículas vêm de fora do domínio, não possuindo características conhecidas. As condições de contorno em questão têm por objetivo justamente calcular o valor desconhecido dessas funções que estão compenetrando no domínio.

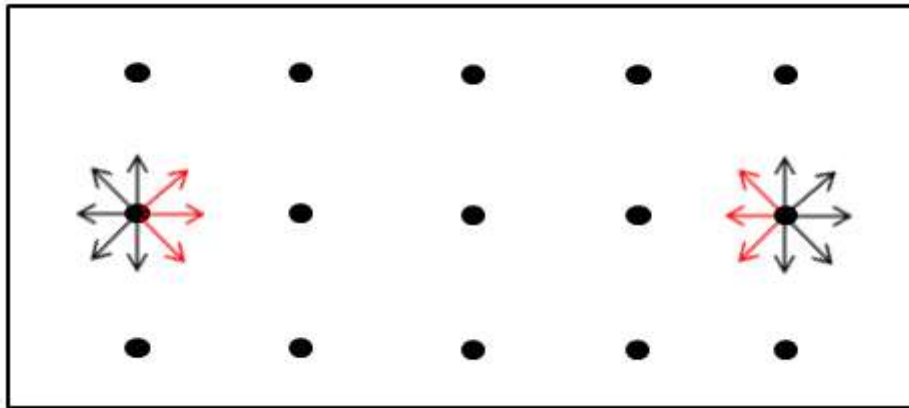


Figura xv Funções de distribuição desconhecidas nas condições de contorno de velocidade e pressão.

Primeiramente, serão demonstrados os cálculos para a condição de contorno de velocidade, localizada na entrada. As funções de distribuição a serem calculadas são f_1 , f_5 e f_8 . Para isso, as Equações (51), (52) e (53) são reescritas de forma explícita, colocando-se as funções de distribuição desconhecidas em evidência.

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho - (f_0 + f_2 + f_3 + f_4 + f_6 + f_7) \quad (62)$$

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho u_x + f_3 + f_6 + f_7 \quad (63)$$

$$f_5 - f_8 = \rho u_y - f_2 + f_4 - f_6 + f_7 \quad (64)$$

Igualando as Equações (62) e (63), temos:

$$\rho = \frac{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)}{(1 - u_x)} \quad (65)$$

Com isso, a densidade poderá ser calculada nas células presentes na entrada do domínio. Neste ponto, deve-se assumir que:

$$f_1 - f_{eq_1} = f_3 - f_{eq_3} \quad (66)$$

O que leva a:

$$f_1 = f_3 + \frac{2u_x\rho}{3} \quad (67)$$

Obtendo-se assim uma equação capaz de calcular um dos valores desconhecidos. Prossegue-se colocando o termo f_8 em evidência na Equação (64) e substituindo as Equações (64) e (67) na Equação (63).

$$f_5 = f_7 + \frac{\rho u_x}{6} + \frac{\rho u_y}{2} + \frac{(f_4 - f_2)}{2} \quad (68)$$

Por último, coloca-se em evidência o termo f_8 na Equação (63) e substituem-se as Equações (68) e (67) na Equação (63), chegando a:

$$f_8 = f_6 + \frac{\rho u_x}{6} - \frac{\rho u_y}{2} + \frac{(f_2 - f_4)}{2} \quad (69)$$

Com isso, todas as funções de distribuição inicialmente desconhecidas podem ser calculadas na entrada graças à condição de contorno de velocidade fixa.

O procedimento efetuado para a condição de contorno de pressão na saída é análogo ao demonstrado acima. A pressão é calculada com base na densidade, de acordo com a equação para gases ideais do modelo Lattice-Boltzmann (Equação (70)), apesar de seu cálculo não ser aqui necessário. Inicia-se, novamente, reescrevendo-se as Equações (51), (52) e (53), colocando em evidência as funções f_3 , f_6 e f_7 , que são as variáveis desconhecidas na saída.

$$P = \rho/3 \quad (70)$$

$$f_3 + f_6 + f_7 = \rho - (f_0 + f_1 + f_2 + f_4 + f_5 + f_8) \quad (71)$$

$$f_3 + f_6 + f_7 = -\rho u_x + f_1 + f_5 + f_8 \quad (72)$$

$$f_6 - f_7 = \rho u_y - f_2 + f_4 - f_5 + f_8 \quad (73)$$

Igualando-se as Equações (71) e (72), segue que:

$$u_x = -1 + \frac{2(f_1 + f_5 + f_8) + f_4 + f_2 + f_0}{\rho} \quad (74)$$

Assumindo que:

$$f_3 - f_{eq_3} = f_1 - f_{eq_1} \quad (75)$$

O que leva a:

$$f_3 = f_1 - \frac{2\rho u_x}{3} \quad (76)$$

Colocando-se o termo f_7 em evidência na Equação (73), e substituindo as Equações (73) e (76) na Equação (72), obtemos:

$$f_6 = f_8 + \frac{(f_4 - f_2)}{2} - \frac{\rho u_x}{6} + \frac{\rho u_y}{2} \quad (77)$$

A última variável desconhecida será obtida deixando-se o termo f_7 em evidência na Equação (72) e substituindo as Equações (76) e (77) na Equação (72).

$$f_7 = f_5 + \frac{(f_2 - f_4)}{2} - \frac{\rho u_x}{6} - \frac{\rho u_y}{2} \quad (78)$$

Com isso, os valores dos três termos na saída, inicialmente desconhecidos, podem ser calculados.

Mais uma vez, de acordo com ZOU E HE (1996), as condições de contorno de velocidade e de pressão concedem precisão de segunda ordem apenas se o valor de τ for igual a um. Para qualquer outro valor, a precisão concedida é apenas de primeira ordem.

IV.3. Conversão de Unidades

Os dados utilizados durante a simulação por meio da metodologia Lattice-Boltzmann possuem uma métrica virtual, própria do método. Para que os resultados da simulação possam ser utilizados de forma a obter informações reais sobre o sistema simulado, é necessário que haja uma forma de converter os valores originalmente obtidos em unidades

virtuais para valores em unidades métricas reais. Essa conexão entre dados reais e virtuais pode se dar de diferentes formas.

Antes de prosseguir neste tópico, deve-se ressaltar que a conversão de unidades não apenas promoverá o vínculo entre o mundo real e o virtual, mas também definirá os valores dos parâmetros “ δx ” e “ δt ”, os quais estão ligados à estabilidade e precisão do método e serão mais bem discutidos adiante.

Segundo LATT (2008), é importante que, durante a conversão da unidade real para a virtual, seja dado um passo intermediário, onde os dados reais são adimensionalizados. Isso seria importante em casos onde não há dados suficientes acerca do sistema real, podendo-se estabelecer valores característicos para o espaço e tempo, por exemplo.

Este método de conversão inicia-se com a escolha de valores característicos que possam ser relacionados com dados do problema, de forma a torná-los adimensionais. Por exemplo, supomos que, em um dado sistema formado por um tubo e um fluido de características conhecidas escoando em seu interior, sejam conhecidas a velocidade do fluido (u_{real}) e o diâmetro do tubo (l_{real}). Escolhemos então uma velocidade característica (u_0) e um comprimento característico (l_0), os quais serão relacionados com os dados reais de forma a obter os valores adimensionais. Deve-se calcular ainda o valor do tempo característico (t_0), o qual pode ser necessário futuramente para converter dados obtidos na simulação para dados reais.

$$t_0 = \frac{l_0}{u_0} \quad (79)$$

$$l_d = \frac{l_{real}}{l_0} \quad (80)$$

$$u_d = \frac{u_{real}}{u_0} \quad (81)$$

Onde l_d e u_d são, respectivamente, o comprimento e a velocidade adimensionais. Como as características do fluido são conhecidas, incluindo sua viscosidade, e sabemos que o parâmetro τ está relacionado com a viscosidade cinemática virtual, uma conexão entre as viscosidades deve ser realizada. Para isso, iremos recorrer ao número de Reynolds (Re), o qual deve possuir o mesmo valor tanto para os valores reais, quanto para os valores adimensionais e os valores virtuais.

$$Re = \frac{u_{real} l_{real}}{\nu_{real}} \quad (82)$$

$$\nu_d = \frac{u_d l_d}{Re} \quad (83)$$

A próxima etapa consiste em calcular os parâmetros δx e δt com base nos valores adimensionais obtidos e na escolha de dois valores virtuais para amarração. Normalmente, costuma-se utilizar os valores do tamanho do domínio (N), da velocidade virtual (u_{lb}), do parâmetro τ ou do número de Mach (Ma). Neste exemplo, utilizaremos o tamanho do domínio e a velocidade virtual. Caso sejam utilizadas outras variáveis, basta algebrizar as cinco equações seguintes de forma a deixar em evidência as variáveis adequadas.

$$\delta x = \frac{l_d}{N} \quad (84)$$

$$u_{lb} = \frac{u_d}{\delta x / \delta t} \quad (85)$$

Por meio de simples algebrismo pode-se colocar δt em evidência na Equação (85). Como a velocidade originalmente possui unidade de comprimento/tempo, então o valor

adimensional da velocidade é dividido por $\delta x/\delta t$ (ver Equação (85)). Analogamente, para o cálculo da viscosidade cinemática virtual, deve-se dividir o valor adimensional da viscosidade por $\delta x^2/\delta t$, visto que a viscosidade real possui unidade de comprimento²/tempo (ver Equação (86)). Uma vez obtidos os valores de ambos os parâmetros, deve-se utilizá-los para calcular o valor de Ma , da viscosidade virtual (v_{lb}) e, conseqüentemente, de τ .

$$v_{lb} = \frac{v_a}{\delta x^2/\delta t} \quad (86)$$

$$\tau = v_{lb}/c_s^2 + 1/2 \quad (87)$$

$$Ma = \frac{u_{lb}}{c_s} \quad (88)$$

Onde c_s é a velocidade do som virtual e, para o modelo D2Q9, vale $1/\sqrt{3}$. O parâmetro δx representa o quão refinado é o domínio. Quanto menor o seu valor, mais refinado será o domínio. O parâmetro δt representa a relação entre o passo de tempo do método e o tempo real. Sendo assim, quanto menor for o parâmetro, mais tempo durará a simulação. Antes de dar início a uma simulação, deve-se atentar para os valores assumidos por tais parâmetros, uma vez que, como se pode observar através das Equações (87) e (88), o número de Mach e o parâmetro τ , que são diretamente relacionados à estabilidade e precisão do método, são calculados com base nos valores assumidos por δx e δt (LATT, 2008).

Alternativamente, pode-se realizar a conversão de unidades de forma direta, ou seja, sem passar por uma etapa intermediária de adimensionalização, assim como KOOSUKUNTLA (2011) e WOLF (2006) realizaram em seus trabalhos. Com isso, a conversão se resume às seguintes equações:

$$\delta x = \frac{l_{real}}{N} \quad (89)$$

$$u_{lb} = \frac{u_{real}}{\delta x / \delta t} \quad (90)$$

$$v_{lb} = \frac{v_{real}}{\delta x^2 / \delta t} \quad (91)$$

$$\rho_{lb} = \frac{\rho_{real}}{\rho_{ref}} \quad (92)$$

Onde ρ_{lb} é a densidade calculada no método Lattice-Boltzmann, ρ_{real} é a densidade real do fluido a ser simulado e ρ_{ref} corresponde a uma densidade de referência, a qual deve ser atribuída de forma a desempenhar a conexão entre as densidades real e virtual.

Se a utilização das metodologias diretas de conversão demonstradas acima for realizada de forma paralela a números adimensionais, como o número de Reynolds, número de Weber e o número Capilar, a associação entre a simulação e o sistema real pode se tornar mais palpável, uma vez que os valores desses números adimensionais devem ser similares em ambos os mundos. Em outras palavras, deve-se analisar qual número adimensional melhor descreve o problema e então atrelá-lo a conversão direta de unidade, como foi feito com o número de Reynolds no exemplo acima (WOLF, 2006; LATT, 2008).

IV.4. Modelo Multifásico Monocomponente

Ainda tratando-se de um único componente, a metodologia Lattice-Boltzmann é capaz de simular escoamentos multifásicos, como, por exemplo, o escoamento de água nos estados líquido e gasoso, ambos coexistindo e interagindo entre si.

Nesta parte do trabalho foi implementado o modelo desenvolvido por SHAN e CHEN (1993, 1994). Apesar deste não ser o mais realista e consistente modelo com relação ao tratamento das equações de estado, responsável por garantir a preservação da física relacionada ao equilíbrio de fases, ele se mostra bem versátil e capaz de reproduzir resultados satisfatórios.

A principal diferença entre o modelo até então utilizado no trabalho, para simulação de escoamentos monofásicos de um único componente, e o modelo desenvolvido por Shan e Chen, para simulação de escoamentos multifásicos de um único componente, reside no fato deste levar em consideração a força atrativa entre as moléculas.

IV.4.1. Forças de Atração

Como visto na análise da equação de van der Waals na Seção II.1.4, para que seja possível reproduzir a separação de fases é necessário levar em conta as interações de atração interpartículas a curta distância. Neste estudo serão consideradas apenas as interações com as vizinhanças mais próximas, ou seja, apenas as interações com as partículas de fluido adjacentes. Para isso, será utilizado um modelo desenvolvido por SHAN e CHEN (1993, 1994) onde uma função F , que representa as forças de interação interpartículas, é introduzida no sistema. A função F é computada em cada célula como uma força externa função das propriedades das células vizinhas. Essa força é utilizada para modificar o valor do momento na função de equilíbrio da célula, através de um ganho ou perda local de momento. Apesar disso, a quantidade de momento global do sistema é conservada, permanecendo exatamente a mesma (MARTYS e CHEN, 1996).

De acordo com o modelo desenvolvido por SHAN e CHEN (1993,1994), que será utilizado como base deste trabalho, a função F é definida como:

$$F(x, t) = -G\psi(x, t) \sum_{a=1}^8 w_a \psi(x + e_a \Delta t, t) e_a \quad (93)$$

Onde G é a força de interação, w_a é um vetor de pesos, ψ é o potencial de interação e e_a o vetor de velocidades microscópicas, utilizado desde o início no código.

A magnitude de G controla a intensidade da força da interação entre as partículas e suas partículas vizinhas, enquanto seu sinal determina se a força é de atração, sinal negativo, ou repulsão, sinal positivo (SHAN e CHEN, 1993). Como só iremos levar em consideração as forças atrativas, iremos utilizar G sempre com sinal negativo.

O vetor w_a é responsável por aplicar pesos à força de interação de acordo com a localização das partículas vizinhas. Peso 1/9 é atribuído a partículas de fluido nas posições 2, 3, 4 e 5, enquanto 1/36 é atribuído a partículas nas posições 6, 7, 8 e 9.

O potencial de interação pode possuir diversas formas. Algumas delas seguem listadas abaixo:

$$\psi(\rho) = \rho_0 \left[1 - e^{\left(\frac{-\rho}{\rho_0}\right)} \right], \quad (94)$$

$$\psi(\rho) = \rho, \quad (95)$$

$$\psi(\rho) = 1 - e^{(-\rho)}, \quad (96)$$

$$\psi(\rho) = \psi_0 e^{\left(\frac{-\rho_0}{\rho}\right)}. \quad (97)$$

A Equação (97) será a utilizada neste trabalho. Para esta determinada expressão do potencial de interação, ρ representa a densidade na célula e Ψ_0 e ρ_0 são constantes arbitrárias, as quais, baseando-se no livro de SUKOP e THORNE JR (2006), serão atribuídos os valores 4 e 200, respectivamente. De acordo com SHAN e CHEN (1994), a escolha dessa função para o potencial de interação fará o comportamento do modelo ser compatível com o de um processo isotérmico.

Observando-se a Equação (93) e a expressão adotada para o potencial de interação, nota-se que a força de atração é diretamente proporcional ao termo “ $\exp(-\rho_0/\rho)$ ”. Com isso, pode-se concluir que quanto maior for a densidade de uma célula e de suas vizinhanças, maior será a força de atração nessa região. Macroscopicamente falando, regiões com presença de fase líquida experimentarão maior força coesiva que com fase vapor, o que leva ao fenômeno de tensão superficial, o qual será discutido mais a frente.

O código implementado em MATLAB® para a força de atração encontra-se disponível no Apêndice B. Como a força de atração é imposta ao modelo como uma força externa, assim como a gravidade, essa força é computada na velocidade de equilíbrio.

IV.4.2. As Equações de Estado e o Modelo Lattice-Boltzmann

Considerando a expressão utilizada para o cálculo da força de atração, Equação (97), HE e DOOLEN (2002) chegaram a seguinte equação de estado para o modelo Lattice-Boltzmann:

$$P = \rho RT + \frac{GRT}{2} [\psi(\rho)]^2 \quad (98)$$

Nota-se que a equação exposta possui uma estrutura parecida com a da equação de van der Waals. O primeiro termo do lado direito corresponde à lei dos gases ideais. O segundo termo leva em consideração as forças de atração interpartículas (para $G < 0$), sendo responsável por uma redução na pressão. Caso não se leve em consideração as forças de atração, o segundo termo da equação torna-se nulo e, assim, a equação de estado se resume à equação dos gases ideais. O produto RT equivale a uma constante de valor $1/3$, ou seja, o quadrado da velocidade do som.

A equação proposta por HE e DOOLEN (2002) fornece uma relação entre pressão e densidade similar a uma isoterma em sistemas PVT, onde o parâmetro G exerce uma função similar à da temperatura em relações PVT. Apesar dessas coincidências, deve-se ressaltar que a equação cinética de Lattice-Boltzmann não conta com termos responsáveis pela conservação de energia (YUAN e SHAEFER, 2006; SHAN e CHEN, 1994). Assim, a correspondência direta entre o método Lattice-Boltzmann e um processo isotérmico não pode ser estabelecida (WOLF, 2006). O comportamento citado acima pode ser melhor visualizado na Figura (XVI), onde uma série de valores de densidade são inseridos na equação de estado e plotados para diferentes valores de G , gerando um efeito de “isotermas”.

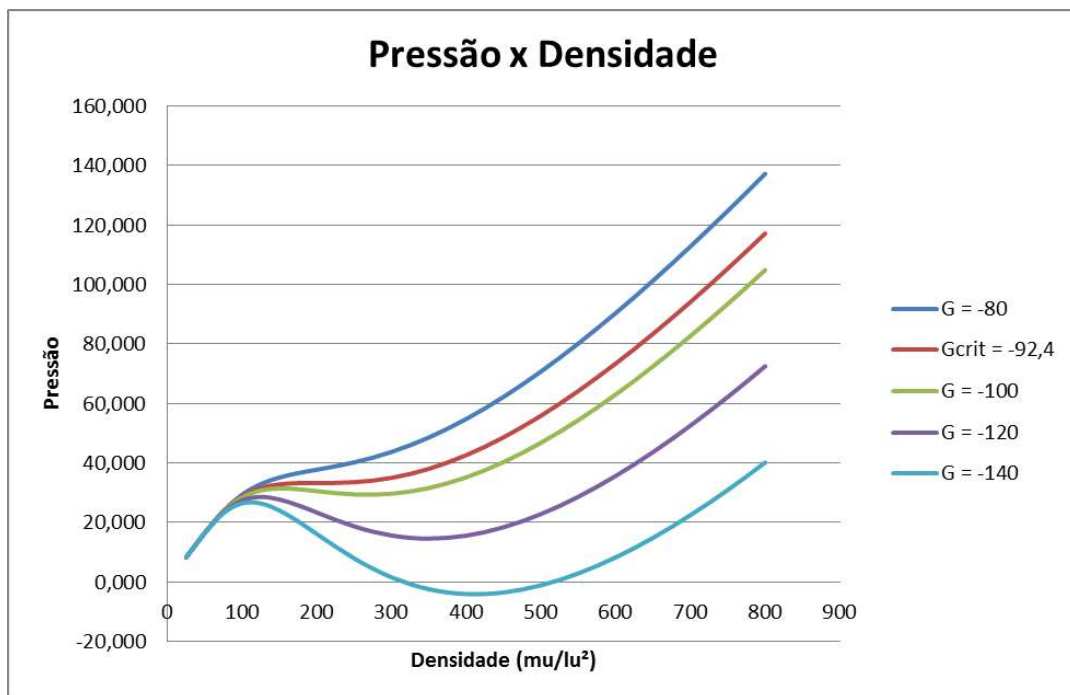


Figura xvi Isotermas relativas à equação de estado desenvolvida por SHAN e CHEN (1993).

Tal como nas relações PVT clássicas, para que possa ser visualizada separação de fases, é necessário que o valor de G seja menor que um valor de G crítico, análogo à temperatura crítica nas isothermas. Para que esse cálculo seja realizado, devemos lembrar o conceito termodinâmico de temperatura crítica. Nesse ponto, a isoterma apresenta um ponto de inflexão, o qual é caracterizado, no caso em questão, pelas derivadas primeira e segunda da pressão em relação à densidade sendo iguais a zero. Com isso, segue abaixo uma sequência de cálculos para obtenção de G crítico e ρ crítico, o qual representa uma densidade crítica, localizada na região de instabilidade da Figura (XVI).

$$\frac{\partial P}{\partial \rho} = \frac{1}{3} + \frac{2\psi_0\rho_0 G_{crit}}{6} \frac{1}{\rho^2} e^{-\frac{2\rho_0}{\rho}} = 0 \quad (98)$$

$$G_{crit} = \frac{-\rho_0 e^{-2}}{\psi_0^2} \quad (99)$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2} = \frac{2\psi_0\rho_0 G}{6} \times \left[\frac{-1}{\rho^3} + \frac{2\rho_0}{\rho^4} \right] \times e^{-\frac{2\rho_0}{\rho}} = 0 \quad (100)$$

$$\rho_{crit} = \rho_0 \quad (101)$$

IV.4.3. A Interação Fluido-Sólido

Para que seja possível a simulação de fluidos em meios contendo superfícies sólidas, como nos meios porosos em reservatórios de petróleo, será necessária a introdução de uma nova função responsável por calcular a interação entre o fluido e o sólido. Para isso, será utilizado o modelo desenvolvido por MARTYS e CHEN (1996), o qual funciona de forma análoga ao modelo de interação interpartículas utilizado para simular separação de fases

(SUKOP e THORNE JR, 2006). Essa nova força a ser computada será referenciada como força de adesão e terá a seguinte forma:

$$F_{ads}(x, t) = -G_{ads}\psi(x, t) \sum_{a=1}^8 w_a s(x + e_a \Delta t) e_a \quad (102)$$

Nessa função, o termo G_{ads} representa a força de interação com a superfície sólida, possuindo valores positivos para fluidos não molháveis (*nonwetting fluids*) e negativos para fluidos molháveis (MARTYS e CHEN, 1996). O vetor w_a possui o mesmo significado do utilizado na função de interação partícula-partícula. A função ψ também possuirá a mesma forma utilizada anteriormente, apesar de MARTYS e CHEN (1996) originalmente utilizarem a função com o formato da Equação (95). A variável s é Booleana, podendo assumir o valor um ou zero, dependendo se a célula presente em $(x+e_a\Delta t)$ é ou não um nó sólido, respectivamente.

De acordo com o valor selecionado para o parâmetro G_{ads} , é possível determinar qual fluido, em casos multicomponentes, irá molhar a superfície de forma preferencial (MARTYS e CHEN, 1996). Da mesma forma, a modificação do parâmetro é responsável pela variação do ângulo de contato entre o líquido e a superfície em casos multifásicos de um só componente, sendo possível simular toda a extensão de ângulos, de 0 a 180 graus (SUKOP e THORNE JR, 2006). A fim de calcular o valor de G_{ads} , é possível estabelecer uma relação com o produto entre G e ψ . Segundo SUKOP e THORNE JR (2006), para simular um ângulo de contato de 0° entre líquido e a superfície sólida, basta tomar o valor de G_{ads} como o produto entre a força de interação (G) e o potencial de interação da fase líquida ($\psi_{líq}$). Analogamente, para que sejam obtidos ângulos de contato de 180° e 90° , basta igualar a força de interação partícula-sólido ao produto da força de interação partícula-partícula com, respectivamente, o potencial de interação do vapor (ψ_{vap}) e à média entre $\psi_{líq}$ e ψ_{vap} .

O código referente à implementação da força de adesão encontra disponível no Apêndice B. Assim como a força de interação partícula-partícula, a força agora em questão também é inserida no modelo como uma força externa.

IV.5. Modelo Multifásico Multicomponente

Nesta seção será visto como adaptar o método Lattice-Boltzmann de forma a torná-lo capaz de simular escoamentos envolvendo mais de um componente. Esta etapa será de suma importância, visto que possibilitará a utilização do modelo para simular a interação entre água e óleo em um meio poroso. Para isso, será utilizado como base o modelo desenvolvido por SHAN e CHEN (1993), primeiro modelo a ser capaz de simular a interação entre fluidos imiscíveis com massas moleculares diferentes.

A partir de agora, toda a rotina até então utilizada deverá ser realizada separadamente para cada componente da mistura, sendo necessárias apenas algumas modificações. As matrizes de velocidade macroscópica e densidade macroscópica continuam sendo calculadas da mesma forma que anteriormente.

$$\rho_{\sigma} = \sum_{a=0}^8 f_a^{\sigma} \quad (103)$$

$$u_x^{\sigma} = \frac{1}{\rho_{\sigma}} \sum_{a=0}^8 e_{x_a} f_a^{\sigma} \quad (104)$$

O índice σ simboliza o componente em questão. A componente da velocidade no eixo y continua sendo calculada de forma análoga à componente do eixo x . O mesmo vale para o cálculo das velocidades que serão discutidas a seguir. A velocidade de equilíbrio, que antes era fundamentada na velocidade macroscópica, passará a ser baseada em uma velocidade média da mistura, ou velocidade do *bulk*, cuja fórmula encontra-se na Equação (105). Esta nova velocidade é calculada com base no momento, na densidade macroscópica e no parâmetro τ , o qual também passa a assumir um valor para cada componente. A função de equilíbrio, por sua vez, será calculada separadamente para cada componente, utilizando, porém, a velocidade de equilíbrio baseada na velocidade do *bulk*:

$$u_x^{bulk} = \frac{\sum_{\sigma=1}^i \sum_{a=0}^8 e_{x_a}^\sigma f_a^\sigma / \tau_\sigma}{\sum_{\sigma=1}^i \rho_\sigma / \tau_\sigma} \quad (105)$$

$$u_{x_\sigma}^{eq} = u_x^{bulk} + \frac{\tau_\sigma F_{ext_\sigma}}{\rho_\sigma} \quad (106)$$

$$f_{eq_a}^\sigma(x, t) = w_a \rho_\sigma \left[1 + 3 \left(e_{x_a} u_{x_\sigma}^{eq} + e_{y_a} u_{y_\sigma}^{eq} \right) + \frac{9}{2} \left(e_{x_a} u_{x_\sigma}^{eq} + e_{y_a} u_{y_\sigma}^{eq} \right)^2 - \frac{3}{2} \left((u_{x_\sigma}^{eq})^2 + (u_{y_\sigma}^{eq})^2 \right) \right] \quad (107)$$

Finalizando a rotina principal, as etapas de advecção e colisão devem ser realizadas da mesma forma que antes, só que separadamente para cada componente. No cálculo da velocidade de equilíbrio, a variável F_{ext} representa as possíveis forças externas a serem adicionadas no sistema, dentre elas, as forças de interação interpartículas e as forças de adesão.

Ambas as forças citadas acima também passarão a ser calculadas separadamente para cada componente.

$$F_\sigma = -G \psi_\sigma(x, t) \sum_{a=1}^8 w_a \psi_{\sigma'}(x + e_a \Delta t, t) e_a \quad (108)$$

$$F_{ads_\sigma} = -G_{ads_\sigma} \psi_\sigma(x, t) \sum_{a=1}^8 w_a s(x + e_a \Delta t) e_a \quad (109)$$

Nas Equações (108) e (109), os termos e_a , s e w_a continuam possuindo os mesmos significados explicados na seção anterior.

O termo G continua referindo-se a força de interação interpartículas, todavia, agora diz respeito à interação entre as partículas de um componente com as partículas do outro componente.

A função ψ , apesar de ainda possuir o mesmo significado, passará a ser calculada da forma demonstrada na Equação (110), por simplicidade. Os subscritos σ e σ' representam, respectivamente, o componente em questão e o outro componente da mistura. Sendo assim, a função ψ fora do somatório será calculada com base no componente em questão, no sítio atual, enquanto a função dentro do somatório será calculada com relação ao outro componente, nos sítios adjacentes.

$$\psi_{\sigma}(x, t) = \rho_{\sigma}(x) \quad (110)$$

O termo G_{ads} continua sendo a força de interação entre as partículas e as superfícies sólidas, porém, seu cálculo foi modificado. De acordo com SUKOP e THORNE JR (2006), como G_{ads} é uma força de atração, portanto, possui sinal negativo, quanto menor for seu módulo para um componente na mistura, maior será a tendência deste “molhar” a superfície.

O ângulo de contato entre o composto σ e as superfícies pode ser estimado com base em uma adaptação da Lei de Young, onde a tensão superficial de cada composto é substituída por seu respectivo G_{ads} e a tensão interfacial entre os compostos é substituída por G , a força de interação entre os dois compostos (SUKOP e THORNE JR, 2006), de modo que:

$$\cos \theta_{\sigma} = \frac{G_{ads\sigma'} - G_{ads\sigma}}{G} \quad (111)$$

Aproximações capazes de estimar o ângulo de contato de forma mais precisa na simulação multicomponente podem ser encontradas nos estudos realizados por HUANG et al. (2007).

Abaixo, na Figura (XVII), apresenta-se um diagrama de blocos onde a rotina apresentada neste capítulo é sintetizada visando promover melhor visualização acerca das modificações implementadas.

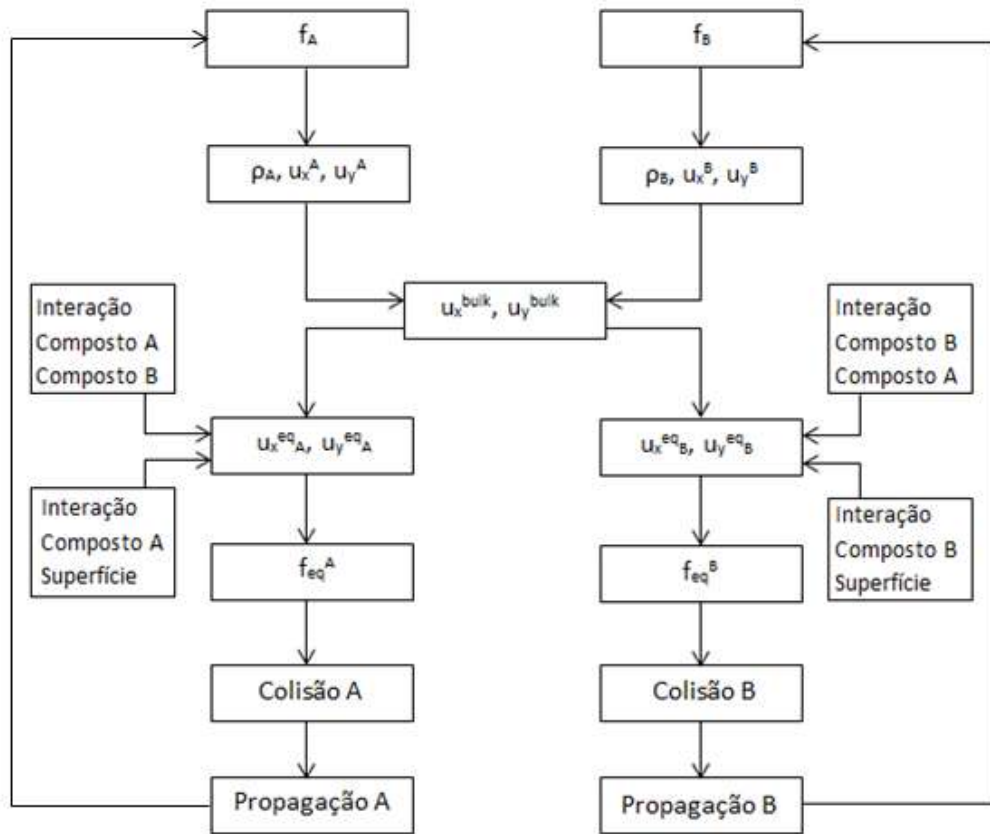


Figura xvii Rotina realizada para a simulação do escoamento multifásico multicomponente.

Adicionalmente, o código escrito em MATLAB® para o modelo multicomponente segue em anexo no Apêndice C.

V. Resultados

V.1. Escoamento de Poiseuille

A fim de obter melhor entendimento a respeito da precisão no método Lattice-Boltzmann, será utilizado o escoamento de Poiseuille juntamente com a variação de diversos parâmetros, o que possibilitará a visualização do efeito de cada um sobre a variação de precisão.

O escoamento de Poiseuille, que é um caso simples de ser simulado, consiste basicamente em duas placas paralelas com um fluido escoando entre elas. Devido aos efeitos de não escorregamento nas paredes, o fluido tende a, com o avanço entre as placas, adquirir um perfil de velocidade parabólico, onde a velocidade rente às paredes é zero, tendendo a aumentar quadraticamente em direção ao centro do canal, onde a velocidade será máxima, no caso de escoamento laminar, como exibido na Figura (XVIII)

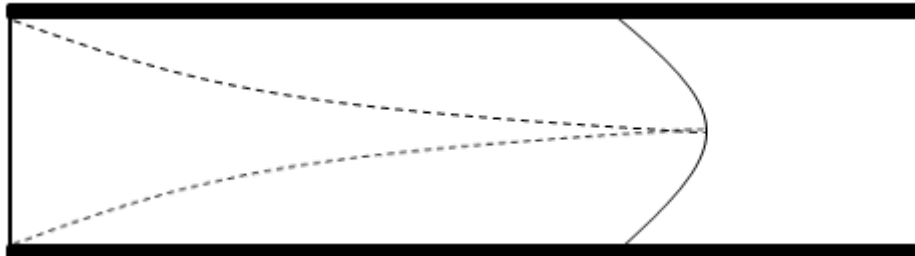


Figura xviii Desenvolvimento do perfil parabólico em escoamento entre duas placas.

Na Figura (XVIII), as linhas pontilhadas representam as camadas limites hidrodinâmicas formadas sobre cada placa. O local de encontro entre ambas é definido como o comprimento de entrada, ocorrendo nele plena formação do perfil de velocidade parabólico do escoamento.

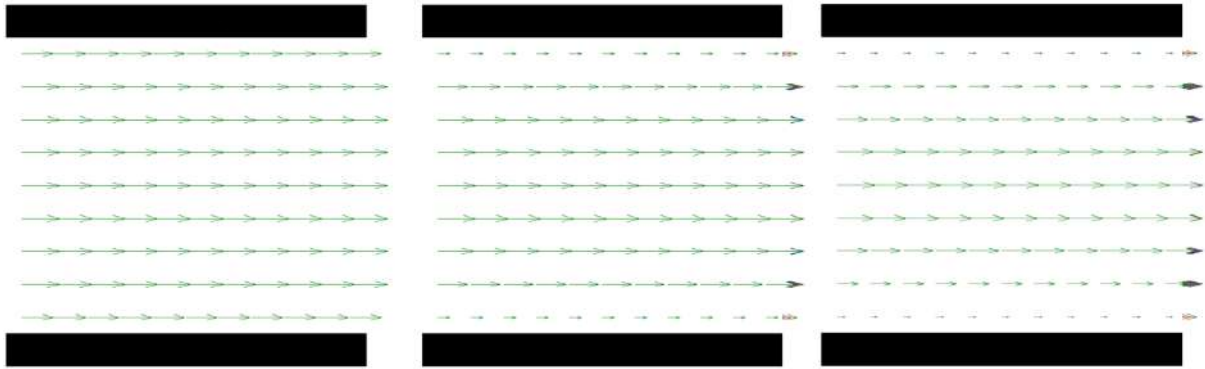


Figura xix Evolução do perfil parabólico em uma simulação.

Para simular esse caso, foram utilizadas condições de contorno periódicas na entrada do fluido, à esquerda do domínio, e na saída, à direita, visto que o interesse aqui não é observar o comprimento de entrada. Para as placas localizadas nas partes superior e inferior do domínio, foram utilizadas condições de contorno *bounceback*. Como força motriz do sistema, adicionou uma força externa calculada a partir da equação de Navier-Stokes, após serem levadas em conta algumas suposições referentes ao sistema em questão.

O primeiro estudo visou averiguar o efeito da variação do número de Mach na precisão do método. Para isso, fixou-se o parâmetro τ e o número de Reynolds com os valores de, respectivamente, 0,6 e 20. Aumentou-se gradativamente o número de células que ditam a distância entre as placas e analisou-se o comportamento do erro da velocidade máxima simulada com base na velocidade máxima teórica, como ilustrado pela Figura (XX).

O aumento do número de células entre as placas, mantendo-se constante a distância física entre elas, gera uma diminuição do parâmetro δx . No problema simulado, o parâmetro δt está amarrado ao parâmetro δx através do valor de τ pré-determinado, uma vez que a viscosidade cinemática real do fluido não foi variada.

$$\tau = \frac{3\nu\delta t}{\delta x^2} + \frac{1}{2} \quad (112)$$

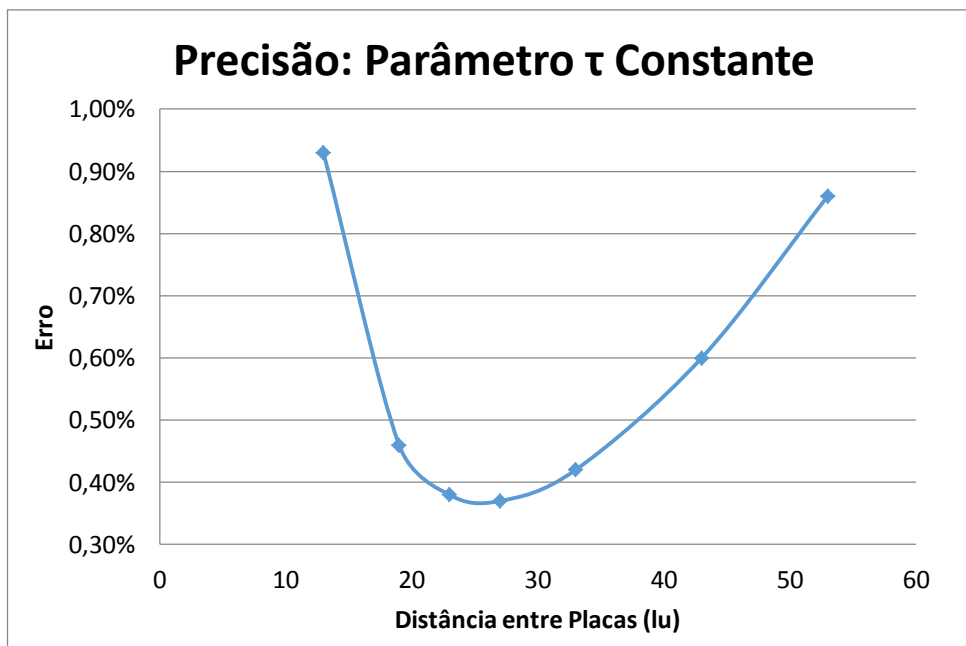


Figura xx Comportamento do erro conforme refinamento da geometria quando mantido τ constante.

Como pode ser observado na Equação (112), a redução do parâmetro δt será proporcional à redução do parâmetro δx ao quadrado. Sabendo-se, das Equações (85) e (88), que o número de Mach é proporcional a $\delta t/\delta x$ e que a velocidade máxima do escoamento foi mantida constante, pode-se afirmar que, no problema simulado, conforme se reduziu o parâmetro δx , e conseqüentemente reduziu-se o parâmetro δt de forma quadrática, o número de Mach tendeu a diminuir.

O efeito observado na Figura (XX), porém, não foi o esperado. Pode-se constatar que quando a distância entre as placas chega a aproximadamente trinta células, e um número de Mach com valor aproximado de 0,04, o erro começa a crescer. Como discutido na Seção III.5, o método Lattice-Boltzmann consegue reproduzir o comportamento das equações de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis quando os valores do número de Mach forem muito inferiores a um. Sendo assim, era esperado, a princípio, que o erro continuasse a diminuir conforme fosse aumentado o número de células entre as placas.

No site PALABOS.ORG, página de um *software* aberto na internet baseado no método Lattice-Boltzmann, é mencionada a possibilidade de ocorrerem problemas similares ao ocorrido acima. O trabalho com valores muito pequenos para o número de Mach tem

efeitos diretos sobre a função de equilíbrio. Como pode ser visto na Equação (58), a função de equilíbrio contém, dentro dos colchetes, o número 1 somado a termos dependentes da velocidade das partículas. Essas velocidades tornam-se cada vez menores conforme o número o número de Mach diminui. Sendo assim, quando tivermos números de Mach muito pequenos, teremos velocidades pequenas e, conseqüentemente, esses termos dependentes delas serão bem inferiores a 1, o que, dependendo do número de algarismos significativos considerados pelo computador para realizar os cálculos, desencadeará erros de arredondamento a partir da função de equilíbrio.

Adicionalmente, a utilização do parâmetro δt com valores muito pequenos desencadeia uma simulação mais demorada, exigindo um maior número de passos de tempo. Dessa forma, com baixos valores para o número de Mach e para o parâmetro δt , o erro de arredondamento gerado na função de equilíbrio será replicado durante um maior número de passos de tempo, tornando o resultado final ainda mais afastado do desejado (BOYCE e DIPRIMA, 2001), o que explica o ocorrido no exemplo simulado.

O problema descrito pode ser amenizado através de uma metodologia desenvolvida por CHOPARD (2008), na qual, em linhas gerais, o cálculo da função de equilíbrio é dividido em duas partes visando evitar a perda de informações numéricas em virtude de arredondamentos de cálculo realizados pelo computador, a qual poderá ser aplicada em trabalhos futuros.

Tendo em vista o efeito do parâmetro δt sobre o estudo anterior, foi realizada uma nova série de simulações com δt fixado em 0,0033. Nelas, o número de Reynolds foi fixado em 100 e o parâmetro τ foi deixado aberto para variações.

Como pode ser observado na Figura (XXI), desta vez o erro tendeu a ser atenuado conforme o domínio era refinado, sendo possível reduzir o erro até cerca de 0,3%. Por outro lado, a redução do erro dá-se de forma elevada no início e, depois de já bastante refinado o domínio, ocorre em menor proporção. Isso demonstra que a malha alcançou um ponto em que seu refino desencadeará melhorias praticamente inexpressivas na precisão do método, apesar dos aumentos expressivos no custo computacional.

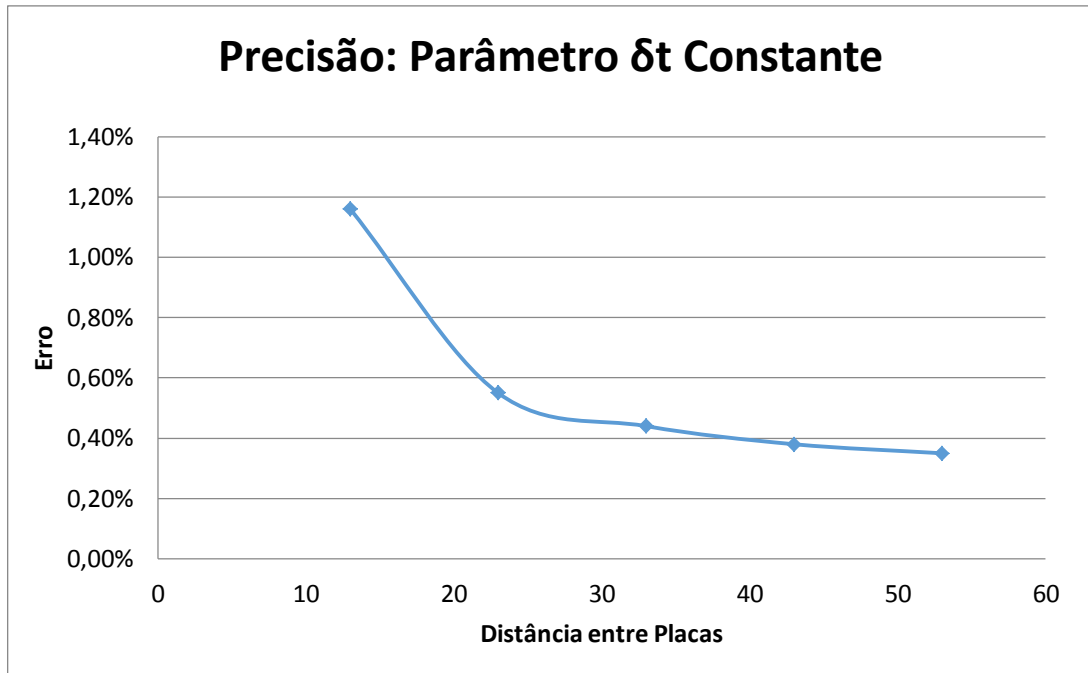


Figura xxi Comportamento do erro conforme refinamento da geometria quando mantido ' δt ' constante.

Alternativamente, pode-se justificar o comportamento da curva a partir dos parâmetros que governam o método. Sendo assim, pode-se dizer que a variação assintótica da precisão, demonstrada na Figura (XXI) advém do fato do parâmetro τ e do número de Mach crescerem conforme redução do parâmetro δx . Se por um lado o aumento do parâmetro τ , até próximo do valor 1, tende a elevar a precisão do método, o aumento do número de Mach, por outro lado, tende a reduzir sua precisão, gerando instabilidades e até colapso do método para valores próximos de 1. Mesmo com o aumento de ambos simultaneamente, pode-se concluir que, a partir de certo ponto, o aumento do número de Mach passa a sobressair sobre o aumento do parâmetro τ , fazendo com que o refino do domínio deixe de proporcionar reduções no erro apresentado pelo método.

V.2. Escoamento Cruzado ao redor de um Cilindro

Com o intuito de testar o potencial do modelo programado e avaliar a consistência de seus resultados, alguns casos diversos foram selecionados e simulados. Um desses casos escolhidos consiste no escoamento externo cruzado através de um cilindro.

O sistema inicializado consiste em um domínio com cem unidades de rede de altura e quatrocentas unidades de comprimento, onde duas placas planas sólidas foram inseridas nas extremidades superior e inferior e um cilindro de diâmetro igual a vinte e seis unidades de rede foi inserido exatamente no centro do eixo y e com um deslocamento positivo no eixo x de noventa unidades de rede em relação à entrada do domínio. As condições de contorno utilizadas na entrada e na saída do domínio foram, respectivamente, a de velocidade e a de pressão. Na primeira, programou-se, baseando-se na resolução das equações de Navier-Stokes para o escoamento de Poiseuille, a velocidade com perfil parabólico, onde a velocidade máxima virtual, ou seja, no centro da parábola, seria 0,05 (lattice unit²/timestep). Na saída, a densidade foi ajustada para 0,9, uma vez que a densidade do fluido em escoamento cruzado foi ajustada para 1, o que garante uma queda de pressão conforme deslocamento no eixo x . Por último, a viscosidade cinemática real foi considerada igual a da água ($10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$) e o número de Reynolds foi ajustado para 100. Os demais parâmetros foram calculados com base nos dados inseridos e citados acima.

Após rodar o programa por cerca de quinhentos passos de tempo, o sistema estabilizou-se com a forma demonstrada na Figura (XXII).

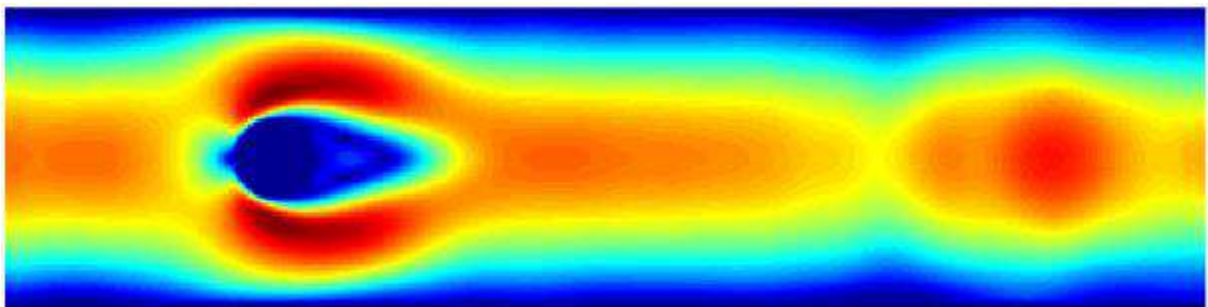


Figura xxii Perfil de velocidade de escoamento cruzado através de um cilindro.

Na Figura (XXII), as cores simbolizam o valor absoluto do vetor velocidade calculado a partir de suas componentes no eixo x e no eixo y. Quanto mais escuro o vermelho, maior a velocidade e quanto mais escuro o azul, menor a velocidade.

Analisando-se a Figura (XXII), nota-se, na entrada, um gradiente de velocidade em direção ao centro do eixo y do domínio gerado pela condição de contorno de entrada, a qual pré-estabelecia a velocidade de entrada com perfil parabólico. Na frente do cilindro, onde o fluido choca-se primeiro a ele, é possível notar uma redução na velocidade, o que caminha juntamente com o aumento de pressão nessa região. Sabe-se que, conforme o fluido escoar ao redor do cilindro, primeiramente ocorre um gradiente negativo de pressão acompanhado do aumento da velocidade e, após certo ponto, o gradiente de pressão torna a crescer, desacelerando o fluido. Em um dado ponto, conhecido como ponto de separação, onde o fluido não possui momento suficiente para superar o gradiente positivo de pressão (INCROPERA et al., 2008), ele se “descola” do cilindro, gerando um efeito que, na figura, é representado por uma cauda azul saindo de trás do cilindro. Após esse fenômeno, o fluido em alta velocidade que escoava sobre a camada limite torna a se encontrar, voltando a reproduzir um perfil parecido com o parabólico na entrada.

Deslocando-se o cilindro levemente para cima, de forma a evitar a simetria no eixo y, um fenômeno diferente pode ser observado (ver Figura (XXIII)).

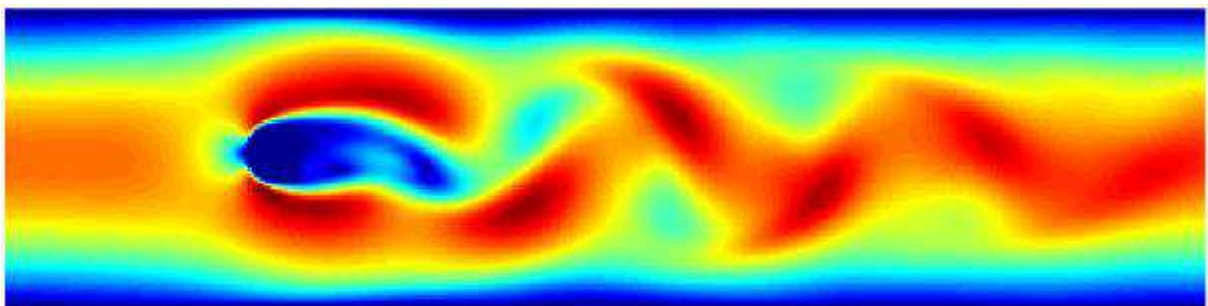


Figura xxiii Formação das esteiras de Von Kármán.

Após cerca de três mil passos de tempo, um conjunto de vórtices começa a se formar atrás do cilindro, resultado da diferença de velocidade no topo e em baixo do cilindro, o que

faz com que o fluido adquira caráter rotacional. Este fenômeno é conhecido como as esteiras de Von Kármán.

Por último, tentou-se aumentar o número de Reynolds, visando descobrir até que faixa o método continua estável. Simulações envolvendo números de Reynolds iguais a 200 e 300 foram bem sucedidas. Quando tentou-se simular um escoamento com número de Reynolds igual a quatrocentos, tornou-se difícil ajustar os parâmetros de forma a conferir estabilidade ao modelo. Nessa faixa de número de Reynolds, o número de Mach dificilmente não atinge 0,3, o que repercute na estabilidade do método devido ao limite de compressibilidade.

V.3. Equilíbrio Líquido-Vapor

A separação de fases pode ser simulada, de forma simples, inicializando-se um domínio com condições de contorno periódicas em todas as suas extremidades e preenchido por fluido com densidade igual à densidade crítica, localizada na região instável da equação de estado. Ao adicionar-se uma pequena perturbação aleatória à densidade, na ordem de 10^{-3} μ , gera-se o efeito visualizado na Figura (XXIV). O sistema, que inicialmente era composto por uma única fase, separa-se nas fases líquido, na cor vermelha, e vapor, na cor azul. Após a separação completa, as gotas de líquido tendem a coalescer e formar uma única gota com o formato esférico devido aos efeitos de tensão superficial.

A equação de estado apresentada na Seção IV.4.2, apesar de conseguir reproduzir bem o fenômeno de separação de fases, possui diversas limitações. Como se pode observar na Figura (XVI), a derivada da pressão em relação à densidade na região de fase líquida, de maior densidade, é menor que na região de fase vapor, de menor densidade, ou seja, a equação de estado informa que o líquido é mais compressível que o vapor, o que representa uma inconsistência física. Outro obstáculo na utilização da equação de estado em questão reside no fato da existência de um campo de velocidades sem significado físico na interface líquido-vapor, que pode ser observado na Figura (XXV), na qual foram reproduzidos os

vetores resultantes das velocidades macroscópicas no eixo x e no eixo y em um domínio onde existe uma gota de líquido envolta por vapor do mesmo componente.

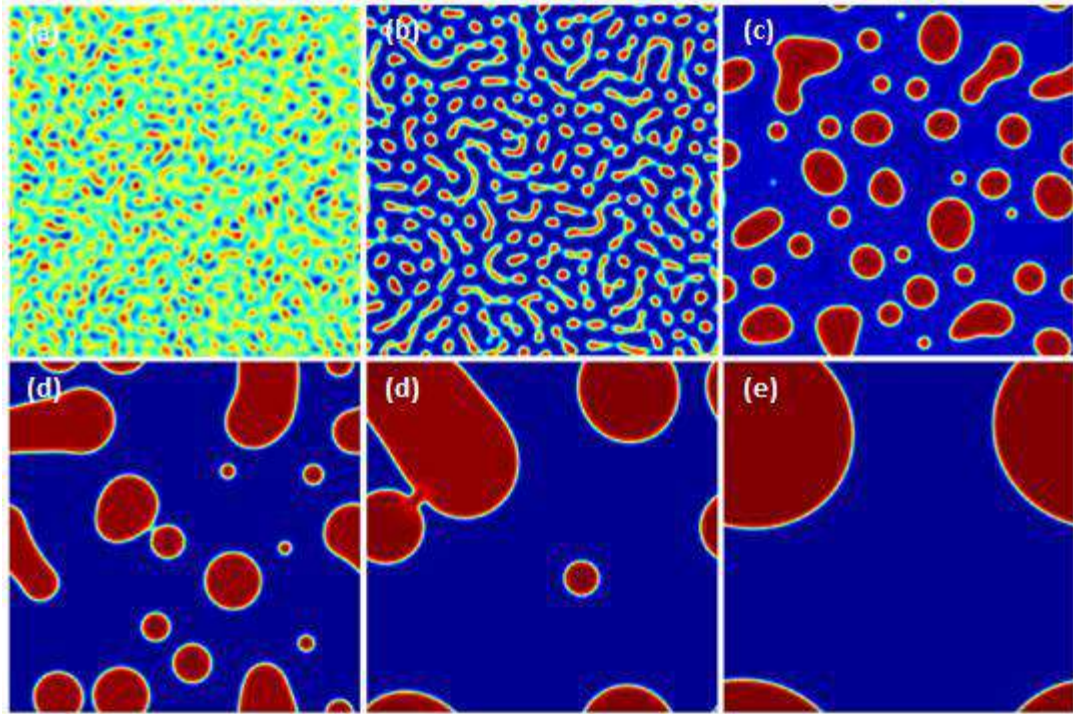


Figura xxiv Evolução da separação líquido-vapor.

É importante que esse fenômeno numérico seja reduzido ao máximo, uma vez que a metodologia Lattice-Boltzmann possui um de seus pilares no pequeno número de Mach. Dependendo da simulação, essas correntes na interface podem chegar próximo ao limite de compressibilidade, tornando a simulação instável. Um exemplo da intensificação dessas velocidades se dá mediante elevadas razões entre as densidades das fases líquido e vapor. No mundo real, é comum que a razão entre densidades de ambas as fases, líquido e vapor, de um mesmo composto atinja valores na base de 100:1. Com a equação de estado utilizada aqui, razões na base de 40:1 são suficientes para que os vetores na interface assumam valores capazes de ultrapassar os limites do método, levando a simulação à instabilidade. Para essa equação de estado, o parâmetro G atua de forma semelhante à temperatura em relações PVT, ou seja, o aumento do módulo de G , quando o parâmetro possuir valor negativo, gera a mesma consequência que a redução de temperatura em escala subcrítica: o

aumento da razão entre densidades das fases formadas. Este efeito do aumento do módulo de G sobre a variação da densidade na interface líquido vapor pode ser observado na Figura (XXVI). Tendo em vista tal efeito, conforme G adquirir valores mais negativos, maior será a instabilidade do método.

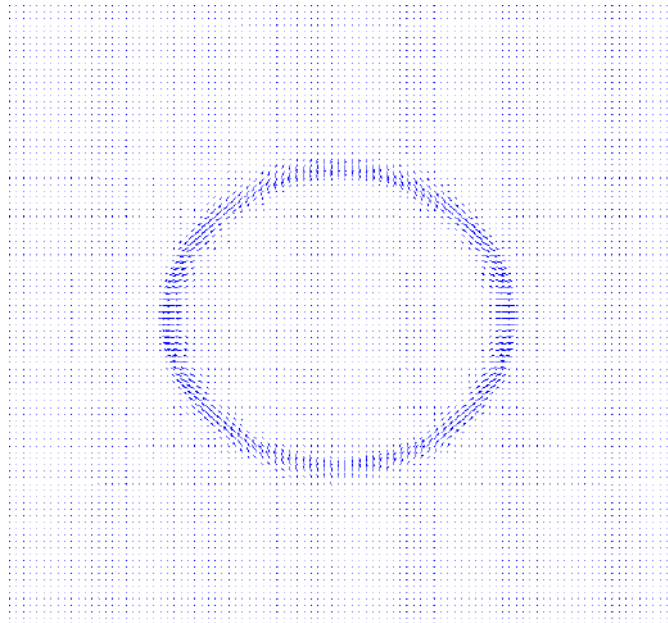


Figura xxv Vetores de velocidade discrepantes na interface líquido-vapor.

Modificando-se a forma da função ψ , diferentes equações de estado podem ser obtidas. A partir de manipulações do potencial de interação é possível adaptar equações de estado conhecidas, como van der Waals e Peng-Robinson ao modelo Lattice-Boltzmann. Por simplicidade, costuma-se utilizar o potencial de interação na forma apresentada por SHAN e CHEN (1994), porém, é válido observar que a aplicação das equações de estado cúbicas ao modelo é capaz de torna-lo bem mais estável, tal como criar uma relação com a temperatura e tornar o modelo independente do parâmetro G . Utilizando-se equações de estado mais elaboradas é possível que a razão entre as densidades das fases atinja valores superiores a 1000:1 sem que ocorram instabilidades (YUAN e SHAEFER, 2006). As adaptações do modelo às equações de estado cúbicas são claramente demonstradas por YUAN e SHAEFER (2006), podendo ser utilizadas para estudos futuros.

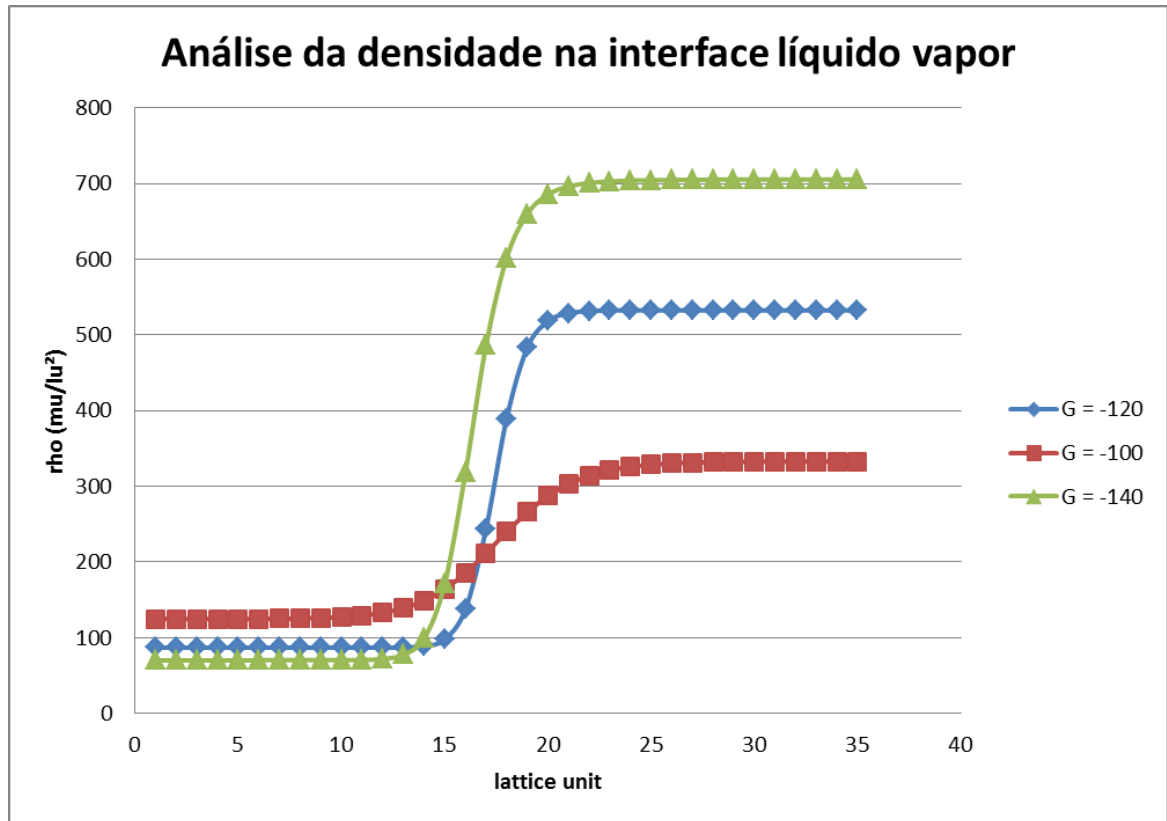


Figura xxvi Variação da densidade na interface líquido-vapor.

Quanto à interação entre as partículas fluidas e as superfícies sólidas, foi realizado um pequeno grupo de simulações variando-se o parâmetro G_{ads} , de forma a validar a sua relação com a molhabilidade dos fluidos.

Na Figura (XXVII), pode-se observar o resultado das simulações. Inicialmente, todos os domínios foram inicializados da mesma forma: Duas paredes sólidas, uma na parte superior e outra na parte inferior, uma porção de líquido no meio, representado pela cor vermelha, e vapor nas laterais, caracterizado pela cor azul. Nota-se que, com a redução do módulo da força de interação com a superfície sólida, ocorreu o aumento do ângulo de contato do líquido com a superfície, fazendo com que o vapor fosse gradualmente molhando a superfície de forma preferencial.

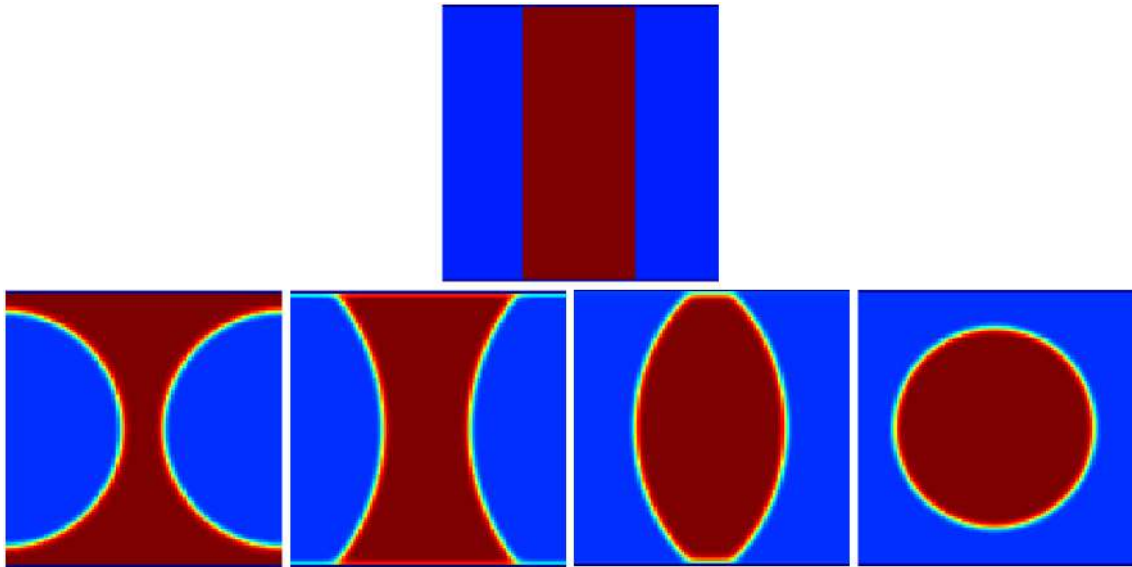


Figura xxvii Simulações com aumento do ângulo de contato entre o líquido e a superfície, da esquerda para a direita.

V.4. Gotejamento

Assim como as simulações realizadas envolvendo o escoamento através de um cilindro, algumas simulações de gotas em queda foram realizadas visando analisar se a física envolvida no método está compatível com a física do mundo real.

Para isso, foi inicializado um domínio com 300 unidades de rede de altura e 125 unidades de rede de comprimento, onde a parte superior foi preenchida por um fluido na fase gasosa e a parte inferior pelo mesmo fluido na fase líquida. Na base inferior do domínio foi inserida uma fina superfície sólida com uma abertura no seu centro. O parâmetro responsável pela adesão do fluido à superfície, G_{ads} , foi adaptado de forma a fazer com que o líquido tenha prioridade pouco maior em relação ao vapor para molhar a superfície. Por fim, uma força externa arbitrária apontada no sentido negativo do eixo y foi inserida no sistema.

Na primeira simulação realizada, o parâmetro τ foi ajustado para 0,8 e a abertura na superfície sólida para 30 unidades de rede. O resultado pode ser observado na Figura (XXVIII).

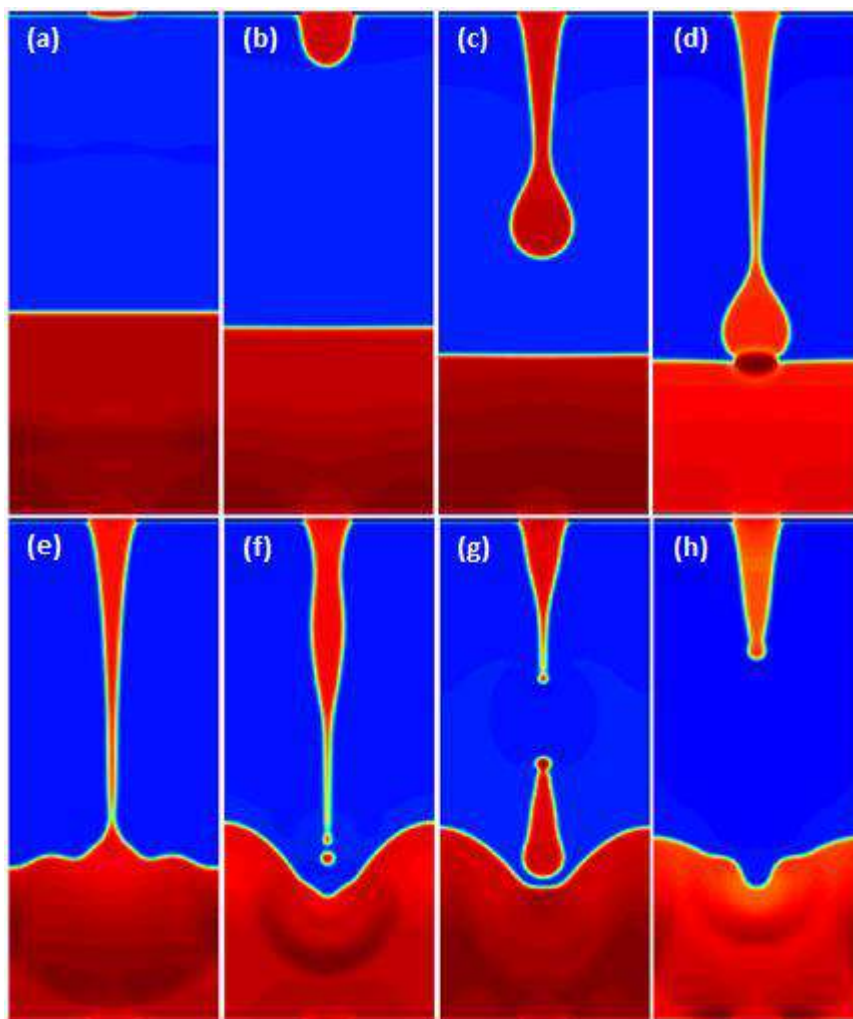


Figura xxviii Simulação de Gotejamento com largura da fresta igual a 30 lu e τ igual a 0,8. Imagens retiradas em 200, 600, 1600, 1980, 2160, 2620, 3080 e 3300 passos de tempo.

A escala de cores nas Figuras (XXVIII), (XXIX) e (XXX) está relacionada à densidade dos fluidos. O azul representa uma escala para densidades pequenas. Quanto mais escuro for o azul, menor será a densidade. De forma análoga, quanto mais escuro for o vermelho, mais denso será o fluido.

O primeiro ponto a ser analisado diz respeito ao efeito da força externa sob os fluidos. Conforme era esperado, o fluido de maior densidade deslocou-se prioritariamente para baixo em relação ao fluido de menor densidade. Com a queda do líquido e posterior choque contra a sua porção em repouso, é possível notar a reação do líquido na parte inferior com base em sua deformação e geração de ondas.

Observando o contato entre o líquido e a superfície no topo das imagens, nota-se que o líquido, no início de sua queda, adere-se levemente à superfície ao redor do buraco, comprovando a maior molhabilidade do líquido à superfície em relação ao vapor e, conseqüentemente, a funcionalidade do parâmetro G_{ads} em ajustar a molhabilidade do fluido.

Outro ponto notável na simulação diz respeito à pressão no líquido. Sabe-se que a pressão está diretamente relacionada à densidade, ou seja, quanto maior a densidade em um ponto, maior será a pressão. Analisando-se as imagens retiradas em 600 e 1600 passos de tempo, pode-se notar que o líquido na parte inferior do sistema possui um gradiente de densidade, evidenciado pelo escurecimento da cor vermelha conforme aumento da profundidade. Ou seja, quanto mais fundo penetra-se no líquido, maior a pressão, o que vai de acordo com os fundamentos em hidrostática conhecidos. Nota-se também que, próximo à abertura na superfície, a cor vermelha torna-se mais clara, o que evidencia a queda de pressão gerada pelo contato do líquido com uma zona de baixa pressão, a fase vapor.

A fim de tornar a análise acerca do comportamento do gotejamento mais completa, novas simulações foram realizadas variando-se, desta vez, a largura da abertura na superfície e o parâmetro τ , o qual está diretamente relacionado à viscosidade do fluido.

A Figura (XXIX) representa o resultado de duas simulações distintas realizadas com o mesmo valor de τ da simulação anterior, 0,8. A sequência de imagens na primeira linha diz respeito à simulação com uma abertura na superfície sólida de 40 unidades de rede, enquanto as imagens na segunda linha fazem menção à simulação com uma abertura de 16 unidades de rede. De forma a facilitar sua comparação, as imagens foram retiradas de ambas as simulações nos mesmos espaços de tempo: 460, 1480, 2120 e 2920 passos de tempo.

Pode-se notar que, na simulação com uma abertura mais larga na superfície, o líquido protagonizou uma queda mais vigorosa que no caso de menor abertura, como era de se esperar. Ou seja, o líquido, na maior abertura, teve maior facilidade para fluir, chegando mais rapidamente ao líquido em repouso na parte de baixo, sem nem haver o despreendimento de gotas, e gerando maior turbulência durante o choque. No caso de

menor abertura, o líquido sofreu maior interferência da superfície sólida, tendo o desprendimento de gotas ocorrido cedo e estas sendo bem pequenas. Em consequência a este fato, o choque das pequenas gotas com o líquido em repouso gerou apenas leves ondulações em sua superfície. Enquanto no primeiro caso, após contato inicial ente o líquido em queda e o em repouso, obteve-se um contato contínuo entre os líquidos, na forma de um filete, no segundo caso o gotejamento se deu lentamente, abrangendo longos períodos entre gotas sucessivas.

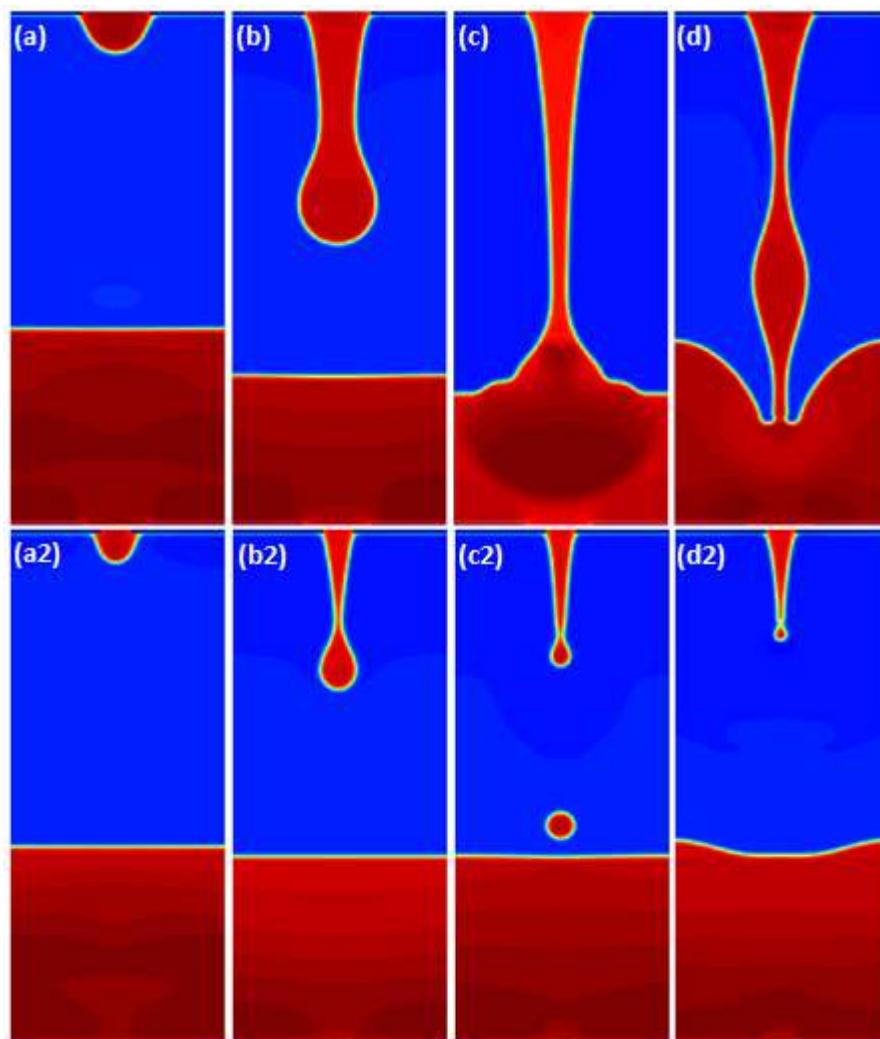


Figura xxix Simulações com τ igual a 0,8 e largura das frestas na superfície distintas: 40 lu no primeiro caso e 16 lu no segundo. Imagens retiradas em 460, 1480, 2120 e 2920 passos de tempo.

Por último, foi variada a viscosidade do fluido, a partir do parâmetro τ , mantendo-se a largura da fresta na superfície constante, com o mesmo valor da primeira simulação realizada.

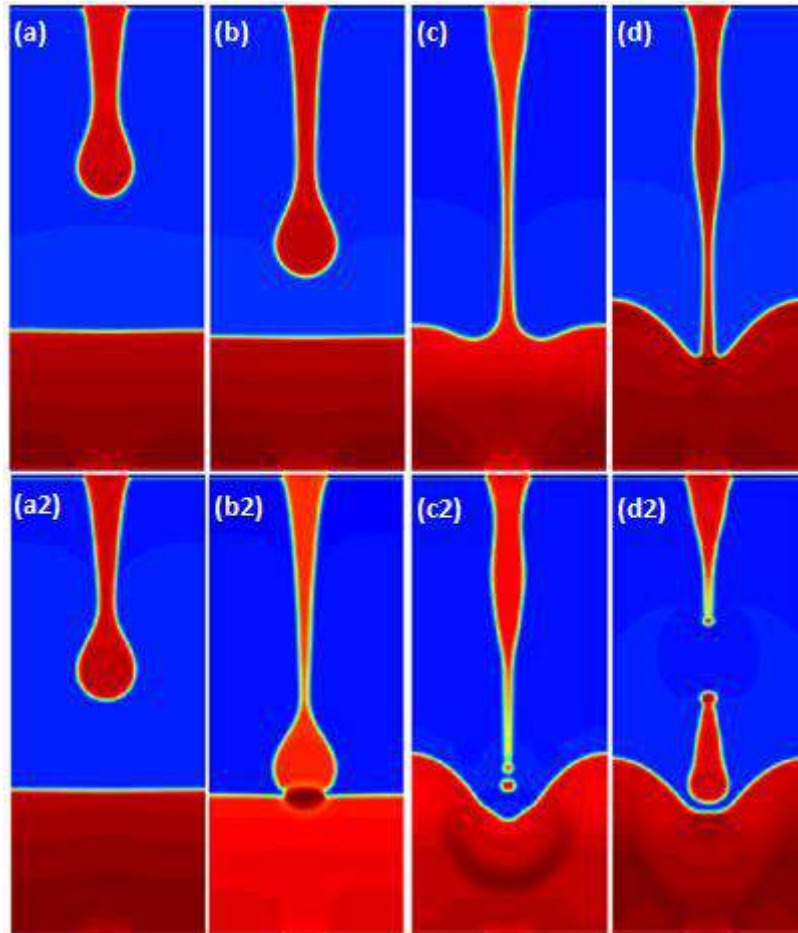


Figura xxx Simulações com largura da fresta igual a 30 lu e τ distintos: 1,1 no primeiro caso e 0,8 no segundo. Imagens retiradas em 1600, 1980, 2620 e 3080 passos de tempo.

Na Figura (XXX), a sequência de imagens na primeira linha demonstra o resultado obtido quando se variou o parâmetro τ para 1,1, enquanto as imagens na segunda linha foram retiradas da primeira simulação exposta nesta seção, onde o valor atribuído a τ foi 0,8. A fim de comparar os processos, as quatro imagens de cada simulação foram retiradas nos mesmos espaços de tempo: 1600, 1980, 2620 e 3080 passos de tempo.

Observa-se que o fluido de maior τ escoar mais lentamente que o fluido de menor τ e tende a ter maior dificuldade para se separar de outra porção líquida do fluido, caracterizando a sua maior viscosidade e a dependência dela com o parâmetro τ .

Tentou-se simular também um fluido menos viscoso utilizando-se valores de τ inferiores a 0,8. O resultado não foi exposto aqui pois, para valores abaixo de 0,7, as simulações entraram em colapso no momento em que a primeira gota se chocou com o líquido em repouso. A instabilidade do método se deu devido à soma de dois efeitos: O primeiro, relacionado às correntes de velocidade artificiais geradas pelo método na interface, as quais se agravam com o aumento da razão entre as densidades das fases, fato que ocorre no momento do choque entre a gota e o líquido em repouso. O segundo, associado à proximidade do valor de τ a 0,5, comprovando, mais uma vez, a dependência que a estabilidade do método tem com o parâmetro τ .

Os resultados obtidos quando se realizou a simulação ajustando-se o valor do parâmetro τ para 0,7 não foram expostos no presente trabalho por diferirem muito pouco dos resultados já aqui demonstrados quando o parâmetro foi ajustado para 0,8.

V.5. Escoamento em Meio Poroso

Aqui, o método será testado mediante a interação de dois fluidos com viscosidades distintas em um meio poroso, onde o fluido mais viscoso encontra-se inicialmente estático e o outro fluido, de menor viscosidade, é inserido no meio, a fim de arrastar o fluido mais viscoso para fora dos poros.

Para simular este tipo de escoamento, será necessário levar em consideração dois grupamentos adimensionais: O número de Reynolds, o qual foi variado entre 2 e 10 ao longo das simulações, e o número Capilar, que consiste na razão entre as forças viscosas e as forças interfaciais, ou de capilaridade (DONG et al., 2011). O número Capilar é definido como:

$$Ca = \frac{u_0 \mu}{\gamma} \quad (113)$$

Onde u_0 consiste em uma velocidade característica, μ é a viscosidade dinâmica do fluido e γ a tensão interfacial entre os fluidos.

O aumento do número Capilar está relacionado, em reservatórios de petróleo, ao fenômeno conhecido como “*viscous fingering*”. Este fenômeno está relacionado a instabilidades que ocorrem na interação entre dois fluidos. Normalmente, está ligado a diferença de viscosidade entre os fluidos (HOMSY, 1987).

De início, tentou-se reproduzir este fenômeno em um domínio simples. Inicializou-se um canal com duas superfícies sólidas, nas partes superior e inferior. O domínio foi preenchido com um fluido com densidade 1,6 e viscosidade dinâmica 0,8, o que leva a um valor de τ igual a 2,0. À esquerda do domínio, foi inserida a condição de contorno de velocidade, a qual foi programada para inserir um fluido com densidade 2,0 e viscosidade dinâmica 0,2, o que leva a um valor de τ igual a 0,8. O resultado, após cerca de 3000 passos de tempo, encontra-se na Figura (XXXI). A concentração de fluido próximo à parede, evidenciada pela cor vermelha, deve-se à condição de não escorregamento imposta pela condição de contorno *bounceback*.

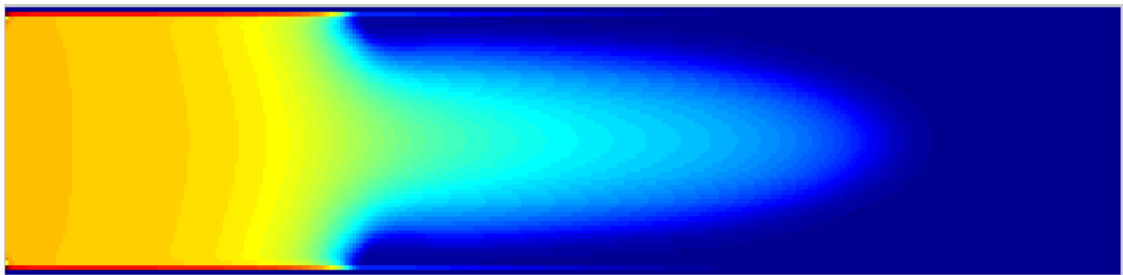


Figura xxxi 'viscous fingering' reproduzido em um canal entre duas placas.

Uma vez tendo conseguido reproduzir o fenômeno com o programa, é possível avançar para a próxima etapa, em que a interação entre os dois fluidos será aplicada em um meio poroso.

A geometria referente ao meio poroso foi desenhada a mão no programa PAINTBRUSH® e transferida para o MATLAB® por meio de uma função de leitura de imagem (*imread*) que cria uma matriz baseada na imagem, na qual cada elemento da matriz refere-se a um pixel da imagem e os seus valores estão ligados à cor da imagem. Em seguida, utilizou-se uma função (*im2bw*) capaz de transformar os valores dos elementos da matriz gerada apenas em 1 ou 0. Por fim, os elementos com valor 1 foram associados à presença do sólido enquanto os elementos com valor 0 à dos fluidos. Como a geometria foi desenhada a mão, pôde-se garantir que o diâmetro médio dos poros fosse de 10 unidades de *lattice*, a porosidade fosse mantida em torno de 47% e a dimensão do domínio fosse fixada em 200 unidades de *lattice* por 400. Inicialmente, era desejado simular o deslocamento do óleo no meio poroso através da injeção de água, variando-se a razão entre as viscosidades da água e do óleo, a velocidade de entrada da água no meio poroso e a molhabilidade da rocha, ora favorável ao óleo, ora favorável à água. Com a variação da velocidade e das viscosidades, consequentemente ocorreria a variação do número Capilar, o que teria influência sobre a interação entre os dois fluidos durante o escoamento. A velocidade de injeção de água à esquerda do domínio foi implementada utilizando-se a condição de contorno de velocidade descrita na Seção IV.2.

Um dos problemas encontrados diz respeito ao cálculo da tensão interfacial. Em diversos trabalhos presentes na literatura (SUKOP e THORNE JR, 2006; DONG et al., 2011; KANG et al., 2003), os autores afirmam ser possível calcular a tensão interfacial entre dois fluidos a partir da inicialização de um fluido com formato quadrado em meio a um outro fluido. Depois de passado certo tempo de simulação, o fluido localizado no centro do domínio, inicialmente na forma de um quadrado, tende a adquirir o formato circular devido aos efeitos da tensão interfacial. Repetindo esta técnica para diversos diâmetros de gota e medindo-se a pressão interna e externa da gota em todos os casos, seria possível, ao final, ajustar os pontos obtidos à lei de Laplace e, assim, calcular a tensão interfacial a partir do coeficiente angular do gráfico. O procedimento foi exaustivamente testado no presente trabalho, porém, sem resultados positivos. O problema deste método reside no fato da necessidade de uma boa resolução do domínio para a obtenção de um bom resultado, o que agrava no grande período de tempo exigido, e no fato da interface entre os fluidos não ser representada por uma linha, mas sim por um gradiente de densidade, o que dificulta a

determinação de um raio exato. Com isso, o cálculo do número capilar deverá ficar em função da tensão interfacial, tendo como parâmetros explícitos apenas a viscosidade e a velocidade.

Inicialmente, foram realizadas simulações variando-se a razão entre viscosidades. Tentou-se simular razões de 2:1, 3:1, 4:1, 5:1 e 12:1. Não foi possível concluir as simulações referentes às razões de 5:1 e 12:1, como era esperado. Todas as tentativas sofreram colapso antes do término, o que indica que o método não está apto a simular razões muito elevadas de densidade. Razões mais elevadas entre viscosidades exigem valores de τ mais elevados, podendo chegar a 3,5, no caso de 12:1, o que, sabidamente, foge ao limite de estabilidade do método, em que o valor de τ não deve ultrapassar muito o valor um.

Compararam-se duas simulações cujos parâmetros G foram fixados em 0,8, os ângulos de contato do óleo com a rocha em 30° , as velocidades de entrada da água no meio poroso fixadas em 0,08 lu/ts e os parâmetros τ para a água iguais a 0,8. As razões entre viscosidades utilizadas foram 3:1, o que leva a um valor de τ para o óleo igual a 1,625, e 2:1, o que leva a um valor de τ para o óleo igual a 1,25.

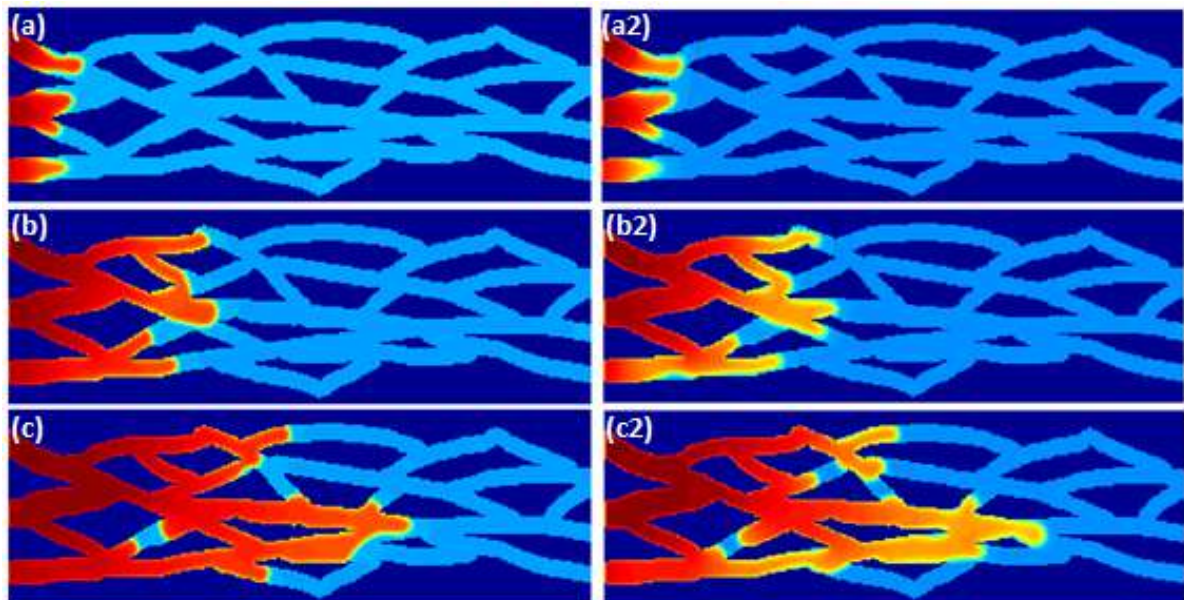


Figura xxxii Simulações da injeção de água em meio poroso. No primeiro caso, o óleo possui o dobro da viscosidade dinâmica da água, enquanto no segundo caso possui o triplo.

Na Figura (XXXII), a cor azul escuro representa as regiões sólidas do domínio, a cor vermelha a água que está sendo injetada e a cor azul claro o óleo presente nos poros. A primeira coluna de imagens representa o escoamento com razão entre viscosidades igual a 2:1, enquanto a segunda coluna representa a razão 3:1. O primeiro caso demonstrou eficiência de retirada de óleo igual a 42,38%, enquanto o segundo caso obteve uma eficiência de remoção igual a 33,37%. Sabendo-se que a razão entre viscosidades para o segundo caso era maior, o número Capilar também é maior, o que comprova o efeito negativo de escoamentos com elevado número Capilar, onde as forças viscosas imperam e, conseqüentemente, parte do óleo acaba sendo deixada para trás.

Quando realizadas simulações variando-se a velocidade e mantendo-se constante a razão entre viscosidades, o resultado final mostrou-se o mesmo. Ao realizar simulações mantendo-se a razão entre viscosidades iguais a 3:1 e utilizando-se velocidades iguais a 0,08 lu/ts e 0,02 lu/ts, o segundo caso, de menor velocidade e, conseqüentemente, menor número Capilar, apresentou eficiência de remoção igual a 33,37%, enquanto o caso de maior velocidade apresentou eficiência de 28,25%. Realizando-se o mesmo tipo de simulação, porém mantendo-se a razão entre viscosidades igual a 2:1 e utilizando velocidades de 0,08 lu/ts e 0,06 lu/ts, o caso com menor velocidade novamente apresentou maior eficiência, 44,79%, enquanto o caso de maior velocidade apresentou eficiência de 42,38%.

Quando se tentou simular casos envolvendo variação de molhabilidade da rocha, encontrou-se mais um obstáculo. Apesar das simulações em que o óleo molhava prioritariamente a rocha terem sido bem sucedidas, quando a molhabilidade era invertida, de forma que a água molhasse a rocha com maior prioridade, as simulações não conseguiam chegar ao fim, sempre entrando em colapso antes. O fator numérico responsável pelo *bug* não foi identificado, o que impossibilitou as simulações de serem rodadas por um tempo mínimo que possibilitasse a realização de uma comparação entre eficiências para os casos em que a água possuía menor ângulo de contato que o óleo. Por outro lado, foi possível captar algumas imagens das simulações, o que permite uma comparação visual entre os casos em que a água possuía menor e maior molhabilidade.

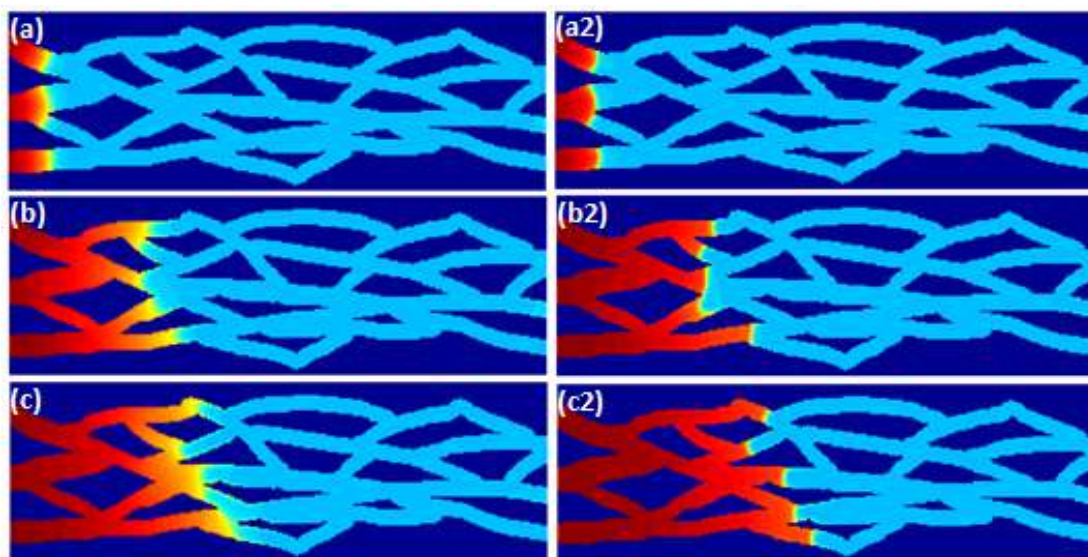


Figura xxxiii Simulações com ângulo de contato entre o óleo e a rocha igual a 120° . No primeiro caso, o óleo possui viscosidade dinâmica quatro vezes maior que a da água, enquanto no segundo caso possui o dobro.

Na Figura (XXXIII), a primeira coluna representa uma simulação realizada com razão entre viscosidades igual a 4:1 e a segunda coluna com razão igual a 2:1, com isso, o parâmetro τ utilizado na primeira foi igual a 2 e na segunda igual a 1,25. Em ambas as simulações, os demais parâmetros foram mantidos constantes, assim como o ângulo de contato, que, dessa vez, foi fixado em 120° .

Sabendo-se que as imagens foram retiradas nos mesmo intervalos de tempo, pode-se concluir que a simulação referente à segunda coluna da imagem acima, de razão 2:1, provavelmente iria obter uma maior eficiência de retirada de óleo, uma vez que apresentou um maior avanço que a simulação da primeira coluna, de maior razão entre viscosidades. Considerando a suposição acima correta, mais uma vez o caso de menor número Capilar apresenta uma maior eficiência de extração do óleo dos poros da rocha.

Comparativamente com os casos onde o óleo possuía ângulo de contato com a rocha de 30° , pode-se notar que, quando a água apresenta maior molhabilidade, aparentemente a porção de óleo deixada para trás é menor, assim como a ocorrência do *viscous fingering*, que também aparenta ser reduzida.

O modelo mostrou-se capaz de reproduzir o fenômeno do *viscous fingering*, assim como a interação entre água e óleo em meios porosos. Foi possível realizar um breve estudo

acerca do efeito do número Capilar sobre a eficiência de retirada de óleo dos poros do meio, mostrando que a eficiência foi superior conforme aumento do número Capilar. Contudo, para que escoamentos em meios porosos possam ser simulados utilizando o método Lattice-Boltzmann sem restrições quanto à razão entre viscosidades da água e do óleo e quanto ao ângulo de contato estipulado, deve-se melhor explorar o comportamento da estabilidade do método com relação aos parâmetros do sistema.

Deve-se ressaltar que os casos aqui demonstrados foram simulados em domínios relativamente pequenos para poupar tempo computacional, o que não possibilitou uma perfeita visualização dos efeitos de interação entre os fluidos dentro dos poros. De forma a propiciar uma melhor visão acerca do potencial do método, foi realizada uma simulação com um domínio de 300 unidades de rede por 600, no qual a visualização da interação entre os fluidos no meio poroso pode ser mais bem visualizada. Nesta simulação, ilustrada na Figura (XXXIV), o ângulo de contato entre o óleo e a superfície foi fixado em 30° , razão entre viscosidades igual a 4:1 e velocidade de injeção da água 0,08lu/ts.

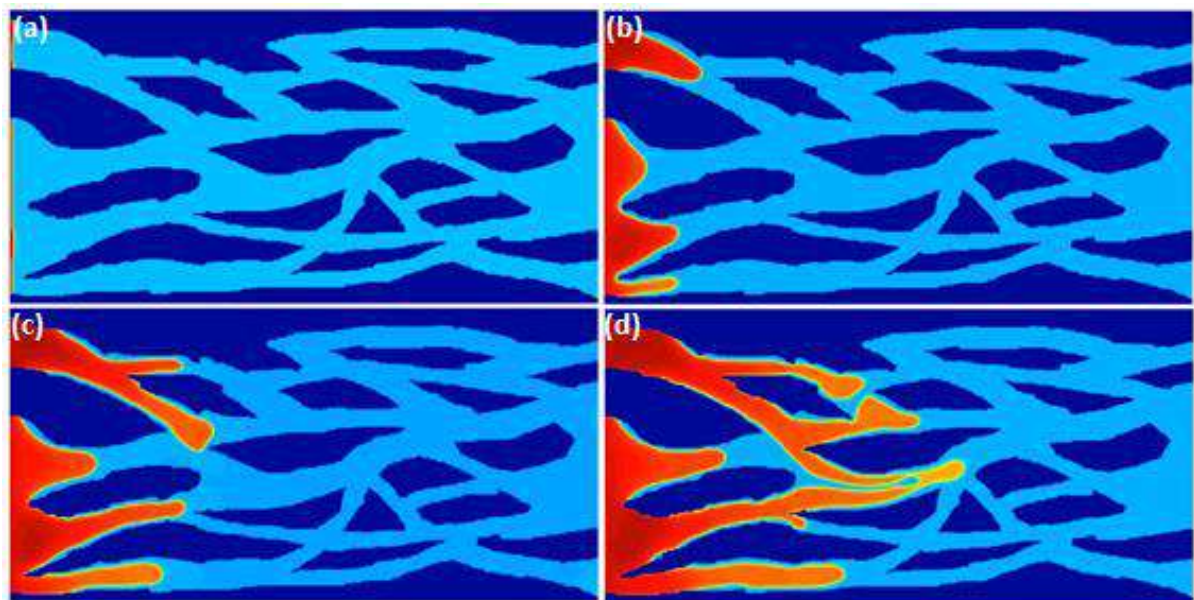


Figura xxxiv Escoamento em meio poroso com domínio de 300lu por 600 lu. Razão entre viscosidades igual a 4:1 e velocidade de injeção de água igual a 0,08lu/ts.

V. Conclusões

O método Lattice-Boltzmann, em muitos casos, é realmente capaz de reproduzir resultados de forma precisa. Sua simples implementação e facilidade de criar geometrias de fato o coloca um passo a frente, nesses quesitos, dos demais métodos de CFD.

O método aqui apresentado corresponde a uma das mais simples implementações possíveis, o que pode justificar grande parte dos *bugs* e limitações. De forma a adaptar o código para uma melhor reprodução da realidade e melhor funcionamento, algumas sugestões encontram-se listadas abaixo.

- Adaptar o modelo ao MRT (Multi Relaxation Time), no lugar da utilização de um único tempo de relaxação, visando obter maior precisão nas simulações e faixa de aplicação.
- Aplicação de uma equação de estado de melhor poder preditivo, como Peng-Robinson ou Redlich-Kwong, no lugar da aqui utilizada, o que possibilitaria simular equilíbrios líquido-vapor mais próximos da realidade.
- Transferir o código para uma linguagem que proporcione maior velocidade às simulações, como FORTRAN ou C++.

As sugestões listadas são apenas as aqui consideradas mais necessárias no momento. Futuramente, ainda pode-se adaptar o modelo para simulações em 3D, implementar interações interpartícula a longa distância (WOLF, 2006) e acoplar o método aqui apresentado ao modelo térmico do Lattice-Boltzmann (TIAN et al., 2007).

VII. Referências Bibliográficas

AALTOSALMI, U., 2005, *Fluid Flow In Porous Media With The Lattice-Boltzmann Method*, Ph.D. dissertation, University of Jyväskylä, Jyväskylä, Finlândia

ADHVARYU, C. H., 2008, *The Lattice Boltzmann Method for Computational Fluid Dynamics Application*, M.Sc. dissertation, University of Texas at Arlington, Arlington, Texas, USA

AGÊNCIA NACIONAL DE ENERGIA ELÉTRICA, **Atlas de Energia Elétrica do Brasil**, 3 ed Brasília, TODA Comunicação, 2008

BHATNAGAR, P. L., GROSS, E. P., KROOK, M., "A Model for Collision Processes in Gases. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems", **Physical Review** v. 94, n. 3, pp. 511-525, Mar. 1953

BOYCE, W. E., DIPRIMA R. C., **Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems**, 7 ed USA, John Willey & Sons, 2001

BRACCO, G., HOLST, B., "Surface Science Techniques", **Springer Series in Surface Sciences** v. 51, 2013

CHARBENEAU, R. J., "Groundwater Hydraulics and Pollutant Transport", 2006. Disponível em: www.medina.cee.duke.edu/CE227/. Acesso em: 27 Nov. 2013, 13:37:16

CHOPARD, B., "How to improve the accuracy of Lattice Boltzmann calculations", 2008. Disponível em: www.wiki.palabos.org/howtos:reduce_roundoff. Acessado em: 27 Nov. 2013, 14:25:42

CORNUBERT, R., D'HUMIÈRES, D., LEVERMORE, D., "A Knudsen layer theory for lattice gases", **Physica D: Nonlinear Phenomena** v. 47, pp. 241-259, Jan. 1991

D'HUMIÈRES, D., "Generalized lattice Boltzmann equations. In Rarefied gas dynamics: theory and simulations", **Progress in Astronautics and Aeronautics** v. 159, pp. 450-458, 1992

DONG, B., YAN, Y. Y., LI, W. Z., "LBM Simulation of Viscous Fingering Phenomenon in Imiscible Displacement of Two Fluids in Porous Media", **Transp. Porous Media** v. 88, pp. 293-314, Mar. 2011

FITTS, C. R., **Groundwater Science**, 1 ed Minnesota, Elsevier Science, 2002

FOX, R. W., MCDONALD, A. T., **Introdução à Mecânica dos Fluidos**, 4 ed Rio de Janeiro, LTC, 1998

FRISCH, U., HASSLACHER, B., POMEAU, Y., "Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation", **Physical Review Letters** v. 56, n. 14, pp. 1505-1508, Abr. 1986

HARDY, J., PAZZIS, O., POMEAU, Y., "Molecular dynamics of a classical lattice gas: Transport properties and time correlation functions", **Physical Review A** v. 13, n. 5, pp. 1949-1961, Mai. 1976

HE, X., LUO, L., "A priori derivation of Lattice Boltzmann equation", **Physical Review** v. 55, n. 6, pp. R6333-R6336, Jun. 1997

HOMSY, G. M., "Viscous Fingering in Porous Media", **Ann. Rev. Fluid Mech.** V. 19, pp. 271-311, 1987

HUANG, H., THORNE, D. T. JR, SCHAAP, M. G., SUKOP, M. C., "Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models", **Physical Review E** v. 76, pp. 066701-1 – 066701-6, 2007

INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P., BERGMAN, T. L., LAVINE, A. S., **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**, 6 ed Rio de Janeiro , LTC, 2008

KANG, Q., ZHANG, D., CHEN, S., "Imiscible displacement in a channel: simulations of fingering in two dimensions", Elsevier, Out. 2003

KOMORI, F. S., 2012, *Desenvolvimento de um Simulador Computacional de Dinâmica de Fluidos Utilizando o Método de Lattice Boltzmann*, dissertação de M.Sc., Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

KOOSUKUNTLA, N. R., 2011, *Towards Development of a Multiphase Simulation Model Using Lattice Boltzmann Method (LBM)*, M.Sc. dissertation, University of Toledo, Toledo, USA

LATT, J., "Choice of units in lattice Boltzmann simulations", 2008. Disponível em: www.wiki.palabos.org/howtos:main. Acessado em: 27 Nov. 2013, 14:33:26

LATT, J., 2007, *Hydrodynamic Limit of Lattice Boltzmann Equation*, Ph.D. dissertation, Université de Genève, Genebra, Suíça

LUTSKO, J. F., "Chapman-Enskog expansion about nonequilibrium states with application to the sheared granular fluid", **Physical Review** v. 73, pp. 021302-1 – 021302-19, Fev. 2006

MARTYS, N. S., CHEN, H., "Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method", **Physical Review** v. 53, n. 1, pp. 743-750, Jan. 1996

MCNAMARA, G. R., ZANETTI, G., "Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata", **Physical Review Letters** v. 61, n.20 pp. 2332-2335, Nov. 1988

MOHAMAD, A. A., **Lattice Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications With Computer Codes**, 1 ed Calgary, Springer-Verlag, 2011

NIELD, D. A., BEJAN, A., *Convection in Porous Media*, 3a ed., New York, Springer, 2006.

RICHARDSON, J. F., HARKER, J.H., BACKHURST, J.R., **Coulson and Richardson's Chemical Engineering**, vol. 2, 5^a ed., Butterworth-Heinemann, Amsterdam, 2002.

SHAN, X., CHEN, H., "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components", **Physical Review E** v. 47, n. 3, pp. 1815-1819, Mar. 1993

SHAN, X., CHEN, H., "Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation", **Physical Review** v. 49, Apr. 1994

SHAW, D. J., **Introduction to Colloid & Surface Chemistry**, 4 ed Liverpool, Butterworth-Heinemann, 1992

STERLING, J. D., CHEN, S., "Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods", Jun. 1993

SUKOP, M. C., THORNE JR, D. T., **Lattice Boltzmann Modeling an Introduction for Geoscientists and Engineers**, 1 ed. Miami, Springer-Verlag, 2006

TENG, H., ZHAO, T. S., "An Extension of Darcy's Law to non-Stokes Flow in Porous Media", **Chemical Engineering Science** v. 55, pp. 2727-2735, Oct. 1999

TIAN, Z. W., ZOU, C., LIU, H., GUO, Z., LIU, Z., ZHENG, C., "Lattice Boltzmann scheme for simulating thermal micro-flow", **Physica A** v. 385, pp. 59-68, Jan. 2007

VIGGEN, E. M., 2009, *The Lattice Boltzmann Method with Applications in Acoustics*, M.Sc. dissertation, Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway

WILLHITE, G. P., *Waterflooding*, SPE Textbook Series, vol. 3, Richardson, Society of Petroleum Engineers, 1986.

WOLF, F. G., 2006, *Modelagem da Interação Fluido-sólido para Simulação de Molhabilidade e Capilaridade usando o Modelo Lattice-Boltzmann*, dissertação de D.Sc., Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Santa Catarina, Brasil

WOLF-GLADROW, D. A., **Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models – An Introduction**, 1 ed Berlin, Springer-Verlag, 2005

YU, D., MEI, R., LUO, L., SHYY, W., "Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation", **Progress in Aerospace Science** v. 39, pp. 329-367, 2003

YUAN, P., SHAEFER, L., "Equations of State in a Lattice Boltzmann Model", *Physics of Fluids* v. 18, Abr. 2006

ZHOU, J. G., **Lattice Boltzmann Methods for Shallow Water Flows**, 1 ed Berlin, Springer-Verlag, 2004

ZIMMERMAN, R. W., "Flow in Porous Media", 2003. Disponível em: www.workspace.imperial.ac.uk/earthscienceandengineering/Public/Forms/ . Acesso em: 27 Nov. 2013, 13:29:25

ZOU, Q., HE, X., "On pressure and velocity flow boundary conditions and bounceback for the lattice Boltzmann BGK model", **Physics of Fluids** v. 9, Nov. 1996

www.palabos.org. Acessado em 27 Nov. 2013, 20:01:05

www.xflowcfd.com/. Acessado em 27 Nov. 2013, 20:04:27

VIII. Apêndice A

VIII.1. Cálculo da Densidade e Velocidade Macroscópica

```
function [ux,uy,rho] = u_rho(f, LX, LY, nos_solidos, ex, ey)

ux = zeros(LY,LX);
uy = zeros(LY,LX);
rho = zeros(LY,LX);

for i =(1:1:LY)
for j = (1:1:LX)

    if nos_solidos(i,j) == 0
%nos_solidos(i,j) corresponde a matriz de sólidos:
%nos_solidos(i,j) = 1, sólido.
%nos_solidos(i,j) = 0, fluido.

for a = (1:1:9)
% "a" corresponde ao índice de direção.

rho(i,j) = rho(i,j) + f(i,j,a);

ux(i,j) = ux(i,j) + ex(a)*f(i,j,a);

uy(i,j) = uy(i,j) + ey(a)*f(i,j,a);

% A velocidade microscópica é designada por "e(a)".
% ex(a) corresponde à componente horizontal de e(a).
% ey(a) corresponde à componente vertical de e(a).

% f(i,j,a) é uma função estatística de localização das partículas.
% Corresponde a uma densidade microscópica.

end

ux(i,j) = ux(i,j)/rho(i,j);

uy(i,j) = uy(i,j)/rho(i,j);

end

end

end
```

VIII.2. Cálculo da Velocidade de Equilíbrio

```
function[uxeq, uyeq] = uequilibrio(ux,uy, LX, LY, tau, g)
    uxeq = zeros(LY,LX);
    uyeq = zeros(LY,LX);
    for i=(1:1:LY)
        for j=(1:1:LX)
            uxeq(i,j) = ux(i,j); %+ tau * g ;
            uyeq(i,j) = uy(i,j);
        end
    end
end
```

VIII.3. Cálculo da Função Distribuição de Equilíbrio

```
function [feq] = fequilibrio(LY, LX, nos_solidos, rho, uxeq, uyeq)

feq = zeros(LY,LX,9);

f1=3;
f2=9/2;
f3=3/2;

for i = (1:1:LY)
for j = (1:1:LX)

if nos_solidos(i,j) == 0

rt0 = 4/9 * rho(i,j);
rt1 = 1/9 * rho(i,j);
rt2 = 1/36 * rho(i,j);

%Cálculo do produto interno entre "e(a)" e "u"
u2 = uxeq(i,j);
u3 = uyeq(i,j);
u4 = - uxeq(i,j);
u5 = - uyeq(i,j);
u6 = uxeq(i,j) + uyeq(i,j);
u7 = - uxeq(i,j) + uyeq(i,j);
u8 = - uxeq(i,j) - uyeq(i,j);
u9 = uxeq(i,j) - uyeq(i,j);

usq = uxeq(i,j)^2 + uyeq(i,j)^2;

%Cálculo de feq
feq(i,j,1) = rt0 * (1 - f3 * usq);
feq(i,j,2) = rt1 * (1 + f1 * u2 + f2 * uxeq(i,j)^2 - f3 * usq);
feq(i,j,3) = rt1 * (1 + f1 * u3 + f2 * uyeq(i,j)^2 - f3 * usq);
feq(i,j,4) = rt1 * (1 + f1 * u4 + f2 * uxeq(i,j)^2 - f3 * usq);
feq(i,j,5) = rt1 * (1 + f1 * u5 + f2 * uyeq(i,j)^2 - f3 * usq);
feq(i,j,6) = rt2 * (1 + f1 * u6 + f2 * u6^2 - f3 * usq);
feq(i,j,7) = rt2 * (1 + f1 * u7 + f2 * u7^2 - f3 * usq);
feq(i,j,8) = rt2 * (1 + f1 * u8 + f2 * u8^2 - f3 * usq);
feq(i,j,9) = rt2 * (1 + f1 * u9 + f2 * u9^2 - f3 * usq);

end
end
end
end
```

VIII.4. Etapa de Colisão

As condições de contorno *bounceback* estão acopladas a esta etapa.

```
function [f] = colisao_fluido(f, feq, tau, LX, LY, nos_solidos)
    for i = (1:1:LY)
        for j = (1:1:LX)
            if nos_solidos(i,j) == 0
                for a = (1:1:9)
                    f(i,j,a) = f(i,j,a) - (f(i,j,a) - feq(i,j,a))/tau;
                end
            else
                % Bounceback
                ftemp = f(i,j,2);
                f(i,j,2) = f(i,j,4);
                f(i,j,4) = ftemp;

                ftemp = f(i,j,3);
                f(i,j,3) = f(i,j,5);
                f(i,j,5) = ftemp;

                ftemp = f(i,j,6);
                f(i,j,6) = f(i,j,8);
                f(i,j,8) = ftemp;

                ftemp = f(i,j,7);
                f(i,j,7) = f(i,j,9);
                f(i,j,9) = ftemp;
            end
        end
    end
end
```

VIII.5. Etapa de Propagação

```
function [f] = streaming(f, LX, LY)
    ftemp = zeros(LY,LX,9);
    for i = (1:1:LY)

        if i > 1
            ip = i - 1;
        else
            ip = LY;
        end

        if i < LY
            in = i + 1;
        else
            in = 1;
        end

        for j = (1:1:LX)

            if j < LX
                jp = j + 1;
            else
                jp = 1;
            end

            if j > 1
                jn = j - 1;
            else
                jn = LX;
            end

            % ip corresponde ao movimento de partículas para cima (linha superior)
            % in corresponde ao movimento de partículas para baixo (linha inferior)
            % jp corresponde ao movimento de partículas para direita (próxima coluna)
            % jn corresponde ao movimento de partículas para esquerda (coluna
            % anterior)
            ftemp(i,j,1) = f(i,j,1);
            ftemp(i,jp,2) = f(i,j,2);
            ftemp(ip,j,3) = f(i,j,3);
            ftemp(i,jn,4) = f(i,j,4);
            ftemp(in,j,5) = f(i,j,5);
            ftemp(ip,jp,6) = f(i,j,6);
            ftemp(ip,jn,7) = f(i,j,7);
            ftemp(in,jn,8) = f(i,j,8);
            ftemp(in,jp,9) = f(i,j,9);

        end
    end
    f = ftemp;
end
```


IX. Apêndice B

É importante observar que os códigos presentes neste apêndice contam com a presença da condição de contorno periódica acoplada a eles. Dependendo do caso que se deseje simular, algumas alterações deverão ser realizadas com relação às condições de contorno.

IX.1. Forças de Atração Interpartícula

```
function[Fx, Fy] = atracao(LY, LX, nos_solidos, rho, psi0, rho0, G, ex, ey)

Fx = zeros(LY,LX);
Fy = zeros(LY,LX);
w = [4/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/36, 1/36, 1/36, 1/36];

for i = (1:1:LY)

    if i > 1
        ip = i - 1;
    else
        ip = LY;
    end

    if i < LY
        in = i + 1;
    else
        in = 1;
    end

    for j = (1:1:LX)

        if j < LX
            jp = j + 1;
        else
            jp = 1;
        end

        if j > 1
            jn = j - 1;
        else
            jn = LX;
        end

        if nos_solidos(i,j) == 0
psi = psi0 * exp( -rho0 / rho(i,j));
```

```

Fx(i,j) = -G * psi * psi0 * (w(2)*ex(2)*exp( -rho0 / rho(i,jp)) + ...
w(3)*ex(3)*exp( -rho0 / rho(ip,j))+w(4)*ex(4)*exp( -rho0 / rho(i,jn))+...
w(5)*ex(5)*exp( -rho0 / rho(in,j))+w(6)*ex(6)*exp( -rho0 / rho(ip,jp))+...
w(7)*ex(7)*exp( -rho0 / rho(ip,jn))+w(8)*ex(8)*exp( -rho0 / rho(in,jn))+...
w(9)*ex(9)*exp( -rho0 / rho(in,jp)));

Fy(i,j) = -G * psi * psi0 * (w(2)*ey(2)*exp( -rho0 / rho(i,jp)) + ...
w(3)*ey(3)*exp( -rho0 / rho(ip,j))+w(4)*ey(4)*exp( -rho0 / rho(i,jn))+...
w(5)*ey(5)*exp( -rho0 / rho(in,j))+w(6)*ey(6)*exp( -rho0 / rho(ip,jp))+...
w(7)*ey(7)*exp( -rho0 / rho(ip,jn))+w(8)*ey(8)*exp( -rho0 / rho(in,jn))+...
w(9)*ey(9)*exp( -rho0 / rho(in,jp)));

    end

end

end

end

```

IX.2. Forças de Interação Partícula-Sólido

```

function[Fxads, Fyads] = adsorcao(LY, LX, nos_solidos, rho, G, psi0, rho0, ex, ey)

Fxads = zeros(LY,LX);
Fyads = zeros(LY,LX);
w = [4/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/36, 1/36, 1/36, 1/36];

for i = (1:1:LY)

    if i > 1
        ip = i - 1;
    else
        ip = LY;
    end

    if i < LY
        in = i + 1;
    else
        in = 1;
    end

```

```

for j = (1:1:LX)

    if j < LX
        jp = j + 1;
    else
        jp = 1;
    end

    if j > 1
        jn = j - 1;
    else
        jn = LX;
    end

    if nos_solidos(i,j) == 0

psi = psi0 * (exp( -rho0 / rho(i,j)));

Gads = G * 2.7427;

Fxads(i,j) = -Gads * psi * (w(2)*ex(2)*nos_solidos(i,jp) + ...
w(3)*ex(3)*nos_solidos(ip,j) + w(4)*ex(4)*nos_solidos(i,jn) + ...
w(5)*ex(5)*nos_solidos(in,j) + w(6)*ex(6)*nos_solidos(ip,jp) + ...
w(7)*ex(7)*nos_solidos(ip,jn) + w(8)*ex(8)*nos_solidos(in,jn) + ...
w(9)*ex(9)*nos_solidos(in,jp));

Fyads(i,j) = -Gads * psi * (w(2)*ey(2)*nos_solidos(i,jp) + ...
w(3)*ey(3)*nos_solidos(ip,j) + w(4)*ey(4)*nos_solidos(i,jn) + ...
w(5)*ey(5)*nos_solidos(in,j) + w(6)*ey(6)*nos_solidos(ip,jp) + ...
w(7)*ey(7)*nos_solidos(ip,jn) + w(8)*ey(8)*nos_solidos(in,jn) + ...
w(9)*ey(9)*nos_solidos(in,jp));

        end

    end

end

end

```

X. Apêndice C

Todos os códigos apresentados abaixo, com exceção do cálculo da velocidade do *bulk*, são referentes ao componente um. Na rotina principal, o mesmo deve ser realizado para o componente dois.

X.1. Cálculo do Momento e da Densidade

```
function [px1,py1,rho1] = p_rho1(f1, LX, LY, nos_solidos, ex, ey)
for i =(1:1:LY)
for j = (1:1:LX)
    px1(i,j) = 0;
    py1(i,j) = 0;
    rho1(i,j) = 0;

    if nos_solidos(i,j) == 0
for a = (1:1:9)
    rho1(i,j) = rho1(i,j) + f1(i,j,a);
    px1(i,j) = px1(i,j) + ex(a)*f1(i,j,a);
    py1(i,j) = py1(i,j) + ey(a)*f1(i,j,a);
end
end
end
end
end
```

X.2. Cálculo da Velocidade do *Bulk*

```
function [uxbulk, uybulk] = ubulk(px1, px2, py1, py2, rho1, rho2,...
    tau1, tau2, LX, LY, nos_solidos)
for i =(1:1:LY)
for j = (1:1:LX)

    uxbulk(i,j) = 0;
    uybulk(i,j) = 0;
    rhotot(i,j) = 0;

    if nos_solidos(i,j) == 0

        rhotot(i,j) = rho1(i,j)/tau1 + rho2(i,j)/tau2;

        uxbulk(i,j) = (px1(i,j)/tau1 + px2(i,j)/tau2)/rhotot(i,j);

        uybulk(i,j) = (py1(i,j)/tau1 + py2(i,j)/tau2)/rhotot(i,j);

    end

end

end

end
```

X.3. Cálculo das forças de Atração

```
function [Fx1, Fy1] = atracao1(LY, LX, nos_solidos, rho2, G, ex, ey)
    Fx1 = zeros(LY,LX);
    Fy1 = zeros(LY,LX);
    w = [4/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/36, 1/36, 1/36, 1/36];
    for i = (1:1:LY)
        if i > 1
            ip = i - 1;
        else
            ip = LY;
        end

        if i < LY
            in = i + 1;
        else
            in = 1;
        end

        for j = (1:1:LX)

            if j < LX
                jp = j + 1;
            else
                jp = 1;
            end

            if j > 1
                jn = j - 1;
            else
                jn = LX;
            end

            if nos_solidos(i,j) == 0
                Fx1(i,j) = -G * (w(2)*ex(2)*rho2(i,jp) + w(3)*ex(3)*rho2(ip,j) +...
                w(4)*ex(4)*rho2(i,jn) + w(5)*ex(5)*rho2(in,j) + w(6)*ex(6)*rho2(ip,jp)...
                + w(7)*ex(7)*rho2(ip,jn) + w(8)*ex(8)*rho2(in,jn) + w(9)*ex(9)*rho2(in,jp));

                Fy1(i,j) = -G * (w(2)*ey(2)*rho2(i,jp) + w(3)*ey(3)*rho2(ip,j) +...
                w(4)*ey(4)*rho2(i,jn) + w(5)*ey(5)*rho2(in,j) + w(6)*ey(6)*rho2(ip,jp)...
                + w(7)*ey(7)*rho2(ip,jn) + w(8)*ey(8)*rho2(in,jn) + w(9)*ey(9)*rho2(in,jp));
            end
        end
    end
end
```

X.4. Cálculo das Forças de Adesão

```
function [Fxads1, Fyads1] = adsorcaol(LY, LX, nos_solidos, Gads1, ex, ey)
Fxads1 = zeros(LY,LX);
Fyads1 = zeros(LY,LX);
w = [4/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/9, 1/36, 1/36, 1/36, 1/36];
for i = (1:1:LY)
    if i > 1
        ip = i - 1;
    else
        ip = LY;
    end

    if i < LY
        in = i + 1;
    else
        in = 1;
    end

    for j = (1:1:LX)
        if j < LX
            jp = j + 1;
        else
            jp = 1;
        end

        if j > 1
            jn = j - 1;
        else
            jn = LX;
        end

        if nos_solidos(i,j) == 0
Fxads1(i,j) = -Gads1 * (w(2)*ex(2)*nos_solidos(i,jp) + ...
w(3)*ex(3)*nos_solidos(ip,j) + w(4)*ex(4)*nos_solidos(i,jn) + ...
w(5)*ex(5)*nos_solidos(in,j) + w(6)*ex(6)*nos_solidos(ip,jp) + ...
w(7)*ex(7)*nos_solidos(ip,jn) + w(8)*ex(8)*nos_solidos(in,jn) + ...
w(9)*ex(9)*nos_solidos(in,jp));

Fyads1(i,j) = -Gads1 * (w(2)*ey(2)*nos_solidos(i,jp) + ...
w(3)*ey(3)*nos_solidos(ip,j) + w(4)*ey(4)*nos_solidos(i,jn) + ...
w(5)*ey(5)*nos_solidos(in,j) + w(6)*ey(6)*nos_solidos(ip,jp) + ...
w(7)*ey(7)*nos_solidos(ip,jn) + w(8)*ey(8)*nos_solidos(in,jn) + ...
w(9)*ey(9)*nos_solidos(in,jp));
        end
    end
end
end
```

X.5. Cálculo das Velocidades de Equilíbrio

```
function [uxeq1, uyeq1] = uequilibrio1(uxbulk, uybulk, LX, LY, tau1,...  
    Fx1, Fy1, Fxads1, Fyads1, g)  
  
    uxeq1 = zeros(LY, LX);  
    uyeq1 = zeros(LY, LX);  
  
    for i=(1:1:LY)  
        for j=(1:1:LX)  
            uxeq1(i,j) = uxbulk(i,j) + tau1*Fx1(i,j) + tau1*Fxads1(i,j);  
            uyeq1(i,j) = uybulk(i,j) + tau1*Fy1(i,j) + tau1*Fyads1(i,j) + tau1 * g ;  
        end  
    end  
end  
end
```


X.6. Cálculo da Função de Equilíbrio

```
function [feq1] = fequilibrio1(LY, LX, nos_solidos, rho1, uxeq1, uyeq1)
feq1 = zeros(LY,LX,9);
    f1=3;
    f2=9/2;
    f3=3/2;
    for i = (1:1:LY)
        for j = (1:1:LX)
            if nos_solidos(i,j) == 0

                rt0 = 4/9 * rho1(i,j);
                rt1 = 1/9 * rho1(i,j);
                rt2 = 1/36 * rho1(i,j);

                u2 = uxeq1(i,j);
                u3 = uyeq1(i,j);
                u4 = - uxeq1(i,j);
                u5 = - uyeq1(i,j);
                u6 = uxeq1(i,j) + uyeq1(i,j);
                u7 = - uxeq1(i,j) + uyeq1(i,j);
                u8 = - uxeq1(i,j) - uyeq1(i,j);
                u9 = uxeq1(i,j) - uyeq1(i,j);

                usq = uxeq1(i,j)^2 + uyeq1(i,j)^2;

                feq1(i,j,1) = rt0 * (1 - f3 * usq);
                feq1(i,j,2) = rt1 * (1 + f1 * u2 + f2 * uxeq1(i,j)^2 - f3 * usq);
                feq1(i,j,3) = rt1 * (1 + f1 * u3 + f2 * uyeq1(i,j)^2 - f3 * usq);
                feq1(i,j,4) = rt1 * (1 + f1 * u4 + f2 * uxeq1(i,j)^2 - f3 * usq);
                feq1(i,j,5) = rt1 * (1 + f1 * u5 + f2 * uyeq1(i,j)^2 - f3 * usq);
                feq1(i,j,6) = rt2 * (1 + f1 * u6 + f2 * u6^2 - f3 * usq);
                feq1(i,j,7) = rt2 * (1 + f1 * u7 + f2 * u7^2 - f3 * usq);
                feq1(i,j,8) = rt2 * (1 + f1 * u8 + f2 * u8^2 - f3 * usq);
                feq1(i,j,9) = rt2 * (1 + f1 * u9 + f2 * u9^2 - f3 * usq);
            end
        end
    end
end
```

X.7. Etapa de Colisão

```
function [f1] = colisao_fluido1(f1, feq1, tau1, LX, LY, nos_solidos)
for i = (1:1:LY)
    for j = (1:1:LX)
        if nos_solidos(i,j) == 0
            for a = (1:1:9)
                f1(i,j,a) = f1(i,j,a) - (f1(i,j,a) - feq1(i,j,a))/tau1;
            end

            else
                % Bounceback
                ftemp = f1(i,j,2);
                f1(i,j,2) = f1(i,j,4);
                f1(i,j,4) = ftemp;

                ftemp = f1(i,j,3);
                f1(i,j,3) = f1(i,j,5);
                f1(i,j,5) = ftemp;

                ftemp = f1(i,j,6);
                f1(i,j,6) = f1(i,j,8);
                f1(i,j,8) = ftemp;

                ftemp = f1(i,j,7);
                f1(i,j,7) = f1(i,j,9);
                f1(i,j,9) = ftemp;
            end
        end
    end
end
end
```

X.8. Etapa de Propagação

```
function [f1] = streaming1(f1, LX, LY)
ftemp = zeros(LY,LX,9);
for i = (1:1:LY)
    if i > 1
        ip = i - 1;
    else
        ip = LY;
    end

    if i < LY
        in = i + 1;
    else
        in = 1;
    end

    for j = (1:1:LX)
        if j < LX
            jp = j + 1;
        else
            jp = 1;
        end

        if j > 1
            jn = j - 1;
        else
            jn = LX;
        end

        % ip corresponde ao movimento de partículas para cima (linha superior)
        % in corresponde ao movimento de partículas para baixo (linha inferior)
        % jp corresponde ao movimento de partículas para direita (próxima coluna)
        % jn corresponde ao movimento de partículas para esquerda (coluna anterior)

        ftemp(i,j,1) = f1(i,j,1);
        ftemp(i,jp,2) = f1(i,j,2);
        ftemp(ip,j,3) = f1(i,j,3);
        ftemp(i,jn,4) = f1(i,j,4);
        ftemp(in,j,5) = f1(i,j,5);
        ftemp(ip,jp,6) = f1(i,j,6);
        ftemp(ip,jn,7) = f1(i,j,7);
        ftemp(in,jn,8) = f1(i,j,8);
        ftemp(in,jp,9) = f1(i,j,9);
    end
end
f1 = ftemp;
end
```