



## **PROGRAMA EQ-ANP**

**Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria  
do Petróleo e Gás Natural**



### **Avaliação do Escoamento de Emulsões de Água em Óleo Usando o Método Lattice Boltzmann**

**Rafael Pinheiro Florencio da Silva**

### **Projeto de Final de Curso**

**Orientadores**

**Prof. Frederico Wanderley Tavares, DSc**

**Prof. Heloísa Lajas Sanches, DSc**

**Agosto de 2015**

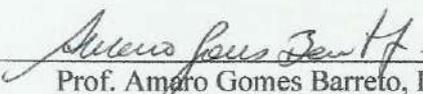
# AVALIAÇÃO DO ESCOAMENTO DE EMULSÕES DE ÁGUA EM ÓLEO USANDO O MÉTODO LATTICE BOLTZMANN

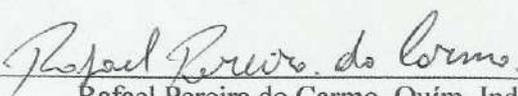
*Rafael Pinheiro Florencio da Silva*

Projeto de Final de Curso submetido ao Corpo Docente do Programa Escola de Química/Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria de Petróleo e Gás Natural, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Químico com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural – Refino e Processamento.

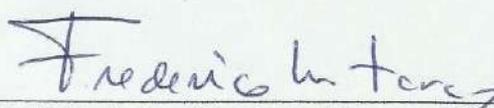
Aprovado por:

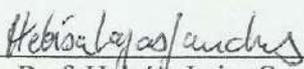
  
Rogério Espósito, DSc

  
Prof. Amaro Gomes Barreto, DSc

  
Rafael Pereira do Carmo, Quím. Ind.

Orientado por:

  
Prof. Frederico Wanderley Tavares, DSc

  
Prof. Heloísa Lajas Sanches, DSc

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Agosto de 2015

Silva, Rafael Pinheiro Florencio da.

Avaliação do escoamento de emulsões de água em óleo usando o método Lattice Boltzmann / Rafael Pinheiro Florencio da Silva. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2015.

xii, 84 p.; il.

(Monografia) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2015.

Orientadores: Frederico Wanderley Tavares e Heloísa Lajas Sanches.

1. Emulsões. 2. Simulação. 3. Lattice Boltzmann. 4. Monografia. (Graduação – UFRJ/EQ). 5. Frederico Wanderley Tavares (DSc) e Heloísa Lajas Sanches (DSc).

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente aos meus pais pelo apoio, pela compreensão e pela força durante todos esses anos. Sem vocês eu não teria percorrido o longo caminho que me levou até aqui.

Agradeço aos amigos que me acolheram nessa jornada. Não esquecerei os momentos difíceis nem os momentos engraçados que marcaram essa época de nossas vidas. Espero continuar jogando truco com vocês por muito tempo.

Agradeço também aos meus orientadores, Fred e Heloísa, pela oportunidade de trabalharmos juntos. Deixo um agradecimento especial à professora Heloísa, que me incentivou nos momentos mais complicados sem nunca duvidar do meu potencial.

Por fim, agradeço à Agência Nacional do Petróleo (ANP) pelo apoio financeiro através do seu Programa de Recursos Humanos, em especial ao PRH 13 da Escola de Química.

Resumo do Projeto Final apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural – Refino e Processamento.

## **AVALIAÇÃO DO ESCOAMENTO DE EMULSÕES DE ÁGUA EM ÓLEO USANDO O MÉTODO LATTICE BOLTZMANN**

Rafael Pinheiro Florencio da Silva  
Agosto, 2015

Orientadores: Prof. Frederico Wanderley Tavares, DSc  
Prof. Heloísa Lajas Sanches, DSc

Emulsões de água e óleo são sistemas coloidais bifásicos em que uma fase encontra-se dispersa na outra devido às interações físico-químicas complexas entre os componentes (efeitos hidrofóbicos), ocorrendo com frequência no processamento de petróleo. Executar simulações de escoamentos de emulsões pelos métodos tradicionais de fluidodinâmica computacional é, em geral, uma tarefa difícil, exigindo modelagem e técnicas numéricas avançadas e um enorme custo computacional.

O método Lattice Boltzmann surge como uma alternativa aos métodos tradicionais de simulação numérica de fluidos, utilizando uma modelagem cinética simples para recuperar propriedades macroscópicas a partir de valores médios de propriedades microscópicas.

Neste trabalho foi avaliado um método de simulação de escoamentos de emulsões de água em óleo usando o modelo de Lattice Boltzmann multifásico de Shan e Chen, destacando-se as vantagens e desvantagens do modelo escolhido. As condições de estabilidade do método foram investigadas para alguns parâmetros como o tempo de relaxação, a razão de viscosidades e a força de interação entre componentes. Os padrões de escoamento e os diversos comportamentos interfaciais observados nas simulações foram comparados à descrição teórica disponível na literatura.

Abstract of a Final Project presented to Escola de Química/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Chemical Engineer with emphasis on Petroleum and Natural Gas – Refining and Processing.

## **EVALUATION OF WATER-IN-OIL EMULSION FLOW USING LATTICE BOLTZMANN METHOD**

Rafael Pinheiro Florencio da Silva

August, 2015

Supervisors: Prof. Frederico Wanderley Tavares, DSc  
Prof. Heloísa Lajas Sanches, DSc

Water and oil emulsions are colloidal two-phase systems in which one phase is dispersed in the other due to the complex physical-chemical interactions between the components (hydrophobic interactions), frequently occurring in petroleum processing. Running emulsion flow simulations by traditional computational fluid dynamics is usually a hard task, requiring advanced modeling and numerical techniques with enormous computational costs.

The Lattice Boltzmann method appears as an alternative to traditional methods of numerical simulation of fluids, using a simple kinetic modeling to recover macroscopic properties from average values of microscopic properties.

In this work, a simulation method of water-in-oil emulsion flow using Shan & Chen's Lattice Boltzmann multiphase model was evaluated, highlighting advantages and disadvantages of the chosen model. The method stability conditions were investigated for some parameters such as relaxation time, viscosities ratio and interaction force between components. Flow patterns and different interfacial behaviors observed in the simulations were compared to the theoretical description available in the literature.

# ÍNDICE

<b>Capítulo I – Introdução</b>	1
<b>Capítulo II – Revisão Bibliográfica</b>	2
II.1 – Conceitos Fundamentais	2
II.1.1 – Mecânica dos Fluidos	2
II.1.2 – Fenômenos Interfaciais	4
II.1.3 – Fluidodinâmica Computacional	6
II.2 – Teoria Cinética dos Gases	7
II.2.1 – Estrutura Molecular dos Gases	7
II.2.2 – Distribuição de Maxwell	10
II.2.3 – Equação de Boltzmann	14
<b>Capítulo III – Método Lattice Boltzmann</b>	20
III.1 – Autômatos Celulares e o Método Lattice-Gas	20
III.2 – Equação de Lattice Boltzmann	22
III.3 – Condições de Contorno	25
III.4 – Conversão entre Dados Físicos e Virtuais	29
<b>Capítulo IV – Metodologia</b>	30
IV.1 – Modelo Monofásico e Monocomponente	30
IV.2 – Modelo Multifásico e Multicomponente	32
IV.3 – Visualização dos Resultados	35
<b>Capítulo V – Resultados</b>	37
V.1 – Escoamento de Poiseuille	37
V.1.1 – Análise Dimensional	37
V.1.2 – Simulação I: $Re = 312.5$ e $\tau = 0.6$	40
V.1.3 – Simulação II: $Re = 3.125$ e $\tau = 0.6$	44
V.1.4 – Simulação III: $Re = 312.5$ e $\tau = 0.55$	46
V.1.5 – Simulação IV: $Re = 3.125$ e $\tau = 0.55$	47
V.1.6 – Resumo	48

V.2 – Escoamento Cruzado	49
V.2.1 – Simulação I: $Re = 3.125$	49
V.2.2 – Simulação II: $Re = 312.5$	51
V.3 – Coalescência de Gotas	53
V.2.1 – Simulação I: $\eta = 2$	53
V.2.2 – Simulação II: $\eta = 10$	57
V.4 – Escoamento de Emulsões	58
V.4.1 – Simulação I: Emulsão de Água em Óleo com $c_v = 0.2$	58
V.4.2 – Simulação II: Emulsão de Água em Óleo com $c_v = 0.1$	61
V.4.3 – Simulação III: Emulsão de Água em Óleo com $c_v = 0.3$	63
<b>Capítulo VI – Conclusão</b>	<b>67</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>68</b>
<b>Apêndice A – Códigos em Fortran</b>	<b>71</b>
A.1 – Modelo Monofásico Monocomponente	71
A.2 – Modelo Multifásico Multicomponente	73
A.3 – Sub-rotinas	76
A.3.1 – Distribuição de Equilíbrio	76
A.3.2 – Densidades de Massa e de Momento Macroscópicas	77
A.3.3 – Condição de Contorno de Entrada	77
A.3.4 – Velocidade do Bulk	79
A.3.5 – Forças de Interação	79
A.3.6 – Velocidade de Equilíbrio	81
A.3.7 – Colisão	81
A.3.8 – Propagação	82
<b>Apêndice B – Código em MATLAB®</b>	<b>84</b>

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 2.1</b>	<b>Elemento de volume de fluido</b>	<b>2</b>
<b>Figura 2.2</b>	<b>Forças de interação para partículas no bulk e na interface</b>	<b>4</b>
<b>Figura 2.3</b>	<b>Ângulo de contato entre um líquido e uma superfície sólida</b>	<b>5</b>
<b>Figura 2.4</b>	<b>Geometria cilíndrica</b>	<b>8</b>
<b>Figura 3.1</b>	<b>Modelo HPP</b>	<b>20</b>
<b>Figura 3.2</b>	<b>Lattices antes e depois da colisão no modelo HPP</b>	<b>21</b>
<b>Figura 3.3</b>	<b>Propagação das partículas no modelo HPP</b>	<b>21</b>
<b>Figura 3.4</b>	<b>Modelo FHP</b>	<b>21</b>
<b>Figura 3.5</b>	<b>Lattice D2Q9</b>	<b>23</b>
<b>Figura 3.6</b>	<b>Distribuição de partículas antes e depois da colisão</b>	<b>24</b>
<b>Figura 3.7</b>	<b>Distribuição de partículas antes e depois da propagação</b>	<b>25</b>
<b>Figura 3.8</b>	<b>Problema de contorno à esquerda do domínio</b>	<b>26</b>
<b>Figura 3.9</b>	<b>Escoamento com algumas condições conhecidas</b>	<b>26</b>
<b>Figura 3.10</b>	<b>Condição de contorno “bounceback”</b>	<b>28</b>
<b>Figura 4.1</b>	<b>Fluxograma do modelo monofásico monocomponente</b>	<b>32</b>
<b>Figura 4.2</b>	<b>Fluxograma do modelo multifásico multicomponente</b>	<b>35</b>
<b>Figura 4.3</b>	<b>Ajuste do tempo de duração de uma animação</b>	<b>36</b>
<b>Figura 5.1</b>	<b>Perfil de velocidades no escoamento de Poiseuille</b>	<b>37</b>
<b>Figura 5.2</b>	<b>Desenvolvimento do perfil de velocidades no tempo <math>t = 0.07</math> s</b>	<b>41</b>
<b>Figura 5.3</b>	<b>Evolução temporal do perfil de velocidades em <math>x = 11</math> mm</b>	<b>42</b>
<b>Figura 5.4</b>	<b>Comparação entre os perfis da simulação I (em vermelho) e da previsão teórica (em preto)</b>	<b>43</b>
<b>Figura 5.5</b>	<b>Visualização dos resultados por mapas de cores</b>	<b>43</b>
<b>Figura 5.6</b>	<b>Desenvolvimento do perfil de velocidades no tempo <math>t = 0.03</math> s</b>	<b>44</b>
<b>Figura 5.7</b>	<b>Evolução temporal do perfil de velocidades em <math>x = 3</math> mm</b>	<b>45</b>
<b>Figura 5.8</b>	<b>Comparação entre a simulação II e a equação teórica</b>	<b>45</b>
<b>Figura 5.9</b>	<b>Evolução temporal do perfil de velocidades em <math>x = 11</math> mm</b>	<b>46</b>
<b>Figura 5.10</b>	<b>Comparação entre a simulação III e a equação teórica</b>	<b>47</b>
<b>Figura 5.11</b>	<b>Tela de saída do programa</b>	<b>48</b>
<b>Figura 5.12</b>	<b>Perfis de escoamento ao redor de cilindro</b>	<b>49</b>
<b>Figura 5.13</b>	<b>Velocidade axial para <math>Re = 3.125</math> em regime estacionário</b>	<b>50</b>

<b>Figura 5.14</b>	<b>Perfil de velocidades em <math>\tilde{x} = 100</math></b>	<b>50</b>
<b>Figura 5.15</b>	<b>Perfil de velocidades de um escoamento anular</b>	<b>51</b>
<b>Figura 5.16</b>	<b>Evolução espacial do perfil de velocidades da água</b>	<b>51</b>
<b>Figura 5.17</b>	<b>Velocidade para <math>Re = 312.5</math> após 14000 passos de tempo</b>	<b>51</b>
<b>Figura 5.18</b>	<b>Perfil de velocidades em <math>\tilde{x} = 120</math> e 14000 passos de tempo</b>	<b>52</b>
<b>Figura 5.19</b>	<b>Evolução das esteiras de von Kármán</b>	<b>52</b>
<b>Figura 5.20</b>	<b>Evolução da coalescência com <math>\tau_1 = 0.7</math>, <math>\tau_2 = 0.6</math> e <math>G = 0.8</math></b>	<b>54</b>
<b>Figura 5.21</b>	<b>Evolução da coalescência com <math>\tau_1 = 1.5</math>, <math>\tau_2 = 1.0</math> e <math>G = 1.7</math></b>	<b>54</b>
<b>Figura 5.22</b>	<b>Perfil da gota após 20000 passos de tempo</b>	<b>54</b>
<b>Figura 5.23</b>	<b>Distribuição final de densidades para <math>\tau_1 = 0.7</math>, <math>\tau_2 = 0.6</math> e <math>G = 0.8</math></b>	<b>56</b>
<b>Figura 5.24</b>	<b>Distribuição final de densidades para <math>\tau_1 = 1.5</math>, <math>\tau_2 = 1.0</math> e <math>G = 1.7</math></b>	<b>56</b>
<b>Figura 5.25</b>	<b>Distribuição final de densidades para <math>G = 1.5</math></b>	<b>58</b>
<b>Figura 5.26</b>	<b>Escoamento de emulsão com 20% de água em volume</b>	<b>59</b>
<b>Figura 5.27</b>	<b>Padrões de escoamentos líquido-líquido</b>	<b>60</b>
<b>Figura 5.28</b>	<b>Densidade da água ao longo do tubo para emulsão com <math>c_v = 20\%</math></b>	<b>60</b>
<b>Figura 5.29</b>	<b>Diâmetro de uma gota de água na emulsão com <math>c_v = 20\%</math></b>	<b>61</b>
<b>Figura 5.30</b>	<b>Escoamento de emulsão com 10% de água em volume</b>	<b>62</b>
<b>Figura 5.31</b>	<b>Densidade da água ao longo do tubo para emulsão com <math>c_v = 10\%</math></b>	<b>62</b>
<b>Figura 5.32</b>	<b>Diâmetros de três gotas de água na emulsão com <math>c_v = 10\%</math></b>	<b>63</b>
<b>Figura 5.33</b>	<b>Escoamento de emulsão com 30% de água em volume</b>	<b>63</b>
<b>Figura 5.34</b>	<b>Relação entre <math>G</math> e <math>c_v</math> para as simulações realizadas</b>	<b>64</b>
<b>Figura 5.35</b>	<b>Formação de emulsões complexas</b>	<b>64</b>
<b>Figura 5.36</b>	<b>Emulsão tripla se desfazendo com o tempo</b>	<b>65</b>
<b>Figura 5.37</b>	<b>Inversão de fases entre óleo e água na entrada do tubo</b>	<b>65</b>
<b>Figura 5.38</b>	<b>Densidade da água ao longo do tubo para emulsão com <math>c_v = 30\%</math></b>	<b>65</b>

## ÍNDICE DE TABELAS

<b>Tabela 5.1</b>	Planejamento das simulações do escoamento de Poiseuille	43
<b>Tabela 5.2</b>	Resultados das simulações com $\tau_1 = 0.7$ , $\tau_2 = 0.6$ e $\eta = 2$	55
<b>Tabela 5.3</b>	Resultados das simulações com $\tau_1 = 1.5$ , $\tau_2 = 1.0$ e $\eta = 2$	55
<b>Tabela 5.4</b>	Resultados das simulações com $\tau_1 = 1.0$ , $\tau_2 = 0.55$ e $\eta = 10$	57

## NOMENCLATURA

### LETRAS LATINAS

<b>Símbolo</b>	<b>Descrição</b>	<b>Dimensão</b>
A	área	$L^2$
a	aceleração	$L t^{-2}$
c	velocidade da partícula	$L t^{-1}$
$c_v$	fração volumétrica	-
e	velocidade do lattice	$L t^{-1}$
E	energia	$M L^2 t^{-2}$
F	força	$M L t^{-2}$
f	função de distribuição de velocidades	$L^{-3}$
$\tilde{f}$	função de distribuição de velocidades modificada	$L^{-3}$
G	parâmetro de interação	-
g	aceleração da gravidade ( $= 9,81 \text{ m s}^{-2}$ )	$L t^{-2}$
k	constante de Boltzmann ( $= 1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ )	$M L^2 T t^{-2}$
m	massa	M
N	número de partículas	-
$N_A$	número de Avogadro ( $= 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ )	-
n	número de mols	-
$\bar{n}$	densidade do número de partículas	$L^{-3}$
P	pressão	$M L^{-1} t^{-2}$
p	quantidade de movimento	$M L t^{-1}$
R	constante dos gases ( $= 8,31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ )	$M L^2 T t^{-2}$
T	temperatura	T
t	tempo	t
u	componente do vetor velocidade no eixo x	$L t^{-1}$
V	volume	$L^3$
v	componente do vetor velocidade no eixo y	$L t^{-1}$
W	trabalho	$M L^2 t^{-2}$
w	componente do vetor velocidade no eixo z	$L t^{-1}$

## LETRAS GREGAS

Símbolo	Descrição	Dimensão
$\gamma$	tensão interfacial	$L t^{-2}$
$\eta$	razão de viscosidades	-
$\theta$	ângulo de contato	-
$\lambda$	livre caminho médio	L
$\mu$	viscosidade dinâmica	$M L^{-1} t^{-1}$
$\nu$	viscosidade cinemática	$L t^{-2}$
$\rho$	densidade de massa	$M L^{-3}$
$\tau$	tempo de relaxação	t
$\tilde{\tau}$	tensor tensão viscosa	$M L^{-1} t^{-2}$
$\psi$	potencial de interação	-
$\Omega$	termo integral de colisão	$L^{-3} t^{-1}$

## SOBRESCRITOS

Símbolo	Descrição
$eq$	parâmetro ou variável relativa à condição de equilíbrio

## SUBSCRITOS

Símbolo	Descrição
ads	parâmetro ou variável relativa à adsorção
bulk	parâmetro ou variável relativa ao bulk
c	parcela da energia relativa à energia cinética
cxt	parâmetro ou variável externa
int	parâmetro ou variável de interação
max	máxima
part	parâmetro ou variável relativa à partícula
u	parcela da energia correspondente à energia interna

## GRUPOS ADIMENSIONAIS

Símbolo	Nome
$Kn = \frac{\lambda}{L}$	Número de Knudsen
$Re = \frac{\rho v D}{\mu}$	Número de Reynolds

## Capítulo I – Introdução

O petróleo é conhecido pelo homem desde antes de Cristo. Existem registros históricos de sua utilização por babilônios, fenícios, egípcios, gregos, romanos e índios pré-colombianos. Entretanto, a atividade petrolífera como conhecemos hoje teve início em 1859 com o coronel Edwin L. Drake, que executou a perfuração do primeiro poço de petróleo na Pensilvânia (THOMAS, 2001).

Atualmente, o petróleo é o principal constituinte da matriz energética mundial (YERGIN, 1991). Ao longo de mais de um século, uma grande cadeia industrial com alta demanda financeira e tecnológica foi desenvolvida para viabilizar a exploração, exploração, refino e comercialização do petróleo e seus derivados.

O refino do petróleo pode ser descrito como uma sequência de processos e operações que buscam separar o petróleo em diversas frações de interesse com diferentes características. Estes produtos do refino são denominados derivados do petróleo, que incluem combustíveis, lubrificantes, solventes e insumos básicos para as petroquímicas, entre outros. Refinar petróleo é uma atividade complexa, pois constantemente envolve o processamento de misturas multicomponentes e multifásicas. Uma das grandes complicações para a atividade é a formação de emulsões entre água e óleo, que pode ter implicações tanto operacionais quanto ambientais (WAUQUIER, 1994).

Compreender a natureza das emulsões entre água e óleo pode, portanto, evitar prejuízos à indústria do petróleo. Esse conhecimento pode ser adquirido por meio de experimentos em laboratórios. Entretanto, a Fluidodinâmica Computacional (CFD) surge como uma alternativa de baixo custo para a obtenção de informações sobre as emulsões através de simulações computacionais adequadas.

Os principais pacotes de CFD do mercado são baseados na solução das equações de Navier-Stokes (VERSTEEG, 1995). Estas equações surgem da modelagem macroscópica dos fluidos e podem não ser as mais adequadas para se modelar um sistema complexo como as emulsões, sendo necessário o desenvolvimento de novas técnicas computacionais.

O Método Lattice Boltzmann (LBM) é uma técnica de simulação computacional relativamente nova em que as equações de Navier-Stokes são substituídas pela equação de Boltzmann, descrevendo a dinâmica dos fluidos em escala mesoscópica. Neste trabalho foi escolhido o modelo de Shan e Chen (SHAN e CHEN, 1993) entre os disponíveis na literatura para simular o comportamento de uma emulsão de água em óleo, avaliando-se as influências de diversos parâmetros físicos e numéricos sobre o resultado. Foram simulados três casos de escoamentos bifásicos com uma fase líquida dispersa em outra fase líquida contínua.

## Capítulo II – Revisão Bibliográfica

### II.1. Conceitos Fundamentais

Uma breve revisão de conceitos básicos foi realizada para iniciar o trabalho proposto. Foram abordados tópicos relacionados a mecânica dos fluidos, fenômenos interfaciais, modelagem matemática e simulação numérica.

#### II.1.1. Mecânica dos Fluidos

Segundo FOX (2012), um fluido pode ser definido como qualquer substância que escoa quando submetida a uma tensão cisalhante. A mecânica dos fluidos é a área da ciência que estuda os fluidos em repouso e em movimento. É fundamental conhecer as características de um fluido para diversas aplicações de engenharia, como projeto e seleção de máquinas de fluxo (bombas, compressores, turbinas), geração de energia, biomecânica e estudos ambientais, entre outros.

Na mecânica dos fluidos clássica um fluido é tratado como um meio contínuo. Isto significa que a menor unidade de volume do fluido admissível é aquela em que as propriedades específicas não sofrem grandes flutuações aleatórias conforme este volume é aumentado.

Sendo válida a hipótese do contínuo, as propriedades do fluido e do escoamento são descritas como funções contínuas do tempo  $t$  e da posição  $(x, y, z)$ . Algumas equações de balanço para estas propriedades são usadas na modelagem de um fluido na abordagem na mecânica dos fluidos clássica.

A primeira delas surge do balanço de massa. Seja um volume de fluido com dimensões  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$  (Figura 2.1). A densidade do fluido é dada por pelo campo escalar  $\rho = \rho(x, y, z, t)$  e o campo de velocidades pelo campo vetorial  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y, z, t)$ , onde  $\mathbf{u}$  tem componentes  $u$ ,  $v$  e  $w$  nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , respectivamente. Em notação vetorial,  $\mathbf{u} = (u, v, w)$ . Cada componente do vetor velocidade é, em geral, uma função contínua na posição e no tempo.

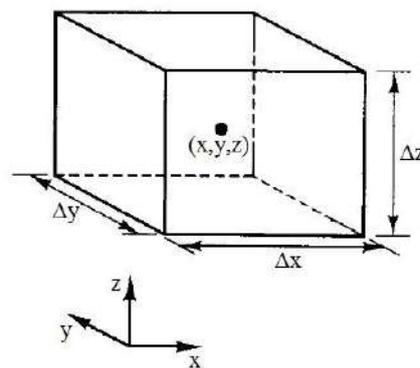


Figura 2.1 – Elemento de volume de fluido (adaptado de VERSTEEG, 1995)

Para o escoamento de um fluido monocomponente, o balanço de massa pode ser enunciado como (BIRD, 2004):

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de acúmulo} \\ \text{de massa} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de entrada} \\ \text{de massa} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de saída} \\ \text{de massa} \end{array} \right\} \quad (2.1)$$

A taxa de acúmulo de massa representa o termo transiente do balanço. Para o elemento de volume acima, este acúmulo é dado por:

$$\text{Acúmulo de massa:} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.2)$$

Admitindo-se que o escoamento do fluido segue as direções positivas de  $x$ ,  $y$  e  $z$ , a entrada e a saída de massa através das superfícies perpendiculares ao eixo  $x$  são:

$$\text{Entrada de massa em } x: \quad (\rho u)|_x \Delta y \Delta z \quad (2.3)$$

$$\text{Saída de massa em } x + \Delta x: \quad (\rho u)|_{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \quad (2.4)$$

Procedimento análogo pode ser feito para os termos de entrada e saída de massa através das superfícies perpendiculares a  $y$  e  $z$ . Substituindo as expressões matemáticas para as taxas na Equação (2.1), chega-se a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z = & [(\rho u)|_x - (\rho u)|_{x+\Delta x}] \Delta y \Delta z + [(\rho v)|_y - (\rho v)|_{y+\Delta y}] \Delta x \Delta z \\ & + [(\rho w)|_z - (\rho w)|_{z+\Delta z}] \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (2.5)$$

Dividindo tudo por  $\Delta x \Delta y \Delta z$ , temos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{(\rho u)|_{x+\Delta x} - \rho u|_x}{\Delta x} - \frac{(\rho v)|_{y+\Delta y} - \rho v|_y}{\Delta y} - \frac{(\rho w)|_{z+\Delta z} - \rho w|_z}{\Delta z} \quad (2.6)$$

Tomando o limite da Equação (2.6) quando  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta z$  tendem a zero e usando a definição de derivada, chega à equação de balanço de massa, também conhecida por equação da continuidade.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \quad (2.7)$$

Em notação vetorial, o lado direito da equação da continuidade é escrito na forma de um divergente.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \quad (2.8)$$

Também é possível deduzir a equação da continuidade através uma formulação integral, como pode ser visto em FOX (2012). Neste trabalho foi utilizado um balanço deste tipo para a dedução da equação de Boltzmann (Seção II.2.3).

Outra equação de extrema relevância para o estudo da fluidodinâmica é a equação do movimento. Esta equação surge do balanço de momento linear sobre um elemento de volume de fluido de forma análoga ao procedimento para dedução da equação da continuidade, sendo enunciada na Equação (2.9) (BIRD, 2004).

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{aumento de} \\ \text{momento} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{entrada de} \\ \text{momento} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa de} \\ \text{saída de} \\ \text{momento} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{Taxa externa} \\ \text{sobre o fluido} \end{array} \right\} \quad (2.9)$$

A dedução da equação do movimento não será desenvolvida aqui, mas pode-se mostrar que:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P - (\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\tau}}) + \rho \mathbf{g} \quad (2.10)$$

onde  $P$  é a pressão,  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$  é o tensor tensão viscosa e  $\mathbf{g}$  é o vetor aceleração da gravidade.

A Equação (2.10) é a chamada equação do movimento. Para um fluido newtoniano, o tensor tensão pode ser escrito de acordo com a lei de Newton da viscosidade. Neste caso, a equação do movimento se reduz à equação de Navier-Stokes, que é sua forma mais conhecida e utilizada:

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (2.11)$$

onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido.

### II.1.2. Fenômenos Interfaciais

A mecânica dos fluidos trata do transporte de momento e suas implicações na engenharia. As transferências de momento, calor e massa estão englobadas nos fenômenos de transporte, um dos grandes temas da engenharia. Entretanto, outro grande tema surge quando o sistema de interesse é heterogêneo, isto é, apresenta mais de uma fase: os fenômenos interfaciais, que tratam das regiões de contato entre as fases do sistema e dos diversos problemas que estas interfaces implicam.

Alguns conceitos são fundamentais nos fenômenos interfaciais. Uma das principais propriedades de interesse desta área de estudo é a tensão superficial ou interfacial. Esta tensão é oriunda da diferença de interação entre as moléculas de uma fase e as moléculas da fase adjacente (SHAW, 1992). Como tais interações são normalmente de curto alcance, é na interface que essa diferença é mais acentuada (Figura 2.2).

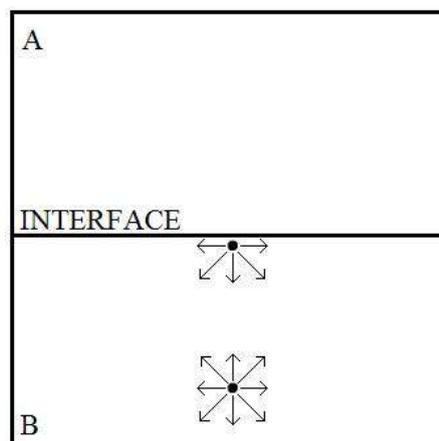


Figura 2.2 – Forças de interação para partículas no bulk e na interface

Quando as duas fases em contato são fluidas, a interface adquire uma curvatura devido à força de interação resultante, causando uma diferença de pressão na região (SHAW, 1992). A tensão interfacial  $\gamma$  é definida como a razão entre o trabalho  $W$

necessário para causar uma variação isotérmica e reversível  $\Delta A$  na área da interface e a própria variação de área. Matematicamente, em termos de variações infinitesimais:

$$\gamma = \frac{dW}{dA} \quad (2.12)$$

Embora o significado físico seja o mesmo, o termo tensão superficial é normalmente utilizado para sistemas puros, ou seja, um líquido em contato com seu vapor, enquanto a tensão interfacial refere-se a sistemas com fases de diferentes composições. Neste trabalho, o termo tensão interfacial foi preferencialmente utilizado, visto que o trabalho foca em sistemas água/óleo.

A Lei de Laplace relaciona a tensão interfacial  $\gamma$ , a diferença de pressão  $\Delta P$  produzida e os raios de curvatura  $R_1$  e  $R_2$  (ROSEN, 2004):

$$\Delta P = \gamma \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2.13)$$

Outra característica importante para a contextualização dos fenômenos interfaciais é o ângulo de contato  $\theta$  entre uma gota de líquido e uma superfície sólida, ambas envoltas por um segundo fluido. O ângulo de contato é medido entre a superfície sólida e a linha tangente ao ponto de contato com a gota de líquido de acordo com a Figura 2.3.

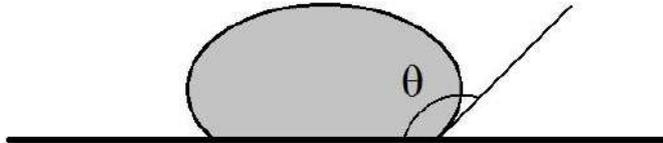


Figura 2.3 – Ângulo de contato entre um líquido e uma superfície sólida

A forma final da gota ocorre quando as fases atingem o equilíbrio. O ângulo de contato é uma medida da molhabilidade de uma superfície sólida por um líquido, sendo um parâmetro extremamente relevante para, por exemplo, a operação de reservatórios de petróleo (MOORTGAT e FIROOZABADI, 2012). A equação de Young relaciona o ângulo de contato  $\theta$  com as tensões interfaciais entre as fases (ROSEN, 2004):

$$\gamma_{LA} \cos \theta = \gamma_{SA} - \gamma_{SL} \quad (2.14)$$

onde  $\gamma_{ij}$  é a tensão interfacial entre as fases  $i$  e  $j$ ,  $L$  é o líquido,  $S$  é a superfície e  $A$  é o segundo fluido.

Estes fundamentos de fenômenos interfaciais são importantes para compreender melhor as emulsões de água em óleo, sistemas de interesse deste trabalho. As emulsões são colóides metaestáveis, isto é, sistemas compostos por uma fase dispersa em outra cuja estabilidade só é mantida sob algumas circunstâncias (LEAL-CALDERON, 2007). No caso da indústria do petróleo, a água pode estar naturalmente presente ou ser injetada nos reservatórios de petróleo, fazendo com que uma mistura bifásica (ou trifásica, se houver gás) seja obtida. Com as condições operacionais de altas pressões e escoamentos turbulentos, é comum que as duas fases cheguem à saída do poço dispersas uma na outra.

A quantidade de água associada ao processo de produção de óleo é variável, dependendo muito do estágio de operação do poço. O conteúdo de água no óleo

produzido do reservatório representa um volume ocioso, sem nenhum valor econômico. Transportar a mistura bifásica é, portanto, um prejuízo, sendo necessário separar a fase aquosa da mistura antes dos processos de refino. Adicionalmente, a água gerada no processo deve ser condicionada para reinjeção ou descarte pela remoção da fase oleosa residual, evitando possíveis contaminações do meio ambiente e recuperando o óleo que seria perdido (THOMAS, 2001).

### II.1.3. Fluidodinâmica Computacional

As equações da fluidodinâmica são, usualmente, sistemas de equações diferenciais parciais que devem ser resolvidas simultaneamente, tais como as equações da continuidade e do movimento, descritas na Seção II.1.1, e equações de balanço de energia e de massa por componente (BIRD, 2004). No caso mais geral, os problemas são tridimensionais, transientes e alguns termos de fonte podem ser adicionados às equações originais para contabilizar efeitos como tensões interfaciais ou geometrias rotacionais, por exemplo. As condições de contorno também podem ser as mais variadas possíveis, dependendo da natureza do problema.

Desta forma, os problemas de fluidodinâmica em geral raramente apresentam solução analítica e estas, quando existem, podem ser matematicamente muito complexas. A Fluidodinâmica Computacional ou CFD (do inglês, “Computational Fluid Dynamics”) é uma ferramenta muito importante para a análise de problemas que envolvem escoamentos, transferência de calor, reação química e outros fenômenos através da simulação numérica em um computador (VERSTEEG, 1995).

A estratégia básica do CFD é a discretização do domínio do problema em uma malha e a solução das equações que descrevem o sistema de forma local. Existem diversas estratégias de discretização, com destaque para os métodos de diferenças finitas, de volumes finitos e de elementos finitos. A estratégia do método das diferenças finitas é adaptada para deduzir a equação de Lattice Boltzmann na Seção III.2 e as ideias básicas deste método são melhor explicadas a seguir.

No método das diferenças finitas, o domínio é dividido em pontos com espaçamento arbitrário e as derivadas presentes nas equações diferenciais são substituídas por diferenças simples. As equações para cada ponto do domínio formam um sistema de equações interdependentes, obtendo-se as propriedades de interesse (densidade, velocidade, pressão, temperatura) para cada ponto. Quanto mais refinado for o domínio – isto é, quanto mais próximos os pontos estiverem entre si – mais precisa tende a ser a solução numérica. Entretanto, uma malha exageradamente refinada tem um custo computacional muito alto sem trazer ganhos consideráveis em precisão.

A substituição das derivadas por diferenças finitas é uma etapa crítica do processo, pois está diretamente ligada à ordem da aproximação desejada. Por exemplo, para um ponto  $i$  de um sistema unidimensional discretizado e uma propriedade  $y$  qualquer, a derivada de  $y$  com relação a  $x$  no ponto  $i$  pode ser substituída por diferenças de primeira ordem do tipo “forward” ou “backward”, Equações (2.15) e (2.16), respectivamente.

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_i \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (2.15)$$

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_i \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad (2.16)$$

Para malhas com espaçamento  $\Delta x$  constante, onde  $\Delta x = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ , uma aproximação de segunda ordem por diferenças centrais (“centered”) pode ser obtida, como na Equação (2.17).

$$\left(\frac{dy}{dx}\right)_i \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x} \quad (2.17)$$

Derivadas de maior ordem também podem ser substituídas por diferenças finitas. Além disso, também é possível obter diferenças de ordens superiores. Estas discretizações surgem naturalmente através de manipulações algébricas de expansões em série de Taylor da propriedade  $y$ . Discussões completas sobre os métodos em CFD para as equações de balanço macroscópicas podem ser encontradas em SCHÄFER (2006) e VERSTEEG (1997).

## II.2. Teoria Cinética dos Gases

### II.2.1. Estrutura Molecular dos Gases

Segundo a teoria cinética, os gases são sistemas compostos por um número muito grande de partículas com movimento aleatório e independente. A liberdade de movimento só é interrompida quando ocorre uma colisão com outra partícula ou com a fronteira do sistema.

A definição de gás ideal ou real depende do tipo de interação que as moléculas do sistema gasoso exercem entre si. Um gás é chamado ideal quando não há interações. Se as forças intermoleculares forem expressivas, o gás é chamado real. Este se comporta como ideal quando as interações são tão pequenas a ponto da energia potencial tornar-se desprezível se comparada à energia cinética das partículas. (KREMER, 2005).

Um dos modelos mais simples para um gás monoatômico quase ideal é o modelo de esferas rígidas. Cada partícula é definida como uma esfera de raio  $r$  localizada numa posição  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  com velocidade  $\mathbf{c} = (u, v, w)$  em um instante de tempo  $t$ , sem interações de longa distância.

Entretanto, para um sistema com muitas partículas e volume finito, existem interações de curto alcance entre as moléculas do gás através das colisões. As colisões são eventos aleatórios em que ocorre transferência de momento e energia entre as partículas, alterando-se a trajetória de cada partícula.

O livre caminho médio  $\lambda$  é definido como a distância média que uma partícula percorre entre duas colisões. O número de Knudsen ( $Kn$ ) é definido por:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (2.18)$$

sendo  $L$  um comprimento característico. O número de Knudsen é um número adimensional que indica qual abordagem (mecânica do contínuo, mecânica estatística ou dinâmica molecular) é mais apropriada para modelar o fenômeno em estudo.

O objetivo da teoria cinética é obter propriedades macroscópicas de um sistema a partir da sua configuração microscópica. Neste cenário, os gases ideais, bem como sua estrutura molecular, exercem um papel fundamental. Um dos resultados clássicos da teoria cinética dos gases é a demonstração de que, para um gás, a temperatura é uma medida da energia cinética média de suas moléculas, de acordo com o desenvolvimento a seguir.

Seja uma partícula isolada com velocidade  $\mathbf{c} = (u, 0, 0)$  contida em um cilindro de altura  $L$  cujo eixo central pertence ao eixo das abscissas no sistema de coordenadas cartesianas, de acordo com a Figura 2.4.

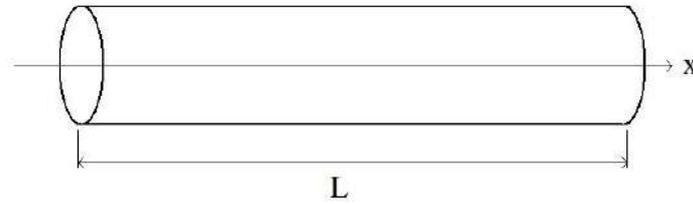


Figura 2.4 – Geometria cilíndrica

A partícula percorrerá certa distância até colidir com a parede da direita do cilindro. A força ( $F$ ) aplicada pela partícula sobre a parede é dada por:

$$F = \frac{dp}{dt} \quad (2.19)$$

onde  $p$  é a quantidade de movimento da partícula e  $t$  é o tempo. A quantidade de movimento ou momento linear é o produto entre a massa ( $m$ ) e a velocidade da partícula. Então:

$$F = \frac{d(mu)}{dt} = m \frac{du}{dt} \quad (2.20)$$

A variação de velocidade por unidade de tempo é equivalente à variação de velocidade por colisão multiplicada pela frequência de colisão. Supondo choque perfeitamente elástico, a partícula se aproxima da parede com velocidade  $u$  e, após o choque, afasta-se com velocidade  $-u$ . Assim, a variação de velocidade por colisão é  $-2u$ . Esta partícula com velocidade  $-u$  percorrerá uma distância  $L$  até se chocar com a outra parede, readquirindo velocidade  $u$ . Em seguida, percorrerá novamente uma distância  $L$  até atingir novamente a parede à direita. Portanto, a frequência de colisão será de  $u/2L$ . A força exercida pela parede sobre a partícula será, portanto:

$$F_{part} = -2mu \frac{u}{2L} = -\frac{mu^2}{L} \quad (2.21)$$

Pela terceira lei de Newton, a força exercida pela partícula sobre a parede será:

$$F = \frac{mu^2}{L} \quad (2.22)$$

A pressão ( $P$ ) é definida como a razão entre a força aplicada e a área ( $A$ ) da região em que a força atua. Então, a partícula descrita exercerá uma pressão:

$$P_{part} = \frac{mu^2}{AL} = \frac{mu^2}{V} \quad (2.23)$$

Para um sistema com  $N$  partículas com movimento limitado à direção do eixo  $x$ , admitindo-se que não há interações significativas entre as partículas, a força total exercida sobre a parede será a soma das forças individuais, ou seja:

$$F = \sum_{i=1}^N F_i \quad (2.24)$$

Utilizando-se a definição de pressão, chega-se a:

$$\begin{aligned} PA &= \sum_{i=1}^N P_i A \\ P &= \sum_{i=1}^N P_i = \frac{m}{V} \sum_{i=1}^N u_i^2 \end{aligned} \quad (2.25)$$

Definindo a média dos quadrados das velocidades:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N u_i^2}{N} \quad (2.26)$$

Portanto, a pressão de um gás unidimensional (isto é, o movimento de todas as partículas está confinado a uma mesma direção) é dada por:

$$P = \frac{Nm\langle u^2 \rangle}{V} \quad (2.27)$$

Se duas partículas viajam com trajetórias coincidentes e colidem em  $L/2$ , cada partícula nunca atinge uma das paredes, mas atinge a outra parede com o dobro da frequência do caso sem choques intermoleculares. Este argumento sustenta que o efeito global das colisões entre partículas seja nulo para a pressão do sistema, sem invalidar a Equação (2.27).

Para um gás tridimensional, com velocidade  $\mathbf{c} = (u, v, w)$ , pela definição da norma de um vetor temos  $c = \|\mathbf{c}\| = (u^2 + v^2 + w^2)^{1/2}$  ou  $c^2 = u^2 + v^2 + w^2$ . Tomando-se a média,  $\langle c^2 \rangle = \langle u^2 \rangle + \langle v^2 \rangle + \langle w^2 \rangle$ . Para um gás sem interações de longa distância, não há motivos para que uma das direções da velocidade seja privilegiada. Assim, é admitido que  $\langle u^2 \rangle = \langle v^2 \rangle = \langle w^2 \rangle$  e  $\langle c^2 \rangle = 3\langle u^2 \rangle$ . Substituindo na Equação (2.27), temos:

$$P = \frac{1}{3} \frac{Nm\langle c^2 \rangle}{V} \quad (2.28)$$

Definindo a energia cinética  $E_c$  e a energia cinética média  $\langle E_c \rangle$ :

$$E_c = \frac{1}{2} mc^2 \quad (2.29)$$

$$\langle E_c \rangle = \frac{1}{2} \langle mc^2 \rangle = \frac{1}{2} m \langle c^2 \rangle \quad (2.30)$$

Finalmente, podemos escrever a pressão como uma função da energia cinética média do sistema.

$$P = \frac{2 N \langle E_c \rangle}{3 V} \quad (2.31)$$

Pela termodinâmica, um gás ideal é um sistema descrito pela seguinte equação de estado:

$$PV = nRT \quad (2.32)$$

onde  $n$  é o número de mols,  $R$  é a constante dos gases e  $T$  é a temperatura do sistema. Como as Equações (2.31) e (2.32) devem ser equivalentes, é possível concluir que:

$$T = \frac{2 N \langle E_c \rangle}{3 nR} \quad (2.33)$$

O número de partículas e o número de mols de um sistema são relacionados pelo número de Avogadro,  $N_A = N/n$ . Este, por sua vez, pode ser simplificado com a constante dos gases pela constante de Boltzmann,  $k = R/N_A$ . Substituindo em (2.33):

$$T = \frac{2 \langle E_c \rangle}{3 k} \quad (2.34)$$

As Equações (2.31) e (2.34) provam que é possível determinar propriedades macroscópicas de um sistema através do conhecimento do seu estado microscópico. Por este motivo, a teoria cinética dos gases é classificada como um dos ramos da mecânica estatística.

## II.2.2. Distribuição de Maxwell

No início de seu desenvolvimento, a teoria cinética tinha como foco a descrição em escala microscópica da partícula. Entretanto, essa abordagem representa uma limitação prática, pois um sistema com um número muito grande de partículas exigiria um número igualmente grande de equações e variáveis para a completa caracterização deste sistema.

James C. Maxwell (1831 – 1879) introduziu uma abordagem estatística através de funções de distribuição de velocidades. Segundo Maxwell, não é necessário conhecer a posição e a velocidade de cada molécula a cada instante de tempo, sendo muito mais conveniente conhecer a probabilidade de encontrar partículas com velocidades dentro de um determinado intervalo. Seu trabalho resultou na famosa função de distribuição de Maxwell, que será deduzida a seguir (KREMER, 2005).

Considerando-se um gás ideal em equilíbrio térmico e sem influências externas, para determinar a probabilidade de encontrar uma partícula com velocidade entre  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$  – isto é, com componentes cartesianas entre  $u$  e  $u + du$ ,  $v$  e  $v + dv$  e  $w$  e  $w + dw$  – serão admitidas as seguintes hipóteses:

(a) A probabilidade de encontrar a partícula com a componente  $u$  da velocidade entre  $u$  e  $u + du$  será representada pela função  $\phi(u) du$ . Analogamente, as probabilidades para as componentes  $v$  e  $w$  serão dadas por  $\phi(v) dv$  e  $\phi(w) dw$ , respectivamente.

(b) As três componentes da velocidade da partícula são eventos independentes entre si. Consequentemente, a probabilidade de encontrar a partícula com velocidade entre  $u$  e  $u + du$ ,  $v$  e  $v + dv$  e  $w$  e  $w + dw$  é dada pelo produto das probabilidades individuais, ou seja,  $\phi(\mathbf{c}) d\mathbf{c} = \phi(u) du \phi(v) dv \phi(w) dw$ .

(c) Nenhuma das três direções tem prioridade sobre as outras.

A função  $\phi(\mathbf{c})$  representa uma distribuição contínua de probabilidades. Sendo assim, não é possível definir a probabilidade de encontrar partículas com uma velocidade exata. A integração de  $\phi$  sobre um intervalo de velocidades  $[\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2]$  resulta na probabilidade de encontrar partículas com uma velocidade  $\mathbf{c}$  tal que  $\mathbf{c}_1 \geq \mathbf{c} \geq \mathbf{c}_2$ , que, por definição, é um valor entre 0 e 1.

No problema analisado, é mais conveniente ter uma função que retorne o número provável de partículas por unidade de volume cujas componentes da velocidade encontram-se nos intervalos  $du$ ,  $dv$  e  $dw$  após a integração. Esta função é obtida multiplicando-se  $\phi(\mathbf{c}) d\mathbf{c}$  pela densidade de partículas do sistema ( $\bar{n}$ ).

$$f(u, v, w) du dv dw = \bar{n} \phi(\mathbf{c}) d\mathbf{c} \quad (2.35)$$

Pela hipótese (c), podemos reescrever  $f$  como uma função apenas de  $c = \|\mathbf{c}\| = (u^2 + v^2 + w^2)^{1/2}$ . Então:

$$f(u, v, w) = \bar{n} \phi(u) \phi(v) \phi(w) = \Phi(c) \quad (2.36)$$

Tomando o logaritmo da Equação (2.36), temos:

$$\ln \Phi(c) = \ln \bar{n} + \ln \phi(u) + \ln \phi(v) + \ln \phi(w) \quad (2.37)$$

Aplicando a diferenciação em relação a  $u$ :

$$\frac{d \ln \Phi(c)}{du} = \frac{d \ln \phi(u)}{du} \quad (2.38)$$

O primeiro termo da Equação (2.38) deve ser desenvolvido pela regra da cadeia da diferenciação de funções compostas. Para uma função  $g(y(x))$  qualquer:

$$\frac{dg(y(x))}{dx} = \frac{dg}{dy} \frac{dy}{dx} \quad (2.39)$$

Portanto:

$$\frac{d \ln \Phi(c)}{du} = \frac{d \ln \Phi(c)}{dc} \frac{dc}{du} = \frac{d \ln \Phi(c)}{dc} \frac{u}{c} \quad (2.40)$$

Substituindo em (2.38):

$$\frac{1}{c} \frac{d \ln \Phi(c)}{dc} = \frac{1}{u} \frac{d \ln \phi(u)}{du} \quad (2.41)$$

Repetindo o processo para as outras coordenadas em (2.37), é possível demonstrar que:

$$\frac{1}{c} \frac{d \ln \Phi(c)}{dc} = \frac{1}{u} \frac{d \ln \phi(u)}{du} = \frac{1}{v} \frac{d \ln \phi(v)}{dv} = \frac{1}{w} \frac{d \ln \phi(w)}{dw} = -2b \quad (2.42)$$

O segundo termo em (2.42) é função de  $u$  somente, assim como o terceiro e o quarto termos são funções apenas de  $v$  e  $w$ , respectivamente. Portanto, a Equação (2.42) só é consistente se for igual a uma constante, que será chamada de  $-2b$  por conveniência. As Equações (2.43) a (2.45) são as soluções das equações diferenciais ordinárias em (2.42).

$$\phi(u) = a_1 \exp(-b u^2) \quad (2.43)$$

$$\phi(v) = a_2 \exp(-b v^2) \quad (2.44)$$

$$\phi(w) = a_3 \exp(-b w^2) \quad (2.45)$$

onde  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  são as constantes da integração indefinida.

Substituindo (2.43) a (2.45) em (2.36):

$$\Phi(c) = f(u, v, w) = \bar{n} a^3 \exp(-b c^2) \quad (2.46)$$

onde a constante  $a^3 = a_1 a_2 a_3$  foi representada na forma de potência para facilitar os cálculos posteriores.

Uma das propriedades das distribuições de probabilidade é o uso da integração sobre o domínio para a obtenção de valores esperados ou médios. Seja  $\sigma(x, y, z)$  uma função de distribuição,  $g(x, y, z)$  uma função genérica qualquer e  $\langle g \rangle$  o valor esperado de  $g$ . Então:

$$\langle g \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x, y, z) \sigma(x, y, z) dx dy dz \quad (2.47)$$

Quando  $g(x, y, z) = 1$ , a Equação (2.47) deve resultar na unidade. Podemos usar estas propriedades para a obtenção das constantes  $a$  e  $b$  em (2.46). Como  $f$  é uma função de distribuição de probabilidades multiplicada por um fator de densidade populacional  $\bar{n}$ , a integração de  $f$  sobre todo o espaço de velocidades deverá resultar na própria densidade  $\bar{n}$ .

$$\bar{n} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(u, v, w) du dv dw \quad (2.48)$$

Como são duas incógnitas, mais uma equação é necessária para calcular  $a$  e  $b$ . Podemos utilizar a energia cinética para obter a segunda equação. Então:

$$\langle E_c \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} m c^2 f(u, v, w) du dv dw \quad (2.49)$$

Novamente, a energia cinética média obtida através da função  $f$  será uma densidade de energia, com unidade de energia/volume. Da Equação (2.34) sabemos que  $\langle E_c \rangle = 3kT/2$ . Consequentemente:

$$\langle \overline{E_c} \rangle = \bar{n} \langle E_c \rangle = \frac{3}{2} \bar{n} kT \quad (2.50)$$

Substituindo em (2.49):

$$\frac{3}{2} \bar{n} kT = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} mc^2 f(u, v, w) du dv dw \quad (2.51)$$

As constantes  $a$  e  $b$  são obtidas pela solução das Equações (2.48) e (2.51):

$$a = \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.52)$$

$$b = \frac{m}{2kT} \quad (2.53)$$

Finalmente, substituindo-se  $a$  e  $b$  em (2.46), chega-se a distribuição de velocidades de Maxwell.

$$f(u, v, w) = \bar{n} \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{mc^2}{2kT} \right) \quad (2.54)$$

Observa-se que a função  $f(u, v, w)$  é função do módulo da velocidade  $c$ , mas não de suas componentes individualmente. Assim, todas as configurações das componentes entre  $u$  e  $u + du$ ,  $v$  e  $v + dv$  e  $w$  e  $w + dw$  que resultem em velocidade com módulo entre  $c$  e  $c + dc$  terão a mesma probabilidade de ocorrer, satisfazendo a hipótese (c).

Estas partículas deverão ocupar toda a região do espaço de velocidades cuja distância até a origem esteja entre  $c$  e  $c + dc$ . Geometricamente, tal região assemelha-se a uma casca esférica de espessura  $dc$ . Com isto em mente, é possível modificar a distribuição de Maxwell de modo que ela resulte no número de partículas cujo módulo da velocidade esteja entre  $c$  e  $c + dc$  através da integração dupla de  $f$  em coordenadas esféricas.

$$\begin{aligned} \tilde{f}(c) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \bar{n} \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{mc^2}{2kT} \right) c^2 \sin \theta d\theta d\varphi \\ \tilde{f}(c) &= 4\pi c^2 \bar{n} \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{mc^2}{2kT} \right) \end{aligned} \quad (2.55)$$

É possível obter algumas propriedades dos gases ideais a partir da distribuição de Maxwell. O módulo da velocidade média  $\langle c \rangle$  de um gás em equilíbrio pode ser calculado por:

$$\langle c \rangle = \frac{\int_0^{+\infty} c \tilde{f}(c) dc}{\int_0^{+\infty} \tilde{f}(c) dc} = \sqrt{\frac{8}{\pi} \frac{k}{m} T} \quad (2.56)$$

Já a velocidade mais provável ( $c_{mp}$ ) para uma partícula desse gás é obtida derivando a distribuição de Maxwell e igualando a zero.

$$c_{mp} = \sqrt{2 \frac{k}{m} T} \quad (2.57)$$

Outra propriedade importante é velocidade média quadrática ( $c_{mq}$ ), calculada por:

$$c_{mq} = \sqrt{\langle c^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\int_0^{+\infty} c^2 \tilde{f}(c) dc}{\int_0^{+\infty} \tilde{f}(c) dc}} = \sqrt{3 \frac{k}{m} T} \quad (2.58)$$

### II.2.3. Equação de Boltzmann

Ludwig E. Boltzmann (1844 – 1906) é considerado um dos criadores da mecânica estatística. Suas ideias revolucionárias sobre a conexão entre as propriedades microscópicas e macroscópicas da matéria provocaram uma ruptura em diversas áreas da ciência como a termodinâmica, o eletromagnetismo e a teoria cinética. Um dos maiores legados de Boltzmann à ciência, em particular à teoria cinética, é a equação que leva seu nome.

A distribuição das velocidades de Maxwell apresenta uma série de restrições quanto à sua aplicabilidade, principalmente quanto à exigência de equilíbrio do sistema. Boltzmann, então, desenvolveu uma equação de transporte que modelasse a evolução dinâmica da função de distribuição de velocidades de um gás em direção ao estado de equilíbrio.

A equação de Boltzmann pode ser deduzida de diferentes maneiras, tais como métodos heurísticos, simplificações da equação de Liouville ou por argumentos puramente matemáticos. Neste trabalho, a equação de Boltzmann foi deduzida pelo tratamento da função de distribuição  $f$  como uma propriedade de transporte através do balanço integral de partículas, procedimento parecido com os aplicados para obtenção de equações de transporte em escala macroscópica na Seção II.1.1.

Considere-se um sistema gasoso unimolecular com  $N$  partículas contidas em um recipiente de volume  $V$ . Em um dado instante  $t$ , cada partícula pode ser completamente caracterizada por sua posição  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  e sua velocidade  $\mathbf{c} = (u, v, w)$ . Como são necessárias seis variáveis, é possível representar o sistema em um espaço hexadimensional chamado espaço de fase  $\mu$  onde cada molécula  $i$  está localizada em um ponto do espaço com coordenadas  $(\mathbf{x}_i, \mathbf{c}_i)$  (KREMER, 2005).

Como discutido anteriormente, esta representação não é prática, pois envolve um número extenso de equações e variáveis. Inserindo a formulação por funções de distribuição, o gás pode ser caracterizado por uma função  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$  tal que o número de moléculas por unidade de volume localizadas entre  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$  com velocidade entre  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$  no instante  $t$  seja dado por  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) dx dy dz du dv dw$ .

O passo seguinte para a obtenção da equação de Boltzmann é o balanço de partículas em um elemento de volume estacionário  $d\mu = dx dc$  do espaço de fase. A visualização geométrica deste balanço populacional é complicada por se tratar de um espaço hexadimensional. Portanto, sugere-se “decompor” o espaço de fase em dois espaços tridimensionais: um espaço  $\mu_x$  referente à posição  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  e outro espaço  $\mu_c$  para a velocidade  $\mathbf{c} = (u, v, w)$ . Assim, o volume de controle  $d\mu$  também será decomposto em  $d\mu_x$  e  $d\mu_c$ . Deve-se recordar que este artifício será utilizado apenas para facilitar a compreensão do balanço populacional sobre o espaço hexadimensional.

(i) Acúmulo de propriedade

Representa-se o termo transiente do balanço, dado por:

$$\text{Termo transiente:} \quad \int_V \frac{\partial f}{\partial t} dV \quad (2.59)$$

(ii) Efeito da advecção

Em um instante de tempo  $t$ , algumas partículas entram e outras saem de  $d\mu_x$  por efeito da advecção, isto é, devido à sua velocidade. Fazendo o balanço integral sobre as superfícies de  $d\mu_x$ , temos:

$$- \int_{S_x} f(\mathbf{c} \cdot \hat{\mathbf{n}}_x) dS_x \quad (2.60)$$

sendo  $\hat{\mathbf{n}}_x$  o vetor normal unitário à superfície de controle  $S_x$ . Aplicando o teorema de Gauss, o balanço pode ser reescrito na forma volumétrica como:

$$- \int_{V_x} \nabla \cdot (f\mathbf{c}) dV_x \quad (2.61)$$

sendo  $V_x$  o volume de controle do espaço  $\mu_x$  em que o balanço é realizado. Como a velocidade não é função da posição, o termo divergente pode ser desenvolvido da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (f\mathbf{c}) &= f \frac{\partial c_x}{\partial x} + c_x \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial c_y}{\partial y} + c_y \frac{\partial f}{\partial y} + f \frac{\partial c_z}{\partial z} + c_z \frac{\partial f}{\partial z} \\ \nabla \cdot (f\mathbf{c}) &= c_x \frac{\partial f}{\partial x} + c_y \frac{\partial f}{\partial y} + c_z \frac{\partial f}{\partial z} = \mathbf{c} \cdot \nabla f \end{aligned} \quad (2.62)$$

Substituindo em (2.61):

$$- \int_{V_x} \mathbf{c} \cdot \nabla f dV_x \quad (2.63)$$

A formulação de (2.63) supõe que o espaço é tridimensional. Generalizando para o espaço de fase  $\mu$ , o termo advectivo do balanço populacional é dado por:

Termo advectivo: 
$$-\int_V \mathbf{c} \cdot \nabla_x f dV \quad (2.64)$$

onde  $(\nabla_x)$  é o operador gradiente sobre as coordenadas espaciais  $(x, y, z)$ .

(iii) Efeito de forças externas

A força é definida como a taxa de variação da quantidade de movimento de um corpo ou partícula. Portanto, quando uma força externa age sobre um sistema, as partículas deste sistema são aceleradas, alterando suas velocidades.

Em um instante de tempo  $t$ , algumas partículas entram e outras saem de  $d\mu_c$  por efeito de forças externas, isto é, devido à aceleração imposta sobre as partículas. Fazendo o balanço integral sobre as superfícies de  $d\mu_c$ , temos:

$$-\int_{S_c} f(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{n}}_c) dS_c \quad (2.65)$$

onde  $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m$  é o vetor aceleração e  $\hat{\mathbf{n}}_c$  é o vetor normal unitário à superfície de controle  $S_c$ . Observa-se que a Expressão (2.65) é análoga à Equação (2.60). Neste caso, a única diferença é a substituição de  $\mathbf{c}$  por  $\mathbf{a}$  no integrando. Isto ocorre porque o espaço  $\mu_c$  é referente às coordenadas de velocidade  $\mathbf{c} = (u, v, w)$ , cuja taxa de variação no tempo é a própria aceleração  $\mathbf{a} = d\mathbf{c}/dt$ , justificando a mudança.

Aplicando o mesmo procedimento do termo advectivo, chega-se a:

Termo de forças externas: 
$$-\int_V \mathbf{a} \cdot \nabla_c f dV \quad (2.66)$$

onde  $(\nabla_c)$  é o operador gradiente sobre as coordenadas de velocidade  $(u, v, w)$ .

(iv) Efeito das colisões

Uma colisão entre partículas é um evento de curta duração em que pode ocorrer transferência momento e energia entre estas partículas. No desenvolvimento da equação de Boltzmann deste trabalho, o termo de colisões, embora fundamentalmente mais complexo, é análogo ao termo de geração/consumo das equações de transporte macroscópicas.

Quando duas partículas colidem, cada uma pode sofrer alterações significativas na sua trajetória e na sua velocidade. Assim, moléculas que originalmente não entrariam ou sairiam de um elemento de volume  $d\mu$  do espaço de fase em um intervalo de tempo  $\Delta t$  podem vir a atravessar a superfície de controle após uma ou mais colisões.

São admitidas as seguintes hipóteses (KREMER, 2005):

(a) Só ocorrem colisões binárias.

(b) O efeito das forças externas é desprezível durante a colisão.

(c) As velocidades de duas partículas em qualquer posição e qualquer instante de tempo não são interdependentes (caos molecular).

(d) A função de distribuição  $f$  é constante para distâncias da ordem do tamanho das moléculas, mas variável para distâncias da ordem do livre caminho médio.

A dedução do fator de colisão foge ao escopo deste trabalho, mas é possível mostrar que este é uma função integral da distribuição de partículas  $\Omega(f)$  dado por (KREMER, 2005):

$$\Omega = \int (f_1' f_2' - f_1 f_2) c_{rel} b db d\varepsilon d\mathbf{c}_1 \quad (2.67)$$

onde  $b$  é o parâmetro de impacto,  $\varepsilon$  é o ângulo azimutal e  $c_{rel}$  é o módulo da velocidade relativa entre as partículas. As partículas 1 e 2 envolvidas na colisão tem velocidades pré-colisionais  $\mathbf{c}_1$  e  $\mathbf{c}_2$  com distribuições  $f_1$  e  $f_2$  e velocidades pós-colisionais  $\mathbf{c}'_1$  e  $\mathbf{c}'_2$  com distribuições  $f'_1$  e  $f'_2$ , respectivamente.

Então, o termo integral de colisão pode ser escrito na forma de termo fonte na equação de balanço:

$$\text{Termo de colisões:} \quad \int_V \Omega(f) dV \quad (2.68)$$

Com todos os termos definidos, podemos construir a equação de balanço populacional: {Termo transiente} = {Termo de advecção} + {Termo de forças externas} + {Termo de colisões}.

$$\int_V \frac{\partial f}{\partial t} dV = \int_V -\mathbf{c} \cdot \nabla_x f dV + \int_V -\mathbf{a} \cdot \nabla_c f dV + \int_V \Omega(f) dV \quad (2.69)$$

A Equação (2.69) deve ser válida para qualquer volume  $V$  do espaço de fase. Sendo assim, podemos remover a formulação integral e rearranjar os termos, chegando, finalmente, à equação de Boltzmann:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla_x f + \mathbf{a} \cdot \nabla_c f = \Omega(f) \quad (2.70)$$

Apesar da aparência simples, a equação de Boltzmann é muito complexa. Matematicamente, ela pode ser classificada como uma equação íntegro-diferencial parcial, onde a função principal  $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ , possui três coordenadas de posição e três coordenadas de velocidade, além de variar no tempo. A principal dificuldade para resolver esta equação analítica ou numericamente encontra-se no termo integral de colisão. Uma estratégia possível e que será adotada neste trabalho em capítulos posteriores é a substituição de  $\Omega(f)$  por uma função linear de  $f$  (aproximação BGK).

Fisicamente, é possível observar através da equação de Boltzmann que a função de distribuição de velocidades de um gás fora do equilíbrio evolui dinamicamente em direção à distribuição de Maxwell. Analisando as propriedades de sua equação, Boltzmann mostrou que qualquer função  $f$  que satisfaça (2.70) também satisfaz a inequação (SUCCI, 2001):

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (2.71)$$

onde o funcional  $H$  é dado por:

$$H(t) = \int f \ln f \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{c} \quad (2.72)$$

Este teorema é conhecido como Teorema H de Boltzmann. Esta propriedade  $H$  tende à igualdade em (2.71) conforme o sistema esgota todo o seu potencial evolutivo e sua distribuição de velocidades se aproxima da distribuição de Maxwell (condição de equilíbrio). O funcional  $H$  tem uma clara relação com a entropia, uma das mais importantes propriedades termodinâmicas. Ambas as propriedades dão uma direção para a evolução temporal de um sistema até atingir o equilíbrio.

Apesar da complexa base teórica por trás da dedução e das propriedades da equação de Boltzmann, a função de distribuição de velocidades  $f$  tem como grande aplicação prática a recuperação das propriedades macroscópicas do sistema. Dada uma propriedade específica  $\psi = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$ , é possível obter a média desta propriedade sobre o espaço de velocidades, de acordo com a Equação (2.73). Este procedimento elimina a dependência da velocidade e resulta na densidade da propriedade  $\Psi = \Psi(\mathbf{x}, t)$ .

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int \psi(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c} \quad (2.73)$$

Substituindo  $\psi$  pela massa da partícula  $m$ , podemos calcular a densidade de massa do fluido  $\rho = \rho(\mathbf{x}, t)$ :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int m f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c} \quad (2.74)$$

Se  $\psi$  for substituído pela quantidade de movimento da partícula  $p = m\mathbf{c}$ , podemos calcular a densidade de momento linear do fluido  $\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ :

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int m\mathbf{c} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c} \quad (2.75)$$

Aqui, cabe ressaltar que o vetor  $\mathbf{u} = (u, v, w)$  representa a velocidade macroscópica do fluido, enquanto o vetor  $\mathbf{c} = (u, v, w)$  é a velocidade microscópica da partícula. Podemos definir uma velocidade relativa  $\mathbf{C}$  como a diferença entre essas duas velocidades:

$$\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u} \quad (2.76)$$

Ao substituir  $\psi$  pela energia interna da partícula  $E_u = mC^2/2$ , onde  $C = \|\mathbf{C}\|$ , chega-se à densidade de energia interna do fluido  $\rho(\mathbf{x}, t)e_u(\mathbf{x}, t)$ , onde  $e_u$  é a energia interna do fluido por unidade de massa (MOHAMAD, 2005):

$$\rho(\mathbf{x}, t) e_u(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int mC^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \, d\mathbf{c} \quad (2.77)$$

Outras propriedades ainda podem ser determinadas. Segundo KREMER (2005), o tensor tensão  $\tilde{\tau}_{ij}(\mathbf{x}, t)$  é definido como:

$$\tilde{\tau}_{ij}(\mathbf{x}, t) = - \int m \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_j f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (2.78)$$

A pressão do gás é definida como:

$$P(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{3} \int m \mathbf{C}^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (2.79)$$

Substituindo (2.77) em (2.79), temos:

$$P(\mathbf{x}, t) = \frac{2}{3} \rho(\mathbf{x}, t) e_u(\mathbf{x}, t) \quad (2.80)$$

que é equivalente à Equação (2.31).

KREMER (2005) ainda demonstra como é possível deduzir a equação geral de transporte de propriedades a partir da equação de Boltzmann, da qual são obtidas as equações macroscópicas da continuidade, do movimento e da energia. WOLF-GLADROW (2005) faz demonstração equivalente a partir da expansão de Chapman-Enskog. Estas deduções não serão demonstradas aqui por fugir ao escopo do trabalho.

Com a capacidade de recuperar as equações da continuidade e do movimento, naturalmente a equação de Boltzmann passou a ser utilizada na modelagem da dinâmica de fluidos como uma alternativa aos métodos baseados na mecânica do contínuo. O Capítulo III apresenta os conceitos básicos do método Lattice Boltzmann.

## Capítulo III – Método Lattice Boltzmann

### III.1. Autômatos Celulares e o Método Lattice-Gas

Os autômatos celulares foram desenvolvidos por Stanislas Ulam, John Von Neumann e Konrad Zuse em torno de 1950 com o objetivo de estudar sistemas computacionais auto-replicativos. Um autômato é como uma rede de arranjos ou células regulares em uma, duas ou três dimensões. Cada célula possui um número finito de estados representado por variáveis booleanas e atualizados a cada passo de tempo de acordo com os estados das células vizinhas (WOLF-GLADROW, 2005).

A evolução dos estados discretos segue regras de atualização que dependem apenas da vizinhança imediata de cada célula. WOLFRAM (1986, 2002) determinou um conjunto de 256 regras possíveis para a atualização de autômatos celulares unidimensionais de oito bits – isto é, quando os estados discretos variam de 00000000 a 11111111 (SUKOP, 2006). A teoria dos autômatos celulares é a base do método Lattice-Gas (LGCA), que, por sua vez, é o precursor do método Lattice Boltzmann.

Segundo WOLF-GLADROW (2005), o método Lattice-Gas foi criado para adaptar e aplicar a lógica dos autômatos celulares à dinâmica dos gases. O primeiro modelo foi proposto por Hardy, de Pazzis e Pomeau em 1973, sendo nomeado HPP em homenagem aos autores.

No método Lattice-Gas, o domínio é dividido segundo uma geometria regular e as partículas são alocadas nos nós da malha gerada pela divisão. A escolha da geometria para os lattices implica em um número finito de direções em que as partículas podem se propagar, podendo ou não haver partículas em cada uma dessas direções.

O HPP é um modelo de autômato celular do tipo lattice-gas em que os lattices são quadrados (WOLF-GLADROW, 2005). O modelo HPP está representado na Figura 3.1. Por questões de representação, os círculos ao redor do nó indicam a presença (círculo preenchido) ou ausência (círculo em branco) de partículas movendo-se na direção correspondente.

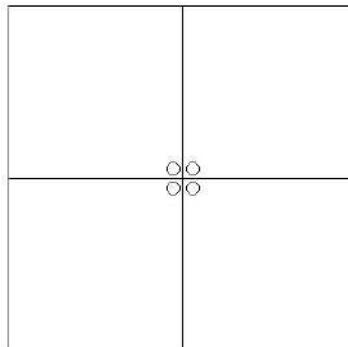


Figura 3.1 – Modelo HPP

A dinâmica do gás é simulada por sucessivas colisões e propagações das partículas. Estas duas etapas formam as regras de atualização características dos autômatos celulares. No modelo HPP só existe uma regra de colisão: quando duas partículas encontram-se na mesma direção e a outra direção não está ocupada, ambas as partículas mudam de direção. Esta regra está ilustrada na Figura 3.2. Após a etapa de colisão, as partículas propagam-se para os lattices vizinhos, de acordo com a Figura 3.3.

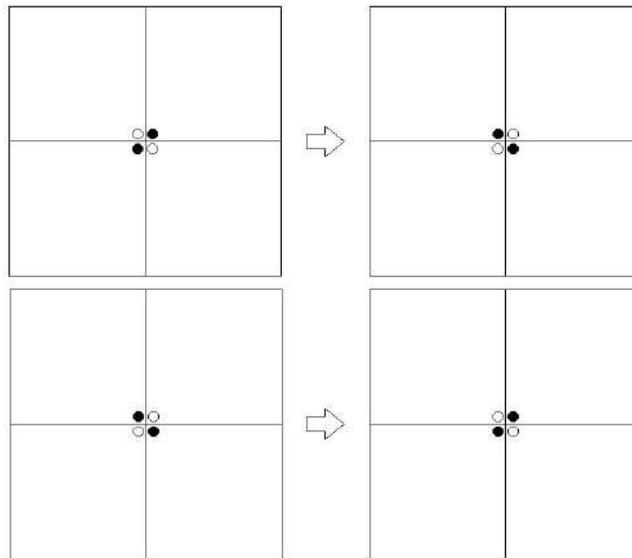


Figura 3.2 – Lattices antes e depois da colisão no modelo HPP

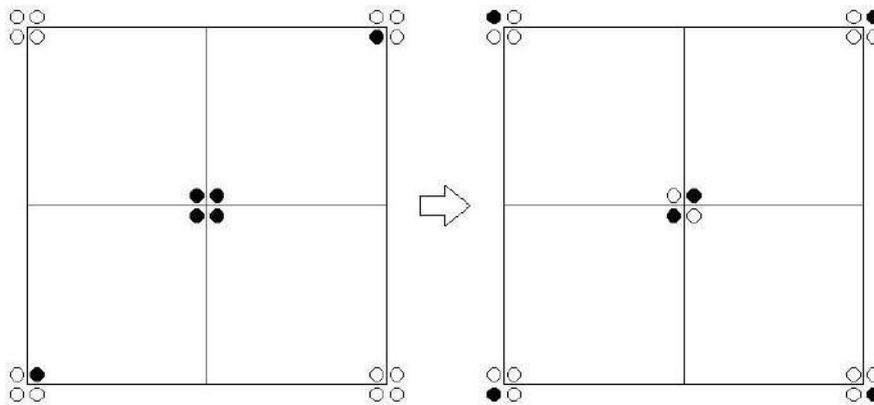


Figura 3.3 – Propagação das partículas no modelo HPP

Outros modelos em duas e três dimensões com diferentes geometrias de lattices foram desenvolvidos. No caso bidimensional, um dos modelos mais bem sucedidos é o FHP, proposto por Frisch, Hasslacher e Pomeau em 1986. Neste modelo, o domínio é dividido em triângulos de modo que os lattices tenham uma simetria hexagonal (Figura 3.4). WOLF-GLADROW (2005) traz uma discussão detalhada dos modelos de autômatos celulares do tipo lattice-gas.

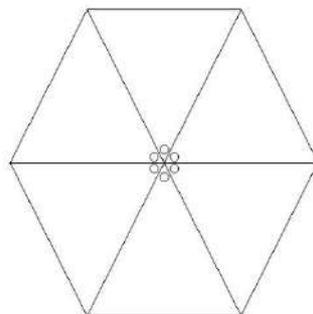


Figura 3.4 – Modelo FHP

As propriedades macroscópicas são recuperadas a partir dos números de ocupação  $n_i$  em que o índice  $i$  é referente à direção (no modelo HPP,  $i = 1, 2, 3$  ou  $4$ ).

Este número pode ser 0 ou 1 para o caso de ausência ou presença de partícula, respectivamente, e o somatório do número médio de ocupação  $N_i = \langle n_i \rangle$  em todas as direções  $i$  resulta na densidade de massa do sistema. Para o modelo HPP:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^4 N_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.1)$$

Já a densidade de momento do sistema para o modelo HPP é calculada por:

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^4 \tilde{\mathbf{c}}_i N_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.2)$$

onde  $\tilde{\mathbf{c}}$  é a velocidade virtual do método Lattice-Gas, cujas componentes no modelo HPP são:

$$\tilde{\mathbf{c}}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1) \quad (3.3)$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1) \quad (3.4)$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, -1) \quad (3.5)$$

$$\tilde{\mathbf{c}}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1) \quad (3.6)$$

Observa-se a semelhança das Equações (3.1) e (3.2) com as Equações (2.74) e (2.75). Em ambos os casos, a informação da distribuição das partículas é utilizada para recuperar propriedades macroscópicas.

Historicamente, o método Lattice Boltzmann (LBM, do inglês “Lattice Boltzmann method”) surge como uma evolução do método Lattice-Gas para corrigir alguns dos seus problemas intrínsecos. A proposta do método é tratar o sistema através de uma função de distribuição de partículas que obedeça a equação de Boltzmann, dada pela Equação (2.70).

Segundo WOLF-GLADROW (2005), os modelos do LBM foram introduzidos por MCNAMARA e ZANETTI (1988) para substituir o campo de variáveis booleanas por variáveis contínuas. Esta mudança eliminou ruídos típicos do Lattice-Gas e melhorou a qualidade das simulações, fazendo do Lattice Boltzmann uma classe independente e com grande potencial para problemas de fluidodinâmica computacional.

### III.2. Equação de Lattice Boltzmann

A equação básica do método Lattice Boltzmann surge da discretização da equação de Boltzmann sem forças de campo (MOHAMAD, 2005):

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \Omega(f) \quad (3.7)$$

Como discutido na Seção II.2.3, a função de distribuição  $f$  determina o número de partículas por unidade de volume no instante  $t$  situadas entre  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$  com velocidade entre  $\mathbf{c}$  e  $\mathbf{c} + d\mathbf{c}$ .

WOLF-GLADROW (2005) demonstra como deduzir a equação do LBM a partir da Equação (3.7). A primeira modificação é a substituição do termo de colisão  $\Omega(f)$  por uma aproximação linear proposta por Bhatnagar, Gross e Krook, a chamada aproximação BGK, de acordo com a Equação (3.8). O termo de colisão é assumido como proporcional à diferença entre a distribuição de partículas atual e a distribuição de equilíbrio,  $f^{eq}$ , que é a própria distribuição de Maxwell. O coeficiente de proporcionalidade  $\tau$  é chamado fator ou tempo de relaxação e é um dos parâmetros mais importantes do método Lattice Boltzmann.

$$\Omega(f) = \frac{1}{\tau} (f^{eq} - f) \quad (3.8)$$

A segunda etapa para deduzir a equação do LBM é a limitação das velocidades microscópicas em um número finito de direções. Assim:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq} - f_i) \quad (3.9)$$

sendo que o subscrito  $i$  indica uma das direções discretas.

Esta limitação das direções para a velocidade está diretamente relacionada à discretização do domínio da rede (lattice). No LBM, o esquema numérico de discretização recebe, usualmente, a notação DnQm, sendo  $n$  o número de dimensões e  $m$  o número de direções possíveis. Neste trabalho, utilizou-se o modelo D2Q9, uma rede bidimensional com nove direções para a velocidade, de acordo com a Figura 3.5.

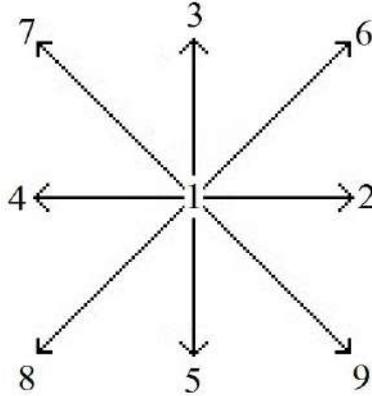


Figura 3.5 – Lattice D2Q9

A Equação (3.9) é a forma discreta e simplificada da equação de Boltzmann. Esta equação pode ser adimensionada por um comprimento característico  $L$ , uma velocidade  $U$ , uma densidade  $n_{ref}$  e o tempo entre colisões  $t_c$ :

$$\frac{\partial \hat{f}_i}{\partial \hat{t}} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\hat{\mathbf{x}}} \hat{f}_i = \frac{1}{\hat{\tau} \epsilon} (\hat{f}_i^{eq} - \hat{f}_i) \quad (3.10)$$

onde  $\hat{f} = f/n_{ref}$ ,  $\hat{t} = t U / L$ ,  $\mathbf{e} = \mathbf{c} / U$ ,  $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} / L$ ,  $\hat{\tau} = \tau/t_c$  e  $\epsilon = t_c U / L$ . O parâmetro  $\epsilon$  é parecido com o número de Knudsen, Equação (2.18).

O último passo para chegar à equação do LBM é a discretização da Equação (3.10), substituindo-se as derivadas por diferenças finitas. WOLF-GLADROW (2005) demonstra que a aplicação do método de Euler implícito para a discretização temporal e diferenças finitas do tipo “forward” para a discretização espacial levam às Equações (3.11) a (3.14):

$$\frac{\partial \hat{f}_i}{\partial \hat{t}} \approx \frac{\hat{f}_i(\hat{\mathbf{x}}, \hat{t} + \Delta \hat{t}) - \hat{f}_i(\hat{\mathbf{x}}, \hat{t})}{\Delta \hat{t}} \quad (3.11)$$

$$e_{x_i} \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial \hat{x}} \approx e_{x_i} \frac{\hat{f}_i(\hat{x} + \Delta \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{t} + \Delta \hat{t}) - \hat{f}_i(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{t} + \Delta \hat{t})}{\Delta \hat{x}} \quad (3.12)$$

$$e_{y_i} \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial \hat{y}} \approx e_{y_i} \frac{\hat{f}_i(\hat{x}, \hat{y} + \Delta \hat{y}, \hat{z}, \hat{t} + \Delta \hat{t}) - \hat{f}_i(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{t} + \Delta \hat{t})}{\Delta \hat{y}} \quad (3.13)$$

$$e_{z_i} \frac{\partial \hat{f}_i}{\partial \hat{z}} \approx e_{z_i} \frac{\hat{f}_i(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z} + \Delta \hat{z}, \hat{t} + \Delta \hat{t}) - \hat{f}_i(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{t} + \Delta \hat{t})}{\Delta \hat{z}} \quad (3.14)$$

sendo  $\Delta \hat{t} = \Delta t U / L$ . Fazendo-se a velocidade do lattice  $\mathbf{e} = \Delta \hat{\mathbf{x}} / \Delta \hat{t}$  e assumindo que o passo de tempo é igual ao tempo de colisão,  $\Delta t = t_c$ , então a Equação (3.10) é simplificada para:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (3.15)$$

Na Equação (3.15), o símbolo para variáveis adimensionais (^) foi abandonado para facilitar a notação. O lado direito desta equação representa o processo de colisão de partículas, que se rearranjam no lattice para se aproximar da distribuição de equilíbrio, conforme a Figura 3.6.

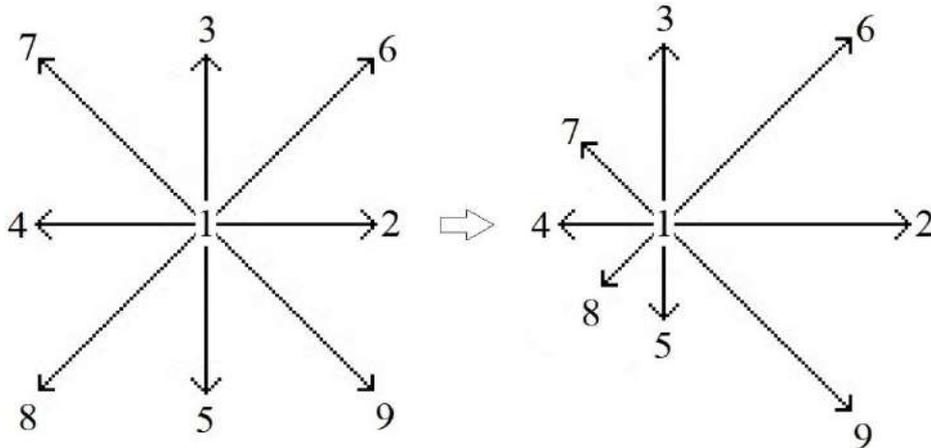


Figura 3.6 – Distribuição de partículas antes e depois da colisão

O lado esquerdo da Equação (3.15) representa a etapa de propagação das partículas. As partículas que se movimentam em uma direção e sentido no instante  $t$  ocupam o lattice imediatamente vizinho no instante  $t + \Delta t$ , com a mesma direção e sentido de antes da propagação, de acordo com a Figura 3.7.

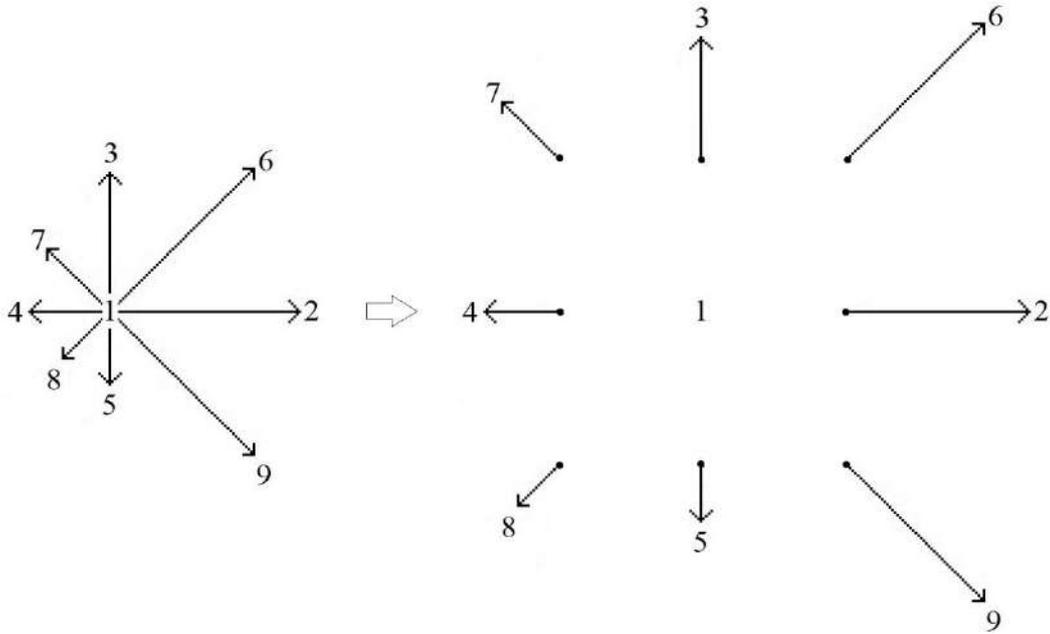


Figura 3.7 – Distribuição de partículas antes e depois da propagação

A Equação (3.15) tem um significado físico claro quanto aos fenômenos de transporte. A distância entre a distribuição de velocidades e sua configuração de equilíbrio atua como força motriz para os transportes molecular e macroscópico de propriedades, modificando a direção e o sentido do movimento das partículas na etapa de colisão. O efeito resultante das colisões é transportado por todo o domínio pela etapa de propagação. É a distribuição de equilíbrio que permite ao método Lattice Boltzmann modelar interações complexas com mais facilidade que os métodos tradicionais de CFD.

Assim como no método Lattice-Gas, as propriedades macroscópicas são recuperadas a partir das distribuições de partículas. A densidade mássica é calculada por:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m f_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.16)$$

sendo  $m$  o número de direções discretas do lattice escolhido. Já a densidade de momento é calculada de acordo com:

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^m \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.17)$$

Neste trabalho foi escolhido o modelo de rede (lattice) D2Q9 para executar os cálculos de propriedades do escoamento de emulsões de água em óleo. Maiores detalhes quanto aos algoritmos do método Lattice Boltzmann serão discutidos no Capítulo IV.

### III.3. Condições de Contorno

Em qualquer método de fluidodinâmica computacional é preciso definir condições especiais para o contorno do domínio (SCHÄFER, 2006). No caso do LBM, cada lattice deve receber partículas dos lattices vizinhos na etapa de propagação. Nos

contornos, entretanto, alguns destes vizinhos não existem, exigindo um tratamento diferenciado para estes lattices. A Figura 3.8 mostra o caso de um nó (destacado em vermelho) situado em um contorno à esquerda do domínio. As distribuições nas posições 2, 6 e 9 deste nó são desconhecidas após a propagação.

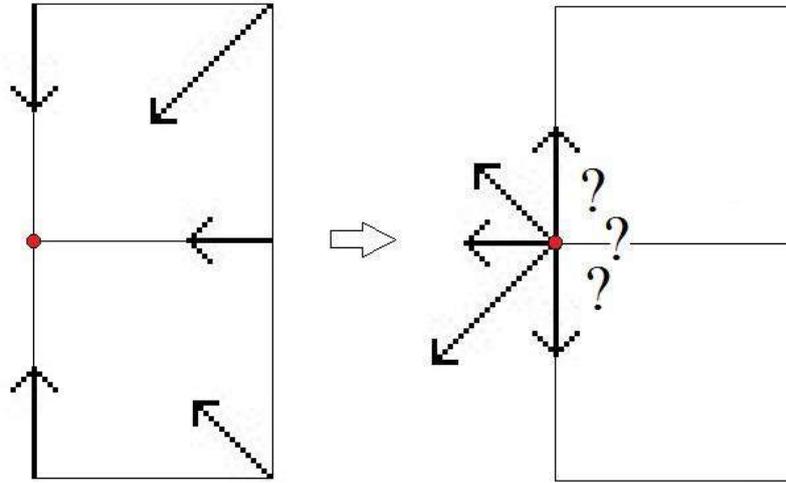


Figura 3.8 – Problema de contorno à esquerda do domínio

No problema do escoamento em um tubo, que é o problema de interesse deste trabalho, existem três regiões de contorno que necessitam de tratamento especial: a entrada, a saída e as paredes do domínio. Alguns esquemas numéricos para condições de contorno no método Lattice Boltzmann foram propostos (INAMURO et al., 1995, ZOU e HE, 1997 e LATT e CHOPARD, 2007), sendo escolhido o método de ZOU e HE (1997) para as simulações deste trabalho devido a sua facilidade de implementação.

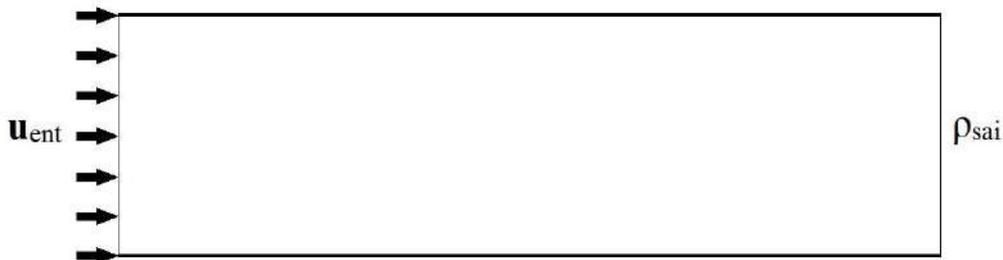


Figura 3.9 – Escoamento com algumas condições conhecidas

Segundo SUKOP (2006), as condições de contorno de Zou e He podem ser de dois tipos: de Von Neumann (fluxo/velocidade conhecida) ou de Dirichlet (pressão/densidade conhecida). Seja o sistema bidimensional dado pela Figura 3.9 tal que sejam conhecidas a velocidade de entrada ( $\mathbf{u}_{ent}$ ) e a densidade de saída ( $\rho_{sai}$ ). Para uma condição de contorno de Von Neumann à esquerda, a seguinte equação é obtida rearranjando-se o balanço de massa em (3.16):

$$f_2 + f_6 + f_9 = \rho_{ent} - (f_1 + f_3 + f_4 + f_5 + f_7 + f_8) \quad (3.18)$$

As distribuições nas direções 2, 6 e 9 foram escritas separadamente em (3.18) porque são as incógnitas de interesse do problema de contorno, além da densidade  $\rho_{ent}$ , que não é especificada neste caso. Repetindo o procedimento para o balanço de momento (3.17), considerando as duas componentes da velocidade  $\mathbf{u}_{ent} = (u_{ent}, v_{ent})$ :

$$f_2 + f_6 + f_9 = \rho_{ent} u_{ent} + (f_4 + f_7 + f_8) \quad (3.19)$$

$$f_6 - f_9 = \rho_{ent} v_{ent} + (f_5 - f_3 + f_8 - f_7) \quad (3.20)$$

As Equações (3.18) a (3.20) formam um sistema de três equações e quatro incógnitas:  $f_2$ ,  $f_6$ ,  $f_9$  e  $\rho$ . A estratégia de Zou e He para acrescentar uma quarta equação ao sistema é admitir que as distribuições fora do equilíbrio na direção normal ao contorno são iguais. Para o contorno à esquerda, isto implica em:

$$f_2 - f_2^{eq} = f_4 - f_4^{eq} \quad (3.21)$$

WOLF-GLADROW (2005) demonstra que a diferença entre as distribuições de equilíbrio é dada por:

$$f_2^{eq} - f_4^{eq} = \frac{2}{3} \rho_{ent} u_{ent} \quad (3.22)$$

Portanto, temos:

$$f_2 = f_4 + \frac{2}{3} \rho_{ent} u_{ent} \quad (3.23)$$

A Equação (3.23) resolve uma das incógnitas do sistema. As demais são obtidas pela substituição da Equação (3.23) nas Equações (3.18) a (3.20). Com alguma manipulação algébrica, é possível demonstrar que:

$$\rho_{ent} = \frac{f_1 + f_3 + f_5 + 2(f_4 + f_7 + f_8)}{1 - u_{ent}} \quad (3.24)$$

$$f_6 = f_8 + \frac{1}{6} \rho_{ent} u_{ent} + \frac{1}{2} \rho_{ent} v_{ent} + \frac{1}{2} (f_5 - f_3) \quad (3.25)$$

$$f_9 = f_7 + \frac{1}{6} \rho_{ent} u_{ent} - \frac{1}{2} \rho_{ent} v_{ent} - \frac{1}{2} (f_5 - f_3) \quad (3.26)$$

Para a condição de contorno de Dirichlet à direita do domínio, as distribuições nas direções 4, 7 e 8 são desconhecidas, além de uma das componentes da velocidade  $\mathbf{u}_{sai} = (u_{sai}, v_{sai})$ . Admitindo-se que a velocidade na direção  $y$  é conhecida e repetindo-se o procedimento sobre os balanços de massa e momento, temos:

$$f_4 + f_7 + f_8 = \rho_{sai} - (f_1 + f_2 + f_3 + f_5 + f_6 + f_9) \quad (3.27)$$

$$f_4 + f_7 + f_8 = -\rho_{sai} u_{sai} + (f_2 + f_6 + f_9) \quad (3.28)$$

$$f_7 - f_8 = \rho_{sai} v_{sai} + (f_5 - f_3 + f_9 - f_6) \quad (3.29)$$

Como a direção normal ao contorno à direita é a mesma do contorno à esquerda, a Equação (3.23) também é válida para a região de saída, substituindo-se  $\rho_{ent}$  e  $u_{ent}$  por  $\rho_{sai}$  e  $u_{sai}$ , respectivamente. Repetindo o procedimento de substituição e

manipulação algébrica anterior, chega-se às seguintes equações para a condição de contorno de Dirichlet à direita:

$$u_{sai} = -1 + \frac{f_1 + f_3 + f_5 + 2(f_2 + f_6 + f_9)}{\rho_{sai}} \quad (3.30)$$

$$f_7 = f_9 - \frac{1}{6}\rho_{sai}u_{sai} + \frac{1}{2}\rho_{sai}v_{sai} + \frac{1}{2}(f_5 - f_3) \quad (3.31)$$

$$f_8 = f_6 - \frac{1}{6}\rho_{sai}u_{sai} - \frac{1}{2}\rho_{sai}v_{sai} - \frac{1}{2}(f_5 - f_3) \quad (3.32)$$

A configuração da Figura 3.9 é a mais comum para problemas de escoamento em geral, mas as condições de contorno de Von Neumann e Dirichlet podem ser adaptadas para qualquer contorno, inclusive para as paredes.

É importante ressaltar que a pressão e a densidade estão correlacionadas por uma equação de estado no método Lattice Boltzmann (SUKOP, 2006). Para um gás ideal, a equação de estado usada no modelo D2Q9 é:

$$P = \frac{\rho}{3} \quad (3.33)$$

Outra condição de contorno largamente utilizada no LBM para regiões de parede é a chamada “bounceback” (MOHAMAD, 2005). Neste esquema, uma distribuição de partículas que esteja em rota de colisão com um obstáculo sólido é realocada para o sentido oposto ao original, retornando para o domínio do fluido (Figura 3.10). Esta inversão da distribuição pode ser feita na etapa de colisão ou na etapa de propagação. Quando é executada na etapa de colisão, alguns nós são atribuídos à região da parede como nós sólidos e armazenam a informação proveniente da propagação dos lattices vizinhos em um passo de tempo. A inversão é executada no passo de tempo seguinte e a distribuição retorna ao domínio do fluido na propagação.

Quando o “bounceback” é executado na etapa de propagação, todo o processo de inversão e propagação ocorre no mesmo passo de tempo, como se a parede estivesse no meio do caminho entre o nó sólido e o nó fluido. Por este motivo, esta modalidade é chamada “halfway bounceback”.

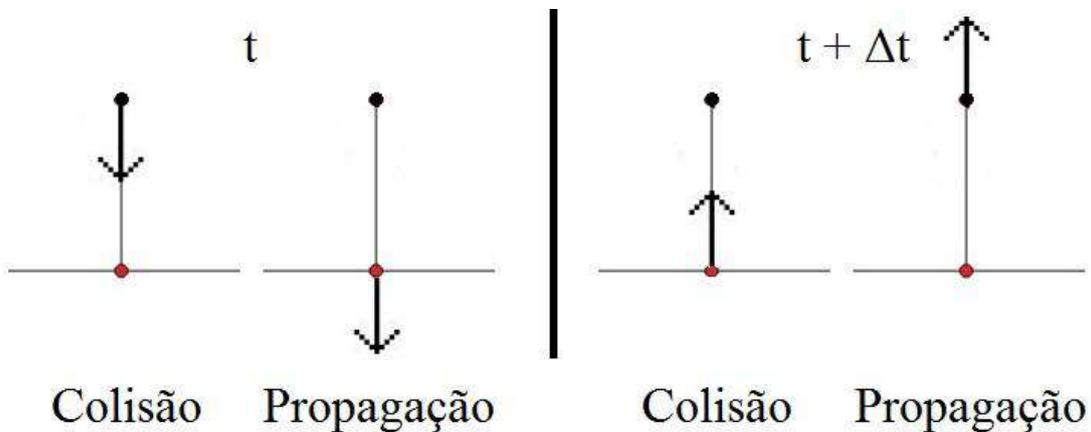


Figura 3.10 – Condição de contorno “bounceback”

### III.4. Conversão entre Dados Físicos e Virtuais

Como demonstrado na Seção III.2, a equação fundamental do método Lattice Boltzmann trabalha com variáveis adimensionais. É preciso, portanto, estabelecer uma correlação entre as variáveis calculadas no método e as propriedades reais do sistema. Segundo KRÜGER (2011), esta conexão entre o mundo virtual e o mundo real é feita através de fatores de conversão. Para uma propriedade  $N$  qualquer, existe um fator de conversão  $C_N$  tal que:

$$N = C_N \tilde{N} \quad (3.34)$$

Para garantir que a simulação seja equivalente ao problema real, o método Lattice Boltzmann utiliza o conceito de similaridade (FOX, 2012). Dois problemas que tenham números adimensionais idênticos devem apresentar o mesmo padrão de comportamento. Uma vez obtidos os resultados da simulação via LBM, a conversão dos dados virtuais para dados reais é, então, feita pelos fatores de conversão  $C_N$  correspondentes a cada propriedade de interesse.

Os fatores de conversão não são linearmente independentes (KRÜGER, 2011). O procedimento de conversão de dados deve ser iniciado pela atribuição arbitrária de alguns parâmetros, usualmente os que estão relacionados ao espaço e ao tempo, que servirão como uma base para o cálculo dos demais. Este procedimento é parecido com o Teorema Pi de Buckingham da análise dimensional. O Teorema Pi não será desenvolvido aqui, pois foge ao escopo do trabalho. É possível encontrar uma descrição completa em FOX (2012).

A determinação do fator de conversão espacial é consequência da definição do número de lattices da malha numérica. Já o fator de conversão temporal depende da escolha do tempo de relaxação do fluido,  $\tau$ . Questões de estabilidade numérica podem surgir da definição destes dois fatores, fazendo com que esta etapa seja importante para uma simulação bem sucedida. A Seção V.1.1 mostra detalhadamente a análise dimensional e a determinação dos fatores de conversão para o problema do escoamento de Poiseuille.

## Capítulo IV – Metodologia

Neste trabalho foi proposta uma metodologia de fluidodinâmica computacional usando o método Lattice Boltzmann dividida em duas etapas: a geração dos dados e a visualização dos resultados.

A etapa de geração dos dados foi executada a partir de código em Fortran. O código utilizado aqui foi transcrito e adaptado do trabalho de CARMO (2013), originalmente escrito em MATLAB<sup>®</sup>. A motivação principal para a mudança para Fortran foi a aceleração dos cálculos numéricos, pois a simulação de escoamento de emulsões tem um custo computacional elevado. O compilador escolhido foi o Force Fortran 2.0, software gratuito disponível na internet.

Algumas simulações originais de CARMO (2013) foram reproduzidas com ambos os códigos, comparando-se seus desempenhos em termos de velocidade da simulação. O tempo de computação foi reduzido sensivelmente, permitindo que as simulações deste trabalho fossem realizadas com malhas mais refinadas do que seria possível com o código MATLAB<sup>®</sup>. O tamanho da rede é uma característica fundamental para representar bem as gotas dispersas no meio contínuo com tamanhos diversos e variações significativas ao longo do escoamento por quebra e coalescência.

Os códigos para o método Lattice Boltzmann estão disponíveis no Apêndice A. As Seções IV.1 e IV.2 explicam, em detalhes, o funcionamento do método para problemas monofásicos e multifásicos, respectivamente.

A etapa de visualização foi executada primeiramente em código em MATLAB<sup>®</sup> para tratamento dos dados e geração de figuras. Uma etapa adicional foi proposta para construir animações típicas de CFD no programa Windows<sup>®</sup> Movie Maker, facilitando a apresentação, discussão e análise dos resultados. O código para a geração de imagens encontra-se no Apêndice B. A Seção IV.3 aborda a estratégia de visualização utilizada neste trabalho.

### IV.1. Modelo Monofásico e Monocomponente

O modelo monofásico é a base para modelos mais sofisticados. Nesta seção foi admitido um modelo para apenas um componente. A próxima seção traz uma discussão sobre a incorporação de múltiplas fases e/ou componentes ao problema.

Dado um problema monofásico e monocomponente qualquer que se deseje estudar usando o método Lattice Boltzmann com arranjo D2Q9, a primeira etapa para a simulação é a determinação dos parâmetros relativos à malha e às propriedades do fluido e do escoamento. As Seções III.4 e V.1.1 trazem maiores detalhes quanto às escolhas adequadas para estes parâmetros. O problema deve ser inicializado com matrizes de densidades e de velocidades com  $n_x$  colunas e  $n_y$  linhas, onde  $n_x$  e  $n_y$  são o número de células nas direções  $x$  e  $y$ , respectivamente.

Em seguida, é necessário incluir a geometria para o problema. A geometria do escoamento é definida a partir de uma matriz de tamanho  $n_y \times n_x$ . É atribuído o valor zero aos elementos da matriz referentes ao fluido, enquanto os nós sólidos são representados pelo valor um. Esta matriz é utilizada de forma recorrente ao longo do código, pois algumas sub-rotinas funcionam de forma diferente se o ponto pertence ao domínio do fluido ou do sólido.

Outra matriz muito importante para a definição do problema é a matriz de distribuições de partículas. Como cada ponto do domínio ainda tem nove direções para as velocidades discretas no modelo D2Q9 (Figura 3.5), esta “matriz” tem três dimensões: duas para incluir a posição da célula e uma para a direção da velocidade.

A matriz de distribuições é atualizada a cada passo de tempo a partir das sub-rotinas de colisão e propagação. As matrizes de densidades mássicas e de velocidades macroscópicas são calculadas pelas Equações (4.1) e (4.2).

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^9 f_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.1)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^9 \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.2)$$

onde  $\mathbf{e} = (e_x, e_y)$ . No modelo D2Q9, os vetores de velocidades virtuais  $e_x$  e  $e_y$  são dados por:

$$e_x = (0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, -1, 1) \quad (4.3)$$

$$e_y = (0, 0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1) \quad (4.4)$$

A inicialização da distribuição de partículas é feita a partir da distribuição de equilíbrio,  $f^{eq}$ . Segundo SUKOP (2006), esta distribuição de equilíbrio é calculada pela forma truncada da distribuição de Maxwell de acordo com:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[ 1 + 3(e_{x_i} u^{eq} + e_{y_i} v^{eq}) + \frac{9}{2} (e_{x_i} u^{eq} + e_{y_i} v^{eq})^2 - \frac{3}{2} ((u^{eq})^2 + (v^{eq})^2) \right] \quad (4.5)$$

onde  $w_i$  é o peso atribuído à direção  $i$  e  $\mathbf{u}^{eq} = (u^{eq}, v^{eq})$  é a velocidade de equilíbrio. O vetor de pesos  $w_i$  é dado por:

$$w_i = \left( \frac{4}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{36}, \frac{1}{36}, \frac{1}{36}, \frac{1}{36} \right) \quad (4.6)$$

A versatilidade do método Lattice Boltzmann para a inclusão de forças de interação surge no cálculo da velocidade de equilíbrio. A sub-rotina de cálculo da velocidade de equilíbrio pode incluir forças típicas de fluidodinâmica como as gravitacionais, por exemplo, e interações mais complexas como atração, repulsão e adsorção, especialmente nos problemas multicomponentes e/ou multifásicos. Tais forças devem ser somadas e contabilizadas como um termo adicional  $\mathbf{F}_{ext} = (F_{ext,x}, F_{ext,y})$ , calculando-se a velocidade de equilíbrio por:

$$\rho \mathbf{u}^{eq} = \rho \mathbf{u} + \tau \mathbf{F}_{ext} \quad (4.7)$$

O termo  $\mathbf{F}_{ext}$  tem unidade de força por volume. Multiplicando pelo tempo de relaxação  $\tau$  do modelo BGK, obtém-se unidade de densidade de momento. Se não há forças externas sobre o sistema, a velocidade de equilíbrio é a própria velocidade do fluido. Para um sistema sujeito apenas à força gravitacional, por exemplo,  $\mathbf{F}_{ext} = \rho \mathbf{g}$ , onde  $\mathbf{g}$  é o vetor aceleração da gravidade. Substituindo em (4.7) e dividindo ambos os lados pela densidade, temos:

$$\mathbf{u}^{eq} = \mathbf{u} + \tau \mathbf{g} \quad (4.8)$$

A única etapa restante para fechar o algoritmo do modelo monofásico é o tratamento dos contornos do sistema conforme a discussão da Seção III.3. As condições de ZOU e HE (1997) devem ser executadas separadamente enquanto as condições do tipo “bounceback” são implementadas diretamente na sub-rotina de colisão ou de propagação.

As etapas de colisão e propagação são oriundas da equação básica do método Lattice Boltzmann. Rearranjando a Equação (3.15):

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (4.9)$$

A Equação (4.9) é separada em duas sub-rotinas. Na primeira, correspondente ao processo de colisão, calcula-se o resultado do lado direito da equação. Na segunda, a distribuição pós-colisão é propagada para os lattices vizinhos.

A Figura 4.1 resume o algoritmo do modelo monofásico do LBM em um fluxograma. Este algoritmo é repetido até que o número final de passos de tempo de simulação seja alcançado.

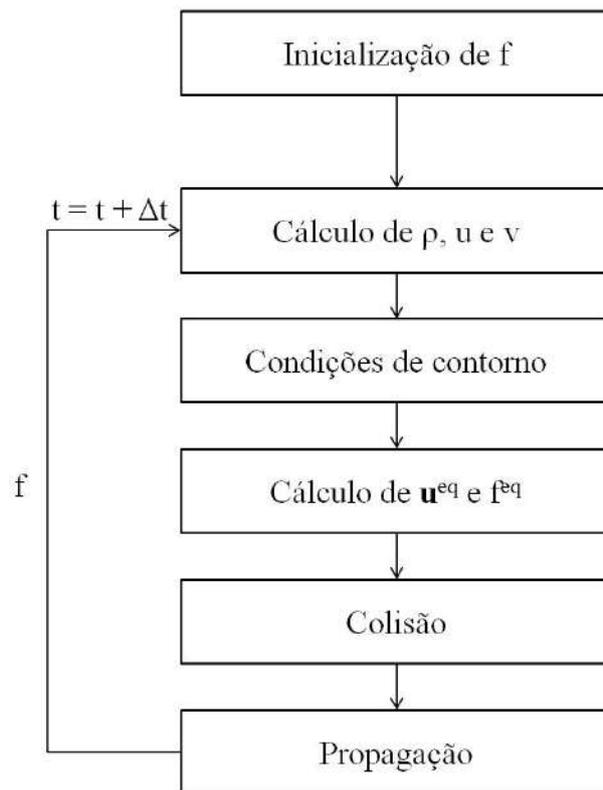


Figura 4.1 – Fluxograma do modelo monofásico monocomponente

## IV.2. Modelo Multifásico e Multicomponente

Os modelos para múltiplas fases e/ou componentes surgem de modificações do algoritmo básico para uma fase e um componente. A estratégia fundamental para este tipo de modelagem no método Lattice Boltzmann é a modificação da distribuição de equilíbrio para incluir as interações complexas pertinentes ao problema estudado.

Considerando o caso monocomponente para iniciar a discussão deste t3pico, existem tr3s modelos amplamente difundidos para problemas multif3sicos no LBM: o modelo de Rothman-Keller (GUNSTENSEN et al., 1991, ROTHMAN e KELLER, 1988), o modelo de Shan e Chen (SHAN e CHEN, 1993) e o modelo de energia livre (SWIFT et al., 1996).

Neste trabalho foi escolhido o modelo de SHAN e CHEN (1993) para as simula33es multif3sicas. Este modelo 3 conhecido como modelo das intera33es pseudopotenciais, pois introduz for3as de atra33o/repuls3o a partir da seguinte equa33o:

$$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}, t) = -G\psi(\mathbf{x}, t) \sum_{i=1}^9 w_i \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) \mathbf{e}_i \quad (4.10)$$

sendo  $\mathbf{F}_{int} = (F_{int,x}, F_{int,y})$  o vetor for3a de intera33o,  $G$  a magnitude da for3a e  $\psi$  o potencial de intera33o.

O par3metro  $G$  est3 diretamente relacionado ao grau de separa33o esperado entre as fases e o sinal de  $G$  indica o tipo de intera33o entre as fases. De acordo com a Equa33o (4.10), valores positivos de  $G$  modelam for3as de repuls3o e valores negativos introduzem for3as de atra33o.

O potencial de intera33o 3 uma fun33o que incorpora o efeito da mudan3a de densidade na interface. Para problemas multif3sicos com apenas um componente, tal como um equil3brio l3quido-vapor de uma subst3ncia pura, essa fun33o pode ter um dos seguintes formatos (SHAN e CHEN, 1993):

$$\psi(\mathbf{x}, t) = 1 - \exp(-\rho(\mathbf{x}, t)) \quad (4.11)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_0 \exp\left(-\frac{\rho_0}{\rho(\mathbf{x}, t)}\right) \quad (4.12)$$

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t) \quad (4.13)$$

onde  $\psi_0$  e  $\rho_0$  s3o par3metros de ajuste.

Intera33es entre fluidos e s3lidos tamb3m s3o modeladas por fun33es pseudopotenciais. Segundo MARTYS e CHEN (1996), a adsor33o 3 calculada por:

$$\mathbf{F}_{ads}(\mathbf{x}, t) = -G_{ads}\psi(\mathbf{x}, t) \sum_{i=1}^9 w_i s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) \mathbf{e}_i \quad (4.14)$$

sendo  $\mathbf{F}_{ads} = (F_{ads,x}, F_{ads,y})$  o vetor for3a de adsor33o e  $G_{ads}$  a magnitude da for3a de adsor33o. A fun33o  $s$  tem valor 1 ou 0 para indicar se o ponto vizinho 3 um s3lido ou um fluido, respectivamente. Os significados dos demais par3metros s3o an3logos aos da Equa33o (4.10).

As for3as de intera33o e adsor33o para problemas multif3sicos monocomponentes s3o calculadas em sub-rotinas adicionais e inseridas no c3lculo da velocidade de equil3brio, Equa33o (4.7). Nenhuma outra modifica33o no algoritmo apresentado na Se33o IV.1 3 necess3ria para este tipo de problema, evidenciando a grande vantagem do m3todo de Shan e Chen: a simplicidade de implementa33o.

O objetivo principal deste trabalho 3 simular escoamentos de 3gua em 3leo. Portanto, o modelo implementado deve ser multif3sico e multicomponente.

Para problemas com  $n$  componentes simulados pelo método Lattice Boltzmann, cada componente deve ter sua distribuição de partículas computada separadamente. Seguindo o algoritmo da Figura 4.1, cada componente deve ter uma distribuição inicializada, calculando-se densidades e velocidades de forma independente a partir das distribuições individuais. Então:

$$\rho^j(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^9 f_i^j(\mathbf{x}, t) \quad (4.15)$$

$$\rho^j(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}^j(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^9 \mathbf{e}_i f_i^j(\mathbf{x}, t) \quad (4.16)$$

sendo  $j = 1, 2, \dots, n$  o  $j$ -ésimo componente do sistema.

As dificuldades para seguir o algoritmo da seção anterior aparecem na aplicação das condições de contorno. É simples definir as condições de entrada e saída para sistemas bem comportados, ou seja, com entradas e saídas bem definidas. É o caso do trabalho desenvolvido por CARMO (2013), em que o problema estudado era a injeção de água em uma matriz porosa repleta de óleo, que era recuperado puro em outra região do domínio.

O problema estudado neste trabalho envolve fases dispersas. A entrada do domínio deve incluir as duas fases separadas em algum nível de aleatoriedade. Assim, ficou inviável utilizar duas condições de contorno independentes entre si para a região de entrada. O mesmo é válido para a região de saída.

Foi proposta, então, uma única condição de contorno para cada região. Para a entrada, foi modificada a sub-rotina para a entrada utilizando-se geradores de números aleatórios disponíveis na própria linguagem Fortran para definir a posição das partículas de água e de óleo. Para cada ponto do contorno da entrada, o número gerado foi comparado à fração volumétrica da água no óleo, fornecida como um dos parâmetros da simulação. Se o número gerado fosse maior que a fração volumétrica, o ponto seria determinado como óleo puro. No caso contrário, o ponto seria definido como água pura. Esta estratégia permitiu criar escoamentos com alto grau de dispersão entre as fases. A condição de contorno para a saída foi proposta como uma interpolação entre a última e a penúltima coluna da matriz de distribuições associada a um tubo suficientemente longo. Esta condição foi chamada aqui de “tubo infinito”, pois efeitos indesejáveis de saída são evitados.

O cálculo da velocidade de equilíbrio também não pode ser feito diretamente a partir das velocidades individuais. Uma sub-rotina para a velocidade do “bulk”,  $\mathbf{u}_{bulk}$ , deve ser incorporada ao modelo, de acordo com a Equação (4.17). A velocidade do bulk é, então, fornecida à sub-rotina da velocidade de equilíbrio de cada componente pela Equação (4.18).

$$\mathbf{u}_{bulk} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^9 \frac{\mathbf{e}_i f_i^j}{\tau^j}}{\sum_{j=1}^n \frac{\rho^j}{\tau^j}} \quad (4.17)$$

$$\rho^j \mathbf{u}^{eqj} = \rho^j \mathbf{u}_{bulk} + \tau^j \mathbf{F}_{ext}^j \quad (4.18)$$

O cálculo das forças de interação também deve considerar a presença de outros componentes na vizinhança. Assim, a Equação (4.10) deve ser modificada para:

$$\mathbf{F}_{int}^j(\mathbf{x}, t) = -G^{jk}\psi^j(\mathbf{x}, t) \sum_{i=1}^9 w_i \psi^k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta t, t) \mathbf{e}_i \quad (4.19)$$

sendo  $k$  referente ao  $k$ -ésimo componente, que é diferente do componente  $j$ . O termo  $G^{jk}$  é a magnitude da interação entre os componentes  $j$  e  $k$ . Para o caso de água em óleo, este parâmetro sempre é positivo, pois deve modelar interações de repulsão para simular a imiscibilidade das fases. Por uma questão de simplicidade, a função potencial foi implementada de acordo com a Equação (4.13).

A partir deste ponto, as sub-rotinas de velocidade e distribuição de equilíbrio, colisão e propagação podem ser calculadas de forma separada para cada componente. O novo algoritmo para problemas multifásicos e multicomponentes pode ser resumido de acordo com a Figura 4.2.

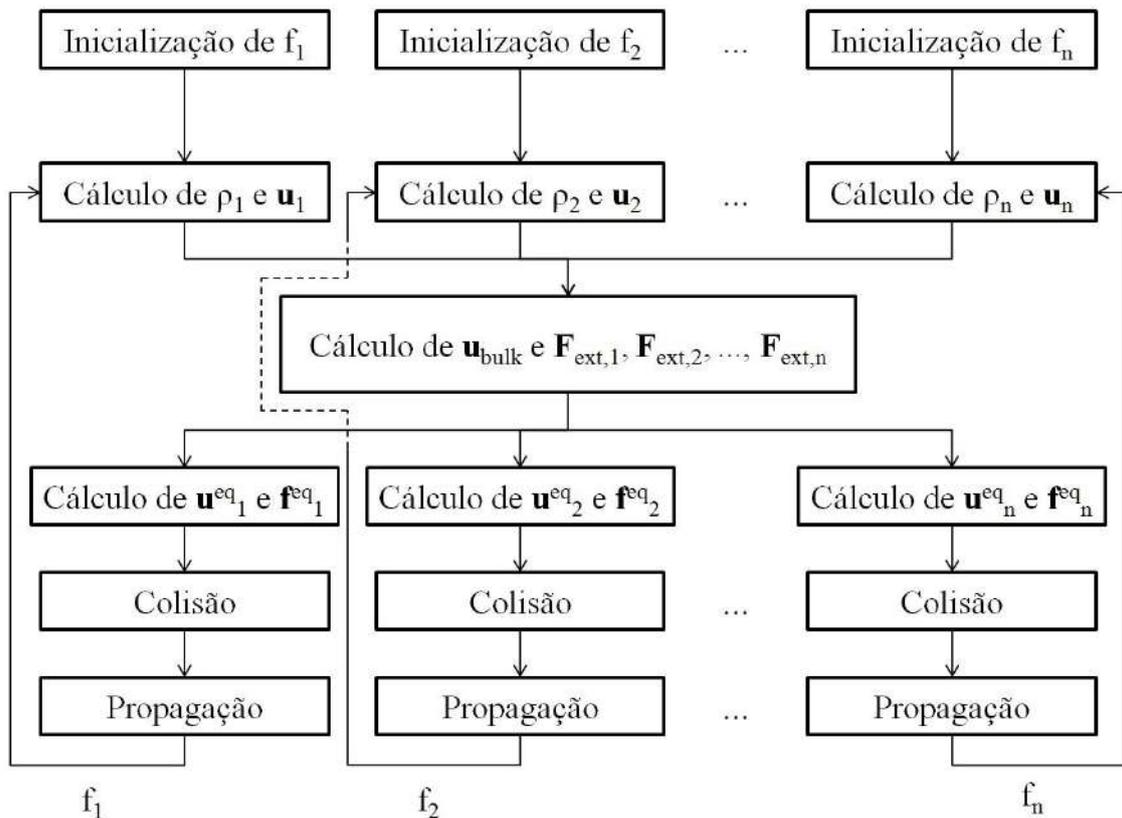


Figura 4.2 – Fluxograma do modelo multifásico multicomponente

### IV.3. Visualização dos Resultados

Os recursos visuais são uma importante ferramenta no estudo computacional de problemas de fluidodinâmica. Os principais softwares de simulação do mercado possibilitam a visualização das propriedades calculadas através de mapas de cores, linhas de trajetória, campos de vetores e animações, entre outras, tanto em duas quanto em três dimensões.

Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia combinada para visualização dos resultados. Esta metodologia consiste de duas partes: a primeira é realizada por meio da execução de um código em linguagem MATLAB<sup>®</sup> para geração de imagens e a segunda consiste em construir uma animação a partir destas imagens no programa Windows<sup>®</sup> Movie Maker.

Uma vez que os dados foram gerados através de rotina adequada em linguagem Fortran, uma segunda rotina, em linguagem MATLAB<sup>®</sup>, converte os resultados numéricos em mapas de cores. Por padrão, este processo associa o valor máximo ao vermelho (“quente”) e o valor mínimo ao azul (“frias”). A faixa intermediária de cores é proporcional aos valores que se encontram entre o máximo e o mínimo. Este padrão, embora possa ser modificado, também é seguido pelos principais pacotes de CFD.

A escolha do MATLAB<sup>®</sup> para a primeira etapa da metodologia de visualização decorre naturalmente da grande variedade de recursos de tratamento de imagens disponíveis no software, permitindo que o código desta etapa seja estruturalmente muito simples. Os mapas de cores são obtidos através da função `imagesc( )` enquanto campos de vetores são obtidos pela função `quiver( )`, por exemplo. O código encontra-se disponível no Apêndice B.

A segunda etapa da visualização dos resultados consiste em acoplar todas as imagens em uma única sequência através do Windows<sup>®</sup> Movie Maker. Novamente, a principal motivação para o uso deste programa é a simplicidade do uso, além da disponibilidade para computadores com o sistema operacional Windows<sup>®</sup>. A animação é gerada selecionando-se todas as imagens e ajustando-se o tempo de duração de cada imagem. Como o olho humano tem uma capacidade limitada de registro de imagens sequenciais, uma animação contínua pode ser obtida para uma taxa próxima aos 24 quadros por segundo, isto é, com um tempo de duração em torno de 0,042 s por imagem. Neste trabalho, foi utilizado um tempo de duração de 0,05 s por imagem (Figura 4.3).

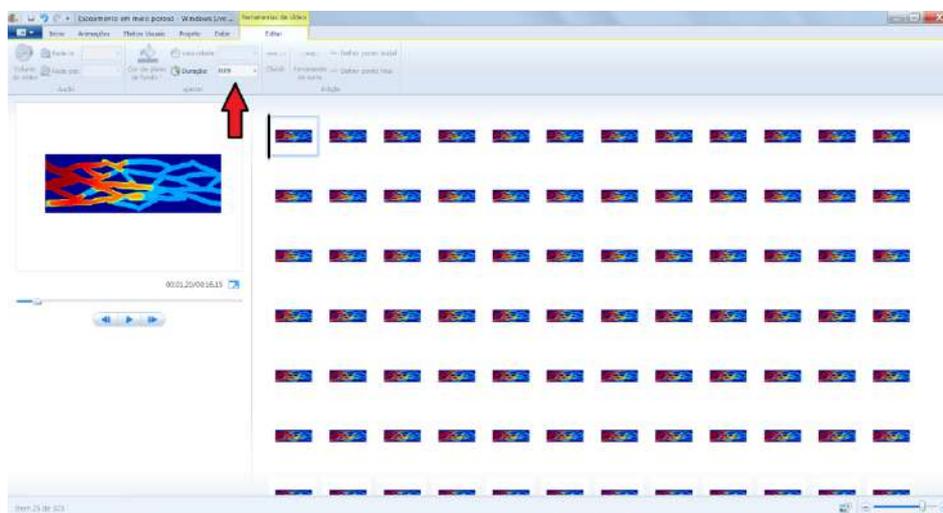


Figura 4.3 – Ajuste do tempo de duração de uma animação

## Capítulo V – Resultados

### V.1. Escoamento de Poiseuille

Um problema clássico e bem conhecido em engenharia é o escoamento de um fluido em um tubo circular, também conhecido como escoamento de Poiseuille. Para o caso de um fluido newtoniano escoando em um tubo vertical de diâmetro  $D$ , com aceleração gravitacional  $g$  e aberto para a atmosfera nas duas extremidades, é possível deduzir as seguintes expressões para o perfil de velocidades do fluido e seus valores máximo e médio (BIRD, 2004):

$$u(r) = \frac{\rho g R^2}{2\mu} \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (5.1)$$

$$\langle u \rangle = \frac{\rho g D^2}{12\mu} = \frac{2}{3} u_{max} \quad (5.2)$$

onde  $r$  é a distância radial em relação ao centro do tubo e  $R$  é o raio interno do tubo tal que  $D = 2R$ .

As Equações (5.1) e (5.2) indicam que um fluido escoando em um tubo circular tem perfil de velocidades parabólico com máximo no centro do tubo e são válidas para um escoamento laminar, unidimensional, completamente desenvolvido e em regime permanente de um fluido newtoniano. Muitas situações práticas de engenharia, porém, exigem uma abordagem menos restritiva. A solução das equações de balanço de massa e momento para problemas transientes, turbulentos e/ou com efeitos de borda – perturbações na entrada e na saída do domínio levando a um escoamento bidimensional ou tridimensional nestas regiões, por exemplo – geralmente levam a sistemas de equações diferenciais parciais sem solução analítica, exigindo o uso de métodos numéricos para obtenção de soluções aproximadas. O método Lattice Boltzmann surge como uma possibilidade para simular o fenômeno de interesse e chegar a estas soluções.

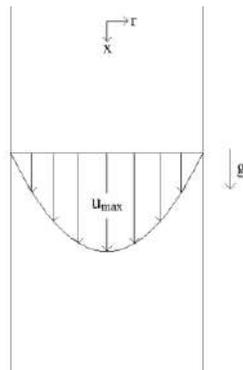


Figura 5.1 – Perfil de velocidades no escoamento de Poiseuille

#### V.1.1. Análise Dimensional

Para fazer uma análise dimensional do problema do escoamento em tubo circular é preciso fazer uma avaliação de quais parâmetros físicos são relevantes para o fenômeno em questão. Esta avaliação deve partir da intuição do analista, mas a influência ou não do parâmetro deve ser comprovada experimentalmente para que a análise seja validada (FOX, 2012).

O escoamento de Poiseuille é um problema conhecido na engenharia, de modo que os parâmetros relevantes já são bem definidos. Para o caso em estudo, sem queda de pressão e com escoamento permanente e completamente desenvolvido, são eles: a densidade e a viscosidade do fluido, a velocidade média do escoamento e o diâmetro do tubo.

A dependência física dos parâmetros é determinada pelo Teorema Pi de Buckingham. Este teorema fornece um método para determinação de números adimensionais a partir de um conjunto de propriedades primárias. Uma descrição mais completa do Teorema Pi pode ser encontrada em FOX (2012).

Aplicando o Teorema Pi de Buckingham chega-se a um único parâmetro adimensional: o número de Reynolds (5.3), um dos mais importantes da mecânica dos fluidos.

$$Re = \frac{\rho \langle u \rangle D}{\mu} \quad (5.3)$$

A aplicação do método Lattice Boltzmann para a solução de problemas de engenharia exige a transformação dos parâmetros físicos em parâmetros virtuais adimensionais, que serão os dados de entrada do código usado na simulação. Essa conexão entre o mundo real e o mundo virtual se dá através de fatores de conversão.

Estes fatores de conversão, porém, não são independentes entre si, pois eles devem manter a consistência física do problema para que os resultados virtuais sejam totalmente equivalentes aos resultados reais. Aqui, os números adimensionais tem um papel fundamental na manutenção da consistência, pois dois casos de um mesmo fenômeno só serão equivalentes se seus números adimensionais forem idênticos (FOX, 2012).

Como o escoamento de Poiseuille só tem um número adimensional, este deve ser o mesmo tanto para os parâmetros físicos quanto para os virtuais, ou seja:

$$Re = \frac{\rho \langle u \rangle D}{\mu} = \frac{\tilde{\rho} \langle \tilde{u} \rangle \tilde{D}}{\tilde{\mu}} \quad (5.4)$$

onde a marcação com um  $\sim$  indica um parâmetro virtual. Para um valor virtual  $\tilde{N}$  qualquer correspondente a um parâmetro real  $N$ , existe um fator de conversão  $C_N$  tal que (KRÜGER, 2011):

$$N = C_N \tilde{N} \quad (5.5)$$

Como  $\tilde{N}$  é adimensional,  $N$  e  $C_N$  devem ter as mesmas unidades. Aplicando (5.5) em (5.4), conclui-se que:

$$\frac{C_\rho C_u C_D}{C_\mu} = 1 \quad (5.6)$$

Assim como no Teorema Pi de Buckingham, é importante estabelecer um conjunto de fatores de conversão primários, a partir dos quais podem ser obtidos outros fatores de conversão. Um conjunto adequado de fatores primários seria o de diâmetro ( $C_D$ ), tempo ( $C_t$ ) e densidade ( $C_\rho$ ), englobando todas as dimensões importantes para um escoamento em tubo. O programador, porém, tem liberdade para escolher outro

conjunto que julgue mais conveniente. Todos os demais fatores são obtidos por combinações dimensionalmente consistentes destes fatores primários. Este procedimento garante que a restrição em (5.6) seja respeitada, conservando os números adimensionais.

$$\text{Velocidade:} \quad C_u = \frac{C_D}{C_t} \quad (5.7)$$

$$\text{Gravidade:} \quad C_g = \frac{C_D}{C_t^2} \quad (5.8)$$

$$\text{Viscosidade cinemática:} \quad C_v = \frac{C_D^2}{C_t} \quad (5.9)$$

$$\text{Força:} \quad C_F = \frac{C_\rho C_D^4}{C_t^2} \quad (5.10)$$

Além da consistência física, os parâmetros selecionados também devem manter a estabilidade do método, restringindo ainda mais a liberdade de escolha dos parâmetros. No método Lattice Boltzmann, o tempo de relaxação ( $\tau$ ) e a viscosidade cinemática ( $\nu$ ) estão relacionados pela expressão a seguir:

$$\nu = \left( \tau - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \Delta t \quad (5.11)$$

onde  $c_s$  é a velocidade do som do modelo utilizado e  $\Delta t$  é o passo de tempo. Para o modelo D2Q9 com um espaçamento  $\Delta x$  entre pontos da malha, a velocidade do som é dada por:

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (5.12)$$

Podemos escolher o passo de tempo e o espaçamento da malha de um modo conveniente fazendo-se:

$$\Delta \tilde{x} = \Delta \tilde{t} = 1 \quad (5.13)$$

Assim,  $\Delta x = C_D$  e  $\Delta t = C_t$ . Reescrevendo (5.11):

$$\nu = \frac{C_D^2}{C_t} \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \quad (5.14)$$

Comparando (5.14) com (5.5) e (5.9), conclui-se que:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \quad (5.15)$$

Aqui, fica evidente que o parâmetro  $\tau$  influencia diretamente na estabilidade do método. Valores menores que 0.5 são fisicamente inconsistentes; na prática, a simulação já apresenta fortes instabilidades quando  $\tau$  se aproxima de 0.53. Também fica claro que  $C_D$ ,  $C_t$  e  $\tau$  não são independentes entre si e devem ser cuidadosamente selecionados.

Outra limitação prática do método é o valor da velocidade virtual do escoamento. A simulação deixa de ser incompressível quando a velocidade máxima ultrapassa o valor de 0.3 (SUKOP, 2006). Neste caso, as propriedades apresentam oscilações convergentes ou divergentes ao longo da simulação, sendo ambos os cenários indesejáveis.

Portanto, a escolha dos parâmetros virtuais deve satisfazer tanto a consistência física do problema quanto as condições de estabilidade do método.

### V.1.2. Simulação I: $Re = 312.5$ e $\tau = 0.6$

O primeiro estudo de caso deste trabalho foi o escoamento de água em um tubo circular de 1 mm de diâmetro. A água tem densidade  $1000 \text{ kg/m}^3$  e viscosidade cinemática  $1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ . Para simplificar os cálculos, assumiu-se que a aceleração da gravidade é de  $10 \text{ m/s}^2$ .

Pela Equação (5.2), a velocidade máxima esperada para o escoamento é de 0.625 m/s. O número de Reynolds do problema é  $Re = 312.5$ .

De acordo com a seção anterior, a escolha dos parâmetros virtuais pode começar pela definição dos fatores de conversão do diâmetro, do tempo e da densidade. Para uma malha com 100 pontos no eixo horizontal ( $\tilde{D} = 100$ ) e densidade virtual unitária ( $\tilde{\rho} = 1$ ), temos:

$$C_D = \frac{D}{\tilde{D}} = \frac{0.001}{100} = 1 \times 10^{-5} \text{ m} \quad (5.16)$$

$$C_\rho = \frac{\rho}{\tilde{\rho}} = \frac{1000}{1} = 1000 \text{ kg/m}^3 \quad (5.17)$$

Estes dois parâmetros foram definidos arbitrariamente. Uma escolha arbitrária do fator de conversão  $C_t$ , porém, poderia levar a um tempo de relaxação inapropriado, causando instabilidade ao método. Para evitar este cenário, escolhe-se o parâmetro  $\tau$  e calcula-se  $C_t$  a partir deste.

Definindo  $\tau = 0.6$  e substituindo em (5.14), o fator de conversão  $C_t$  será:

$$C_t = \frac{C_D^2}{\nu} \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) = 3.333 \times 10^{-6} \text{ s} \quad (5.18)$$

Calculando-se os demais parâmetros, chega-se a:

$$C_u = \frac{C_D}{C_t} = 3 \text{ m/s} \quad (5.19)$$

$$C_g = \frac{C_D}{C_t^2} = 9 \times 10^5 \text{ m/s}^2 \quad (5.20)$$

Então,  $\tilde{u}_{max} = 0.20833$  e  $\tilde{g} = 1.11 \times 10^5$ . Verificando o número de Reynolds:

$$Re = \frac{\langle \tilde{u} \rangle \tilde{D}}{\tilde{\nu}} = \frac{2}{3} \frac{\tilde{u}_{max} \tilde{D}}{\frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right)} = 312.5 \quad (5.21)$$

Portanto, os parâmetros satisfazem tanto a consistência física quanto as condições de estabilidade e a simulação pode ser executada.

A simulação partiu de uma distribuição uniforme de velocidades em todo o domínio, com  $\tilde{u}_o = 0.15$ , com velocidade de entrada constante  $\tilde{u}_{ent} = 0.15$ . Como o comprimento  $L$  do tubo não influencia nenhum parâmetro, este pode ser escolhido da forma mais conveniente. Com o objetivo de observar a existência de um comprimento de entrada do tubo e avaliar o desenvolvimento do perfil de velocidades, foi escolhido um comprimento  $\tilde{L} = 1150$ . Foi atribuída a condição de contorno “halfway bounceback” para as paredes do tubo e uma condição de “tubo infinito” para região de saída.

A Figura 5.2 mostra a evolução do perfil de velocidades da água ao longo do tubo para um tempo fixo de simulação de 20000 passos de tempo, aproximadamente 0.07 s. A variável  $x$  indica o comprimento adimensional em relação à entrada do tubo. É possível observar que a distribuição de velocidades se aproxima do perfil parabólico previsto pela Equação (5.1).

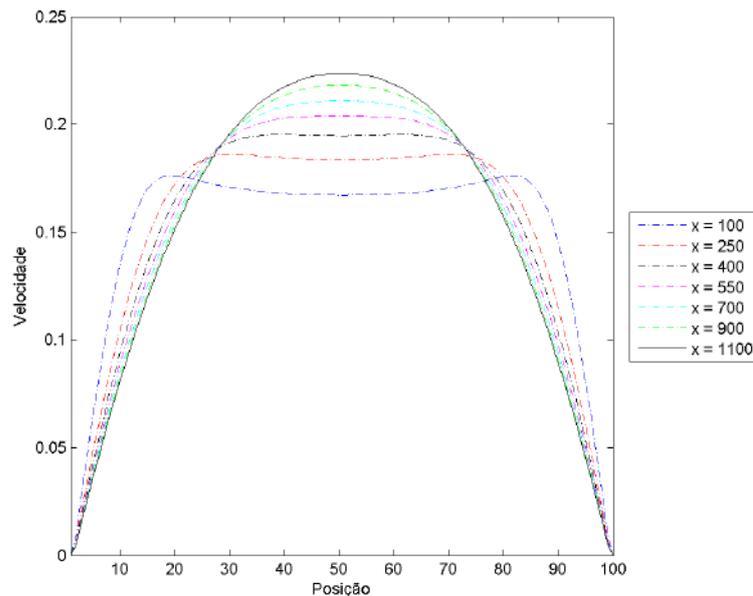


Figura 5.2 – Desenvolvimento do perfil de velocidades no tempo  $t = 0.07$  s

Segundo BIRD (2004), o comprimento de entrada de um fluido em regime permanente pode ser estimado por:

$$L_e = 0.035 D Re \quad (5.22)$$

Aplicando o fator de conversão de comprimento, temos:

$$\tilde{L}_e = 0.035 \tilde{D} Re = 1093.75 \quad (5.23)$$

Portanto, seria esperado que o perfil de velocidades convergisse para uma única distribuição em torno de  $\tilde{x} = 1100$ . Na Figura 5.2, observa-se que este perfil parabólico final seria atingido um pouco depois do previsto. A Equação (5.22) é apenas uma

estimativa entre várias disponíveis na literatura. Em FOX (2012), o comprimento de entrada é estimado por:

$$L_e = 0.06 D Re \quad (5.24)$$

Neste caso, o desenvolvimento pleno seria atingido em torno de  $\tilde{x} = 1875$ . Logo, a evolução apresentada na Figura 5.2 está de acordo com as estimativas da literatura.

A Figura 5.3 mostra a evolução temporal do perfil de velocidades em  $\tilde{x} = 1100$ , aproximadamente 11 mm. Nesta figura fica evidente a convergência da solução do problema. Um novo experimento com maior comprimento do tubo certamente permitiria observar o desenvolvimento completo do escoamento, mas o custo computacional seria muito elevado e a simulação levaria bastante tempo devido ao tamanho do malha utilizada. Uma opção seria reduzir a resolução da malha, escolhendo-se  $\tilde{D} < 100$ . A precisão desejada e o tempo necessário sempre devem ser avaliados ao se realizar simulações computacionais, ajustando-se os dois fatores até um resultado ótimo.

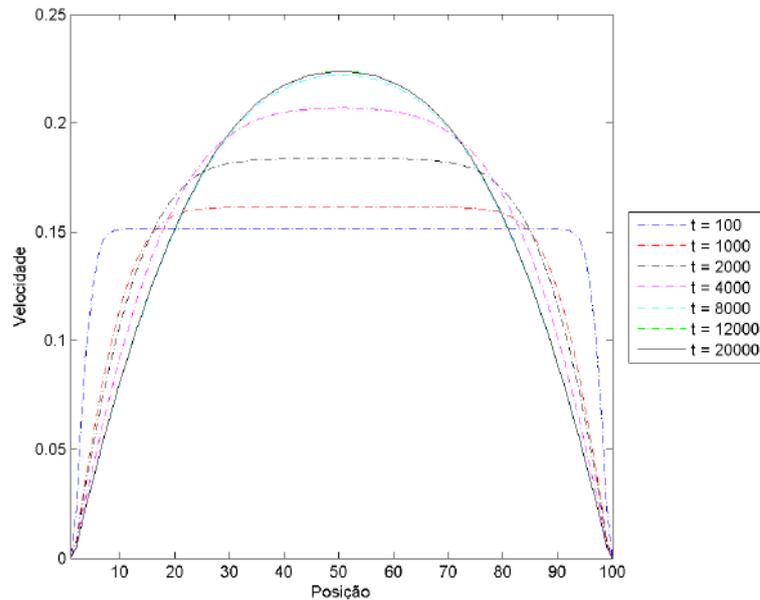


Figura 5.3 – Evolução temporal do perfil de velocidades em  $x = 11$  mm

Uma comparação entre os resultados obtidos e a previsão teórica pode ser vista na Figura 5.4. Foi utilizado o perfil de velocidades em  $x = 11$  mm e  $t = 0,07$  s para representar o resultado da simulação, pois este é o que mais se aproxima do perfil estacionário plenamente desenvolvido.

Calculando o erro quadrático médio ( $EQM$ ) pela equação:

$$EQM(u_{real}^{LBM}) = \frac{\sum_{i=1}^n (u_{real}^{LBM} - u_{real}^{Poiseuille})^2}{n} \quad (5.25)$$

chega-se a  $EQM = 0.004 = 0.4\%$ .

Apesar do baixo erro quadrático médio, a discrepância observada foi acentuada nos pontos mais próximos ao centro do tubo, onde o erro relativo foi de 7.4%. Com o objetivo de investigar possíveis fontes para o erro observado, o experimento foi repetido mais três vezes, variando-se o número de Reynolds e o tempo de relaxação em um planejamento fatorial de acordo com a Tabela 5.1.

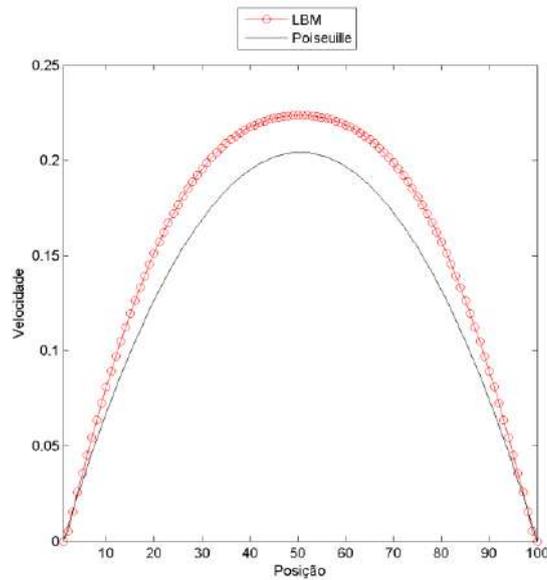


Figura 5.4 – Comparação entre os perfis da simulação I (em vermelho) e da previsão teórica (em preto)

Tabela 5.1 – Planejamento das simulações do escoamento de Poiseuille

Simulação	Número de Reynolds (Re)	Tempo de relaxação ( $\tau$ )
I	312.5	0.6
II	3.125	0.6
III	312.5	0.55
IV	3.125	0.55

A metodologia de visualização de resultados descrita na Seção IV.3 foi aplicada aos resultados da simulação (Figura 5.5). A representação por cores mostrou-se um recurso interessante para melhor compreensão dos resultados da simulação. Além de corroborar os resultados discutidos anteriormente quanto à evolução do perfil de velocidades, também é possível observar o efeito da parede sobre o fluido ao longo do tempo, reproduzindo a clássica condição de aderência do escoamento.

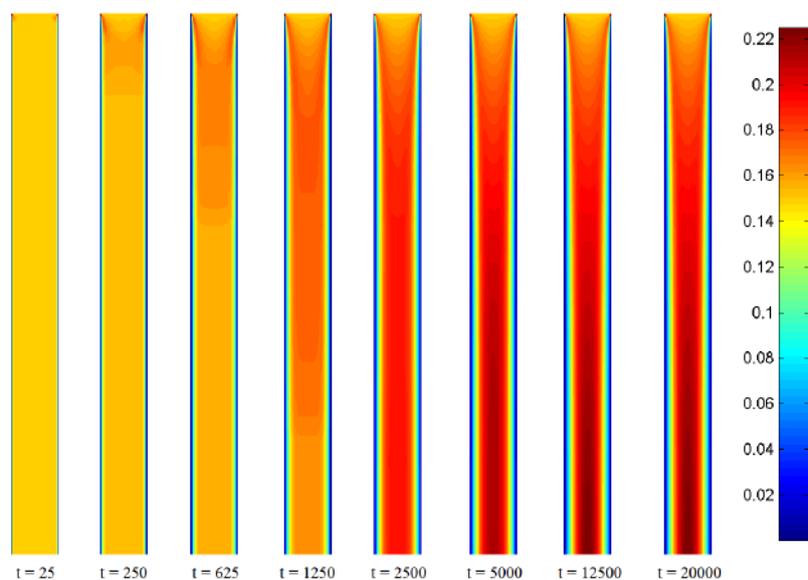


Figura 5.5 – Visualização dos resultados por mapas de cores

### V.1.3. Simulação II: $Re = 3.125$ e $\tau = 0.6$

Uma redução no número de Reynolds do escoamento estudado pode ser conseguida de duas formas: diminuindo o diâmetro do tubo e/ou aumentando-se a viscosidade cinemática do fluido. Aqui, foi escolhido aumentar a viscosidade cinemática em dez vezes em relação à primeira simulação, ou seja,  $\nu = 1 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ . Com esta configuração, a velocidade máxima do escoamento é de  $0.0625 \text{ m/s}$ , de acordo com a Equação (5.2).

Os fatores de conversão  $C_D = 10^{-5} \text{ m}$  e  $C_\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$  não são alterados pela viscosidade. Recalculando os demais parâmetros numéricos, temos:

$$C_t = \frac{C_D^2}{\nu} \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) = 3.333 \times 10^{-7} \text{ s} \quad (5.26)$$

$$C_u = \frac{C_D}{C_t} = 30 \text{ m/s} \quad (5.27)$$

$$C_g = \frac{C_D}{C_t^2} = 9 \times 10^7 \text{ m/s}^2 \quad (5.28)$$

Então,  $\tilde{u}_{max} = 0.0020833$  e  $\tilde{g} = 1.11 \times 10^{-7}$ . Verificando o número de Reynolds:

$$Re = \frac{\langle \tilde{u} \rangle \tilde{D}}{\tilde{\nu}} = \frac{\frac{1}{2} \tilde{u}_{max} \tilde{D}}{\frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right)} = 3.125 \quad (5.29)$$

Foram executados 100000 passos de tempo nesta simulação. Repetindo a análise feita na simulação I, as Figuras 5.6 e 5.7 demonstram a evolução temporal e espacial do perfil de velocidades, respectivamente. Pelas Equações (5.22) e (5.24), seria esperado um comprimento de entrada entre 10 e 20 unidades de lattice, mas, de acordo com a Figura 5.6, o desenvolvimento completo do perfil foi alcançado em torno de  $\tilde{x} = 100$ .

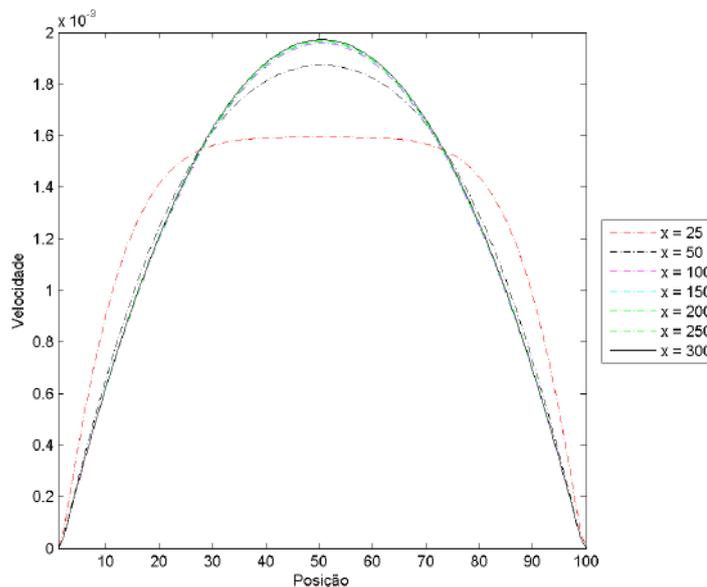


Figura 5.6 – Desenvolvimento do perfil de velocidades no tempo  $t = 0.03 \text{ s}$

PERRY (2008) descreve uma correlação mais adequada para a determinação do comprimento de entrada para números de Reynolds muito pequenos. A seguinte equação é fornecida:

$$\frac{L_e}{D} = 0.37 \exp(-0.148 Re) + 0.055 Re + 0.26 \quad (5.30)$$

Aplicando (5.30), verifica-se que o comprimento de entrada teórico é  $\tilde{x} = 67$ , aproximadamente. Esta estimativa é mais próxima ao resultado observado na simulação.

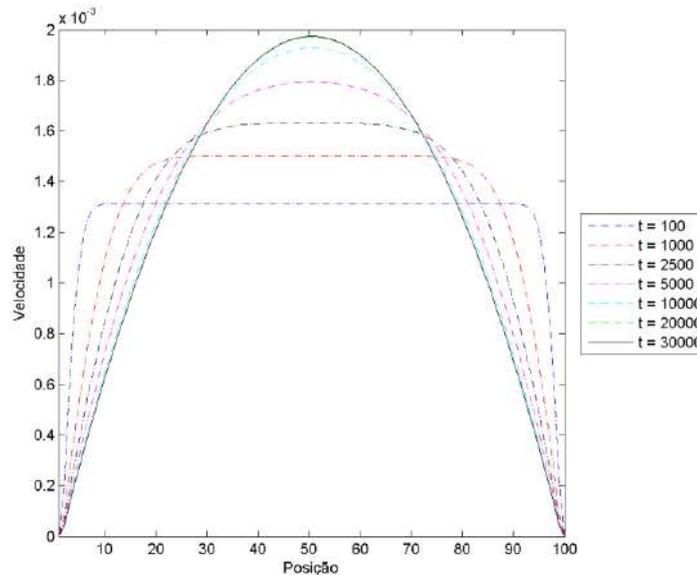


Figura 5.7 – Evolução temporal do perfil de velocidades em x = 3 mm

Comparando o perfil de velocidades estacionário ao obtido pela equação de Poiseuille (Figura 5.8), observa-se que as duas curvas são muito parecidas.

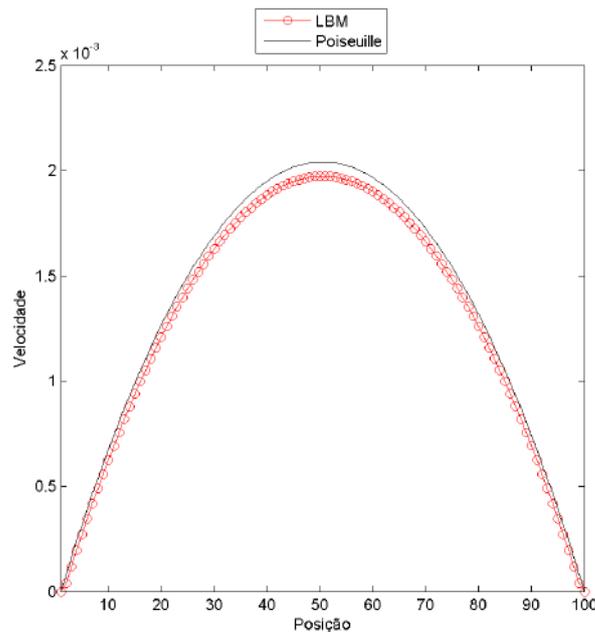


Figura 5.8 – Comparação entre a simulação II e a equação teórica

Uma avaliação pelo erro quadrático médio não é adequada, pois as velocidades são da ordem de  $10^{-3}$  e as diferenças entre as velocidades simulada e teórica são da ordem de  $10^{-4}$ . Aplicar o erro quadrático médio a números tão pequenos subestimaria o erro. Usando o erro absoluto, verifica-se que a máxima diferença entre velocidade simulada e velocidade teórica é de  $-6.8 \times 10^{-5}$  e ocorre no centro do tubo, o que corresponde a um erro relativo de -3.3%.

#### V.1.4. Simulação III: $Re = 312.5$ e $\tau = 0.55$

Como o número de Reynolds desta simulação é igual ao da simulação I, os parâmetros físicos das duas devem ser idênticos. A única alteração será no tempo de relaxação, que será diminuído de 0.6 para 0.55. Os novos fatores de conversão de tempo, velocidade e aceleração e o número de Reynolds são:

$$C_t = \frac{C_D^2}{\nu} \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) = 1.666 \times 10^{-6} \text{ s} \quad (5.31)$$

$$C_u = \frac{C_D}{C_t} = 6 \text{ m/s} \quad (5.32)$$

$$C_g = \frac{C_D}{C_t^2} = 3.6 \times 10^6 \text{ m/s}^2 \quad (5.33)$$

$$Re = \frac{\langle \tilde{u} \rangle \tilde{D}}{\tilde{\nu}} = \frac{\frac{1}{2} \tilde{u}_{max} \tilde{D}}{\frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right)} = 312.5 \quad (5.34)$$

A velocidade virtual máxima é  $\tilde{u}_{max} = 0.10417$ , com  $\tilde{g} = 2.77 \times 10^{-6}$ . Observa-se que o tempo de relaxação menor sem qualquer alteração na malha afasta as velocidades virtuais do limite de compressibilidade ( $\tilde{u}_{max} \ll 0.3$ ); logo, espera-se que a simulação III obtenha resultados melhores que a simulação I.

Na figura 5.9, é possível verificar novamente que o escoamento é simulado até atingir o estado estacionário.

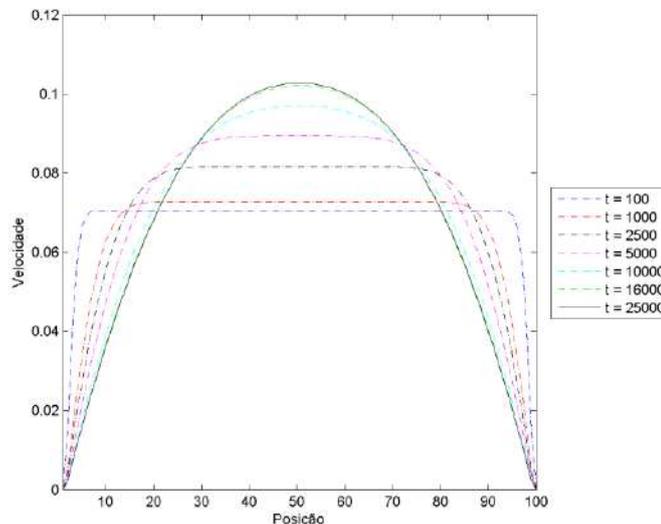


Figura 5.9 – Evolução temporal do perfil de velocidades em  $x = 11$  mm

A Figura 5.10 compara o resultado final da simulação com a solução do problema pela Equação (5.1). O erro quadrático médio foi de  $1.07 \times 10^{-5}$ , cerca de 0.0011%, com erros absolutos da ordem de  $10^{-2} - 10^{-3}$ . Portanto, a simulação III mostrou grande concordância com a teoria.

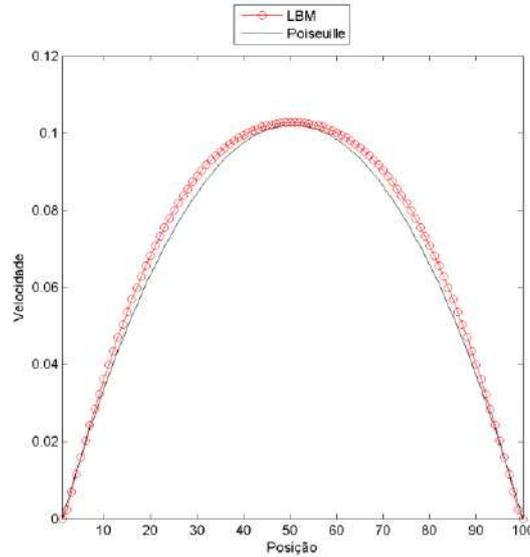


Figura 5.10 – Comparação entre a simulação III e a equação teórica

#### V.1.5. Simulação IV: $Re = 3.125$ e $\tau = 0.55$

Partindo-se dos mesmos parâmetros físicos da simulação II, com  $\tau = 0.55$ , temos os seguintes fatores de conversão:

$$C_t = \frac{C_D^2}{\nu} \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) = 1.666 \times 10^{-7} \text{ s} \quad (5.35)$$

$$C_u = \frac{C_D}{C_t} = 60 \text{ m/s} \quad (5.36)$$

$$C_g = \frac{C_D}{C_t^2} = 3.6 \times 10^8 \text{ m/s}^2 \quad (5.37)$$

Verificando o número de Reynolds:

$$Re = \frac{\langle \tilde{u} \rangle \tilde{D}}{\tilde{\nu}} = \frac{\frac{1}{2} \tilde{u}_{max} \tilde{D}}{\frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right)} = 3.125 \quad (5.38)$$

Ao rodar a simulação, entretanto, observou-se um comportamento oscilatório e divergente da solução, com a velocidade atingindo um valor infinito em menos de 1000 passos de tempo (Figura 5.11).

Como discutido anteriormente, o método Lattice Boltzmann pode apresentar este tipo de problema quando o tempo de relaxação tende a 0.5. Na prática, a simulação já pode apresentar falha para valores de  $\tau$  um pouco maiores que este limite.

```

Passo:          550
Velocidade maxima: 4.75364830E-03
Passo:          575
Velocidade maxima: 8.73423368E-03
Passo:          600
Velocidade maxima: 1.58751197E-02
Passo:          625
Velocidade maxima: 2.83522271E-02
Passo:          650
Velocidade maxima: 5.02527803E-02
Passo:          675
Velocidade maxima: 9.42328870E-02
Passo:          700
Velocidade maxima: 2.9332113
Passo:          725
Velocidade maxima: 270.49625
Passo:          750
Velocidade maxima: 230.15669
Passo:          775
Velocidade maxima: 390.01794
Passo:          800
Velocidade maxima: 24242.918
Passo:          825
Velocidade maxima: 19.593233
Passo:          850
Velocidade maxima: 8.3390894
Passo:          875
Velocidade maxima: +Infinity

```

Figura 5.11 – Tela de saída do programa

### V.1.6. Resumo

Com as quatro simulações do escoamento de Poiseuille realizadas, observou-se o efeito do número de Reynolds e do tempo de relaxação sobre a qualidade e a estabilidade da solução numérica do problema pelo método Lattice Boltzmann.

Comparando-se as simulações I e II, notou-se que o método apresenta melhores resultados para números de Reynolds mais baixos. Entretanto, o erro observado na Figura 5.4 não é suficiente para inviabilizar o método para número de Reynolds moderados, em torno de 300. Naturalmente, quanto mais o escoamento se aproximar do regime turbulento, mais sofisticado deve ser o modelo utilizado no LBM. Os modelos utilizados neste trabalho são simples, mais adequados para escoamentos em regime laminar.

A simulação III apresentou os melhores resultados entre as quatro executadas, com grande concordância entre a solução numérica e o perfil teórico. Os resultados mostraram que o método Lattice Boltzmann é muito sensível ao tempo de relaxação, como é possível observar comparando-se as Figuras 5.4 e 5.10.

Já a simulação IV teve o pior desempenho, colapsando em poucos passos de tempo. Os efeitos combinados das velocidades baixas – que podem causar grandes erros de arredondamento – com o tempo de relaxação se aproximando do limite de estabilidade podem ser os responsáveis pelo fracasso desta simulação, mostrando que a escolha dos parâmetros virtuais deve ser cuidadosa.

Por fim, dois tópicos merecem ser discutidos: a influência da inicialização e o efeito da região de entrada. Em todas as simulações a velocidade inicial foi estabelecida como, aproximadamente, 70% da velocidade máxima prevista na Equação (5.2). O perfil de entrada foi definido como uniforme, também com o valor de 70% da velocidade máxima.

Entretanto, a solução apresenta comportamentos inesperados conforme são realizadas mudanças nas condições iniciais de velocidade. Em geral, a solução tende a um perfil de velocidades distante do previsto na Equação (5.1) e permanece praticamente sem mudanças por um número considerável de passos de tempo, até que volta a crescer em direção ao perfil final. De fato, é comum encontrar na literatura (MEI et al., 2006) discussões sobre a importância de uma inicialização adequada para o LBM.

O segundo tópico é sobre a aplicabilidade da Equação (5.1) ao escoamento estudado nesta seção. Segundo BIRD (2004), a equação de Poiseuille é válida para escoamentos que não apresentam efeitos de entrada, de saída e de borda. É necessário utilizar fatores de correção para o perfil de Poiseuille quando regiões de entrada estão incluídas no escoamento de interesse. Portanto, os perfis teóricos utilizados ao longo da seção não devem ser vistos como absolutos, mas apenas como referência para avaliar se a simulação gera resultados dentro do esperado.

## V.2. Escoamento Cruzado

Na Seção V.1 demonstrou-se que o método Lattice Boltzmann é aplicável a um escoamento unidimensional cuja solução analítica é simples. De um modo geral, porém, a velocidade do fluido é função da posição e do tempo, ou seja,  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, y, z, t)$ . Certos escoamentos são complexos a ponto de dificultar ou impossibilitar a obtenção de uma representação analítica para o perfil de velocidades.

O escoamento ao redor de um cilindro é um destes casos. O fluido precisa se deslocar em pelo menos duas direções para contornar o cilindro. Além disso, o escoamento pode não atingir um estado estacionário final após um longo tempo, dependendo do número de Reynolds (BIRD, 2004). A Figura 5.12 mostra como este número adimensional influencia nas linhas de corrente do fluido para números de Reynolds com ordens de grandeza (a)  $10^{-2}$ , (b) 10 e (c)  $10^2$ .

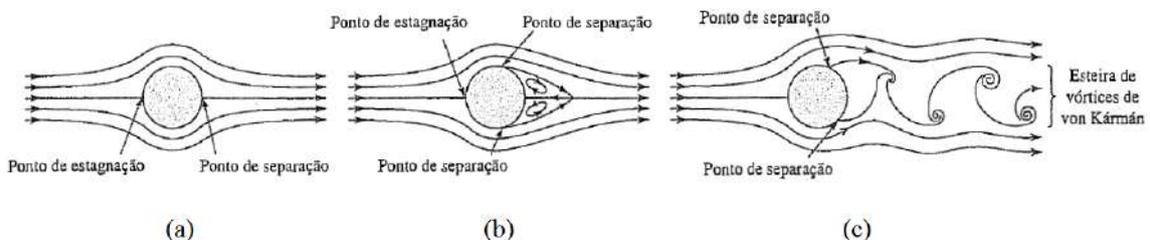


Figura 5.12 – Perfis de escoamento ao redor de cilindro (adaptado de BIRD, 2004)

O objetivo desta seção é reproduzir numericamente o efeito do número de Reynolds sobre o escoamento de água ao redor de um cilindro, avaliando-se a capacidade do LBM em simular fenômenos fisicamente complexos como a esteira de vórtices de von Kármán (Figura 5.12c).

### V.2.1. Simulação I: $Re = 3.125$

O primeiro caso avaliado para o escoamento ao redor de um cilindro foi uma repetição da simulação II da Seção V.1 com uma modificação na geometria para incluir a região sólida do obstáculo cilíndrico.

Todos os parâmetros daquela simulação foram mantidos à exceção do comprimento do tubo. A aplicação das condições de contorno de saída no tubo com o comprimento original  $\tilde{L} = 300$  mostrou algumas instabilidades na determinação do

campo de velocidades, apresentando um comportamento levemente oscilatório. Para evitar problemas numéricos, a simulação foi realizada com um comprimento de tubo suficientemente longo para que o escoamento seja completamente desenvolvido antes de chegar ao final do domínio, permitindo a aplicação de uma interpolação simples como condição de contorno de saída (condição de “tubo infinito”). Sendo assim, foi escolhido um valor  $\tilde{L} = 1200$ , que acabou confirmando-se um comprimento satisfatório para a simulação. O cilindro foi centrado na posição  $\tilde{x} = 100$  com diâmetro  $\tilde{d} = 30$ . O eixo  $x$  é coincidente com o eixo axial do tubo.

O perfil de velocidades na direção horizontal após 25000 passos de tempo está representado na Figura 5.13. A escala de cores refere-se ao campo de velocidades na direção do eixo do tubo (direção  $x$ ). O cilindro pode ser identificado nesta figura como uma região circular azul escuro, isto é, com velocidade nula. Foi obtido um resultado parecido com o exposto na Figura 5.12a.

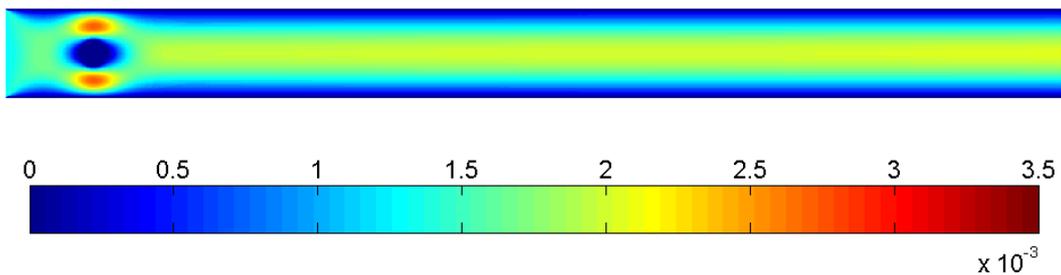


Figura 5.13 – Velocidade axial para  $Re = 3.125$  em regime estacionário

Analisando o resultado em  $\tilde{x} = 100$  observa-se o perfil de velocidades da Figura 5.14. É interessante notar que o perfil não é parabólico, pois a velocidade máxima encontra-se deslocada na direção do cilindro central. As linhas pontilhadas marcam o centro da distância entre a parede do tubo e o cilindro, evidenciando o deslocamento da velocidade máxima. Um caso diferente e bastante conhecido é o do escoamento de um fluido em uma região anular, que também obriga o fluido a escoar na região entre as paredes interna e externa. Este caso também apresenta um deslocamento do máximo da velocidade, de acordo com a Figura 5.15 (BIRD, 2004). Portanto, fica evidente que este efeito é devido à presença de um obstáculo central.

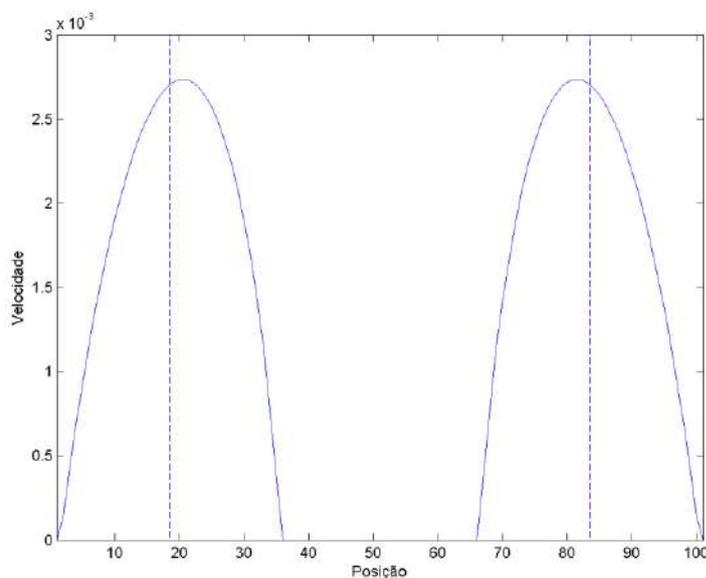


Figura 5.14 – Perfil de velocidades em  $\tilde{x} = 100$

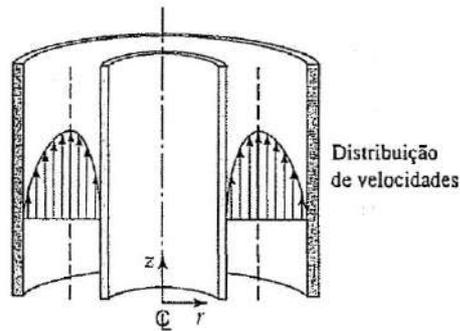


Figura 5.15 – Perfil de velocidades de um escoamento anular (adaptado de BIRD, 2004)

Na Figura 5.16 fica evidente que não há uma zona de recirculação após o fluido contornar o cilindro, pois os perfis de velocidade evoluem sem as perturbações características dos vórtices, nunca invertendo o sentido do escoamento.

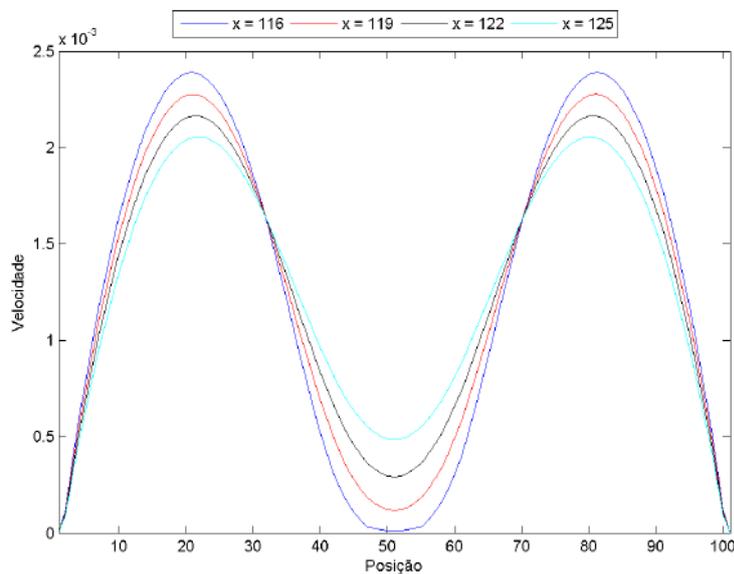


Figura 5.16 – Evolução espacial do perfil de velocidades da água

### V.2.2. Simulação II: $Re = 312.5$

Uma simulação para números de Reynolds mais altos foi executada repetindo-se a simulação III da Seção V.1 com a devida modificação na geometria para incluir o cilindro. Neste caso, o número de Reynolds do escoamento é 312.5, com o cilindro centrado em  $\tilde{x} = 100$  e o comprimento do tubo equivalente a 4000 unidades de lattice. Assim como na simulação anterior, o tamanho do tubo foi aumentado para evitar instabilidades numéricas. Todos os demais parâmetros foram mantidos iguais ao referido estudo do escoamento de Poiseuille.

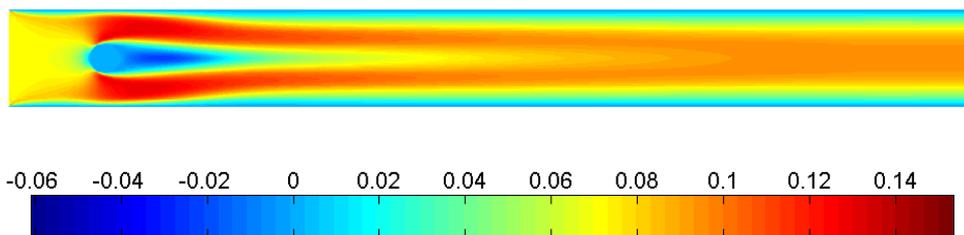


Figura 5.17 – Velocidade para  $Re = 312.5$  após 14000 passos de tempo

A simulação mostra um perfil de escoamento quase estacionário até cerca de 14000 passos de tempo simulados (Figura 5.17). Assim como no caso anterior, a escala é referente ao campo de velocidades na direção  $x$ . Observou-se uma região com velocidades negativas na parte posterior ao cilindro, caracterizando uma região de formação de vórtices. Um gráfico de velocidade foi traçado para verificar a inversão do sentido de escoamento em  $\tilde{x} = 120$  (Figura 5.18). A linha cheia representa o perfil de velocidades e a linha pontilhada indica velocidade nula como referência.

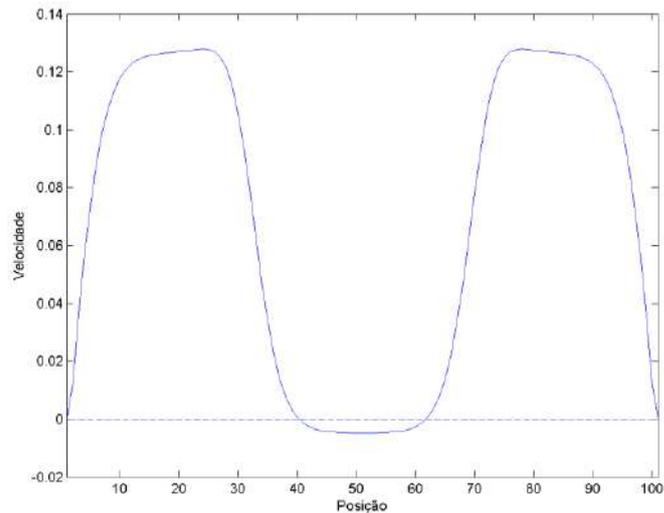


Figura 5.18 – Perfil de velocidades em  $\tilde{x} = 120$  e 14000 passos de tempo

Nos passos de tempo seguintes, foi observada uma evolução lenta e bem detalhada de instabilidades na região posterior ao cilindro. Estas perturbações evoluíram até um estado transiente periódico correspondente às esteiras de vórtices de von Kármán, de acordo com o esquema da Figura 5.12c. A Figura 5.19 mostra o fenômeno simulado.

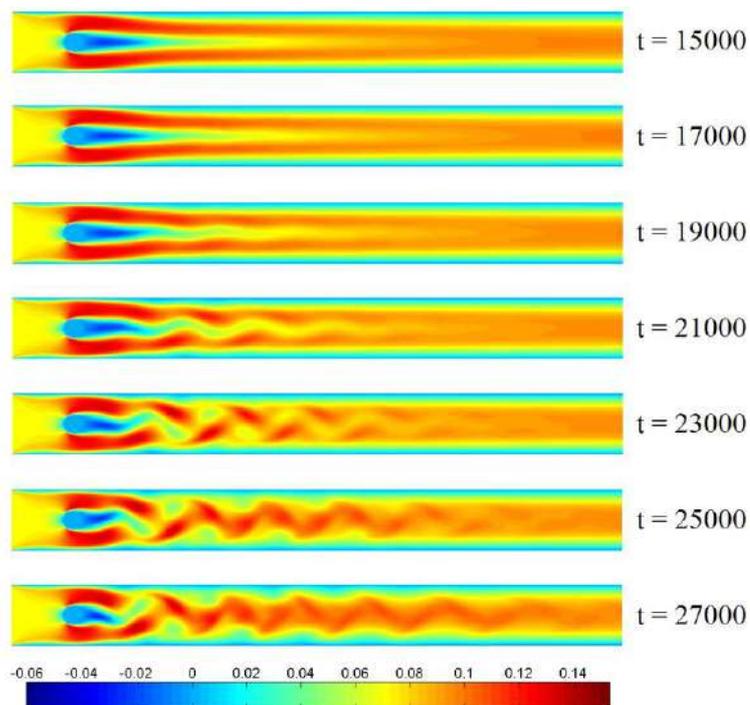


Figura 5.19 – Evolução das esteiras de von Kármán

O objetivo desta seção foi demonstrar que o método Lattice Boltzmann é capaz de capturar a fluidodinâmica complexa de um escoamento cruzado ao redor de um cilindro para diferentes números de Reynolds. O LBM permite simular interações ainda mais complicadas, que exigiriam técnicas numéricas avançadas nos métodos tradicionais. Esta capacidade pode ser verificada na próxima seção, que trata da aglutinação de gotas de líquido imersas em outro líquido imiscível. Esta simulação é particularmente desafiadora nos métodos tradicionais de CFD.

### V.3. Coalescência de Gotas

Nesta seção foram simuladas duas gotas de um líquido imersas em outro líquido para diferentes razões de viscosidade e forças de interação. O objetivo destes experimentos foi testar as limitações do método Lattice Boltzmann para problemas multifásicos multicomponentes.

Até a Seção V.2 o modelo utilizado para as simulações era monofásico e monocomponente. Uma das vantagens do programa Fortran escrito para obter os resultados numéricos é a fácil adaptação do código para problemas com mais fases e/ou componentes. O modelo multifásico multicomponente de Shan e Chen encontra-se descrito com mais detalhes na Seção IV.2 enquanto o código Fortran pode ser visto no Apêndice A.

Para focar a análise na influência das viscosidades e do parâmetro de interação ( $G$ ), as densidades dos dois líquidos foram mantidas iguais a 1. Tendo em vista que o objetivo principal da monografia é simular um escoamento de uma emulsão água-óleo, as densidades dos líquidos não são tão diferentes entre si quanto suas viscosidades, que podem ter uma diferença de algumas ordens de grandeza. Todas as simulações a seguir foram executadas por 20000 passos de tempo em um domínio  $301 \times 301$ . O resultado esperado é a coalescência das duas gotas de raio  $R = 20$  unidades de rede (lattice) para formar uma única gota de raio  $R\sqrt{2}$ . A razão de viscosidades será definida por  $\eta$  tal que:

$$\eta = \frac{\mu_1}{\mu_2} \quad (5.39)$$

sendo o fluido 1 mais viscoso que o fluido 2. Como as simulações serão executadas com densidades iguais para os dois fluidos, então:

$$\eta = \frac{\nu_1}{\nu_2} \quad (5.40)$$

sendo  $\nu$  a viscosidade cinemática do fluido.

#### V.3.1. Simulação I: $\eta = 2$

Foram simulados seis casos com razão de viscosidades  $\eta = 2$ . Combinando a definição do tempo de relaxação na Equação (5.11) com a Equação (5.40), é possível deduzir que:

$$\eta = \frac{\left(\tau_1 - \frac{1}{2}\right)}{\left(\tau_2 - \frac{1}{2}\right)} = 2 \quad (5.41)$$

Foram definidos dois conjuntos de simulações: um com  $\tau_1 = 0.7$  e  $\tau_2 = 0.6$ , seguido de outro com  $\tau_1 = 1.5$  e  $\tau_2 = 1.0$ . Os principais resultados destas simulações foram resumidos nas Tabelas 5.2 e 5.3, respectivamente. As melhores simulações da evolução da gota para cada conjunto de experimentos podem ser encontradas nas Figuras 5.20 e 5.21 para 50, 250, 500, 750, 1000, 1500, 2000 e 4000 passos de tempo em uma sequência da esquerda para a direita.

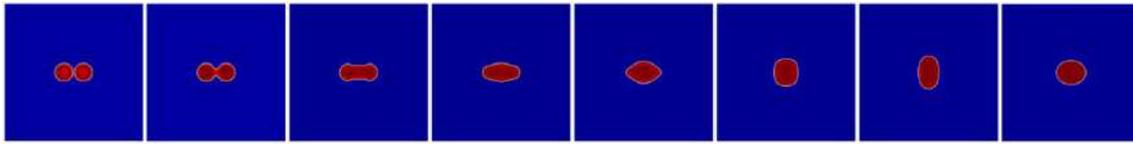


Figura 5.20 – Evolução da coalescência com  $\tau_1 = 0.7$ ,  $\tau_2 = 0.6$  e  $G = 0.8$

Em todas as simulações houve uma grande oscilação nas densidades durante os primeiros passos de tempo. Como discutido na Seção V.1, a inicialização do sistema é uma etapa importante para a estabilidade do método. Em todas as simulações realizadas, os fluidos foram definidos com densidades unitárias nas regiões que ocupam inicialmente e densidades nulas nas regiões ocupadas pelo outro fluido. Uma distribuição contínua de densidades, principalmente próximo às interfaces, deve diminuir consideravelmente as instabilidades iniciais.

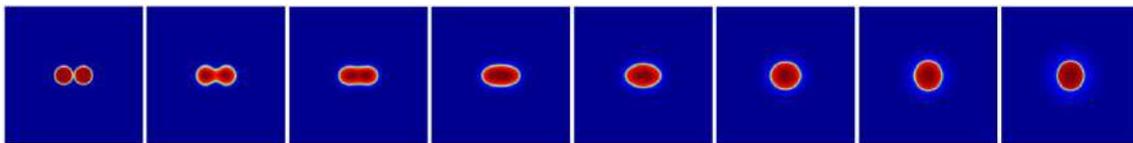


Figura 5.21 – Evolução da coalescência com  $\tau_1 = 1.5$ ,  $\tau_2 = 1.0$  e  $G = 1.7$

Foi observado que o ajuste do parâmetro  $G$  é crucial para manter os fluidos imiscíveis entre si. Quanto maior o valor de  $G$ , maior a tendência dos fluidos em se manter em fases separadas. Por outro lado, quanto menor o valor de  $G$ , menor é a resistência à difusão da gota. Além disso, verificou-se também que um mesmo valor de  $G$  pode ser alto para um conjunto de tempos de relaxação e baixo para outro conjunto. A Figura 5.22 mostra o resultado final da coalescência para (a)  $\tau_1 = 0.7$ ,  $\tau_2 = 0.6$  e  $G = 0.8$  e (b)  $\tau_1 = 1.5$ ,  $\tau_2 = 1.0$  e  $G = 1.7$ . No caso (a), a escolha de  $G = 0.8$  foi suficiente para manter as fases separadas e com baixa difusão. Já no caso (b) este parâmetro foi mais que dobrado e, mesmo assim, não reproduziu uma resistência à mistura das fases.

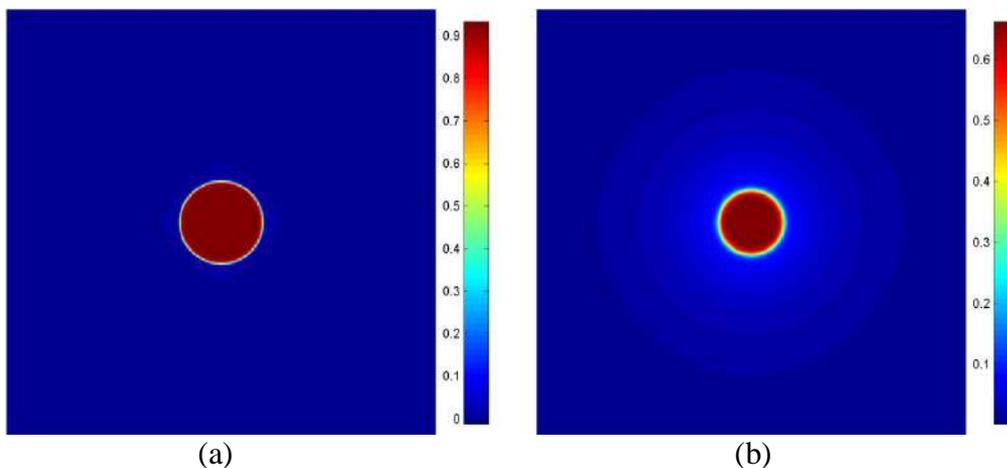


Figura 5.22 – Perfil da gota após 20000 passos de tempo

Verificou-se também que não é possível aumentar  $G$  indiscriminadamente, pois a simulação falha a partir de determinados valores, dependendo dos tempos de relaxação. Tal instabilidade numérica pode ser observada até mesmo nas simulações que se mantêm durante os 20000 passos de tempo através do surgimento de densidades negativas em torno da interface.

Tabela 5.2 – Resultados das simulações com  $\tau_1 = 0.7$ ,  $\tau_2 = 0.6$  e  $\eta = 2$

G	Efeitos positivos	Efeitos negativos
0.7	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A interface se comporta como uma membrana elástica</li> <li>2) A simulação se mantém estável até 20000 passos de tempo</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo</li> <li>2) Ocorre uma difusão considerável, com <math>\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.87</math></li> <li>3) Ocorrem densidades negativas a partir da interface (ordem <math>&lt; 10^{-5}</math>)</li> </ol>
0.8	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A interface se comporta como uma membrana elástica</li> <li>2) Ocorre uma difusão razoavelmente baixa, com <math>\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.93</math></li> <li>3) A simulação se mantém estável até 20000 passos de tempo</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo</li> <li>2) Ocorrem densidades negativas a partir da interface (<math>\approx -0.015</math>)</li> </ol>
0.9	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A interface se comporta como uma membrana elástica</li> <li>2) Ocorre uma difusão baixa, com <math>\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.98</math> até o momento que a simulação falha</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo</li> <li>2) Ocorrem densidades negativas a partir da interface (<math>\approx -0.03</math>)</li> <li>3) A simulação colapsa após 8675 passos de tempo</li> </ol>

Tabela 5.3 – Resultados das simulações com  $\tau_1 = 1.5$ ,  $\tau_2 = 1.0$  e  $\eta = 2$

G	Efeitos positivos	Efeitos negativos
1.6	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A simulação se mantém estável até 20000 passos de tempo</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A interface não oferece grande resistência à difusão, com <math>\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.60</math></li> <li>2) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo</li> <li>3) Ocorre uma dispersão da água pelo domínio</li> <li>4) Ocorrem densidades negativas a partir da interface (<math>\approx -0.001</math>)</li> </ol>
1.7	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A simulação se mantém estável até 20000 passos de tempo</li> </ol>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1) A interface não oferece grande resistência à difusão, com <math>\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.66</math></li> <li>2) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo</li> <li>3) Ocorre uma dispersão da água pelo domínio</li> <li>4) Ocorrem densidades negativas a partir da interface (<math>\approx -0.001</math>)</li> </ol>
1.8	-	1) A simulação colapsa logo no início

Estes experimentos permitiram verificar que a escolha dos tempos de relaxação oferece uma restrição à escolha do parâmetro  $G$ . No primeiro conjunto de experimentos, com  $\tau_1 = 0.7$  e  $\tau_2 = 0.6$ , foi possível chegar próximo de uma situação de imiscibilidade, com uma baixa diminuição na densidade do fluido 2. O mesmo não foi observado no segundo conjunto de experimentos, com  $\tau_1 = 1.5$  e  $\tau_2 = 1.0$ . Todos os valores de  $G$  viáveis foram insuficientes para manter uma resistência à difusão do fluido 2 no fluido 1, com um perfil de dispersão característico de fluidos miscíveis entre si.

Portanto, uma conclusão importante obtida destes experimentos foi que a atribuição de menores valores para os tempos de relaxação dos fluidos, respeitando-se a razão de viscosidades, permite simulações mais próximas do esperado para um sistema composto por fluidos imiscíveis como água e óleo. Esta informação foi utilizada em todas as simulações da Seção V.4.

Outros aspectos também foram analisados no problema. O somatório das densidades locais do sistema foi calculado para diversos passos de tempo e comparado entre si, mantendo-se constante em  $2.514 \times 10^3$  ao longo de toda a simulação, comprovando que a massa se conserva.

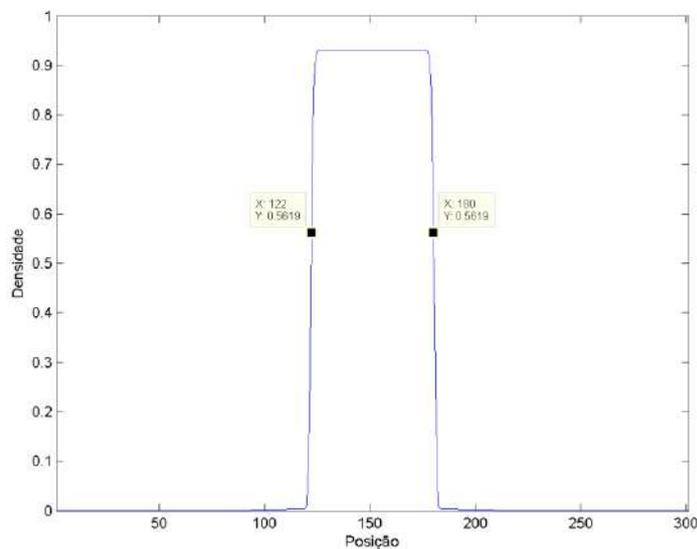


Figura 5.23 – Distribuição final de densidades para  $\tau_1 = 0.7$ ,  $\tau_2 = 0.6$  e  $G = 0.8$

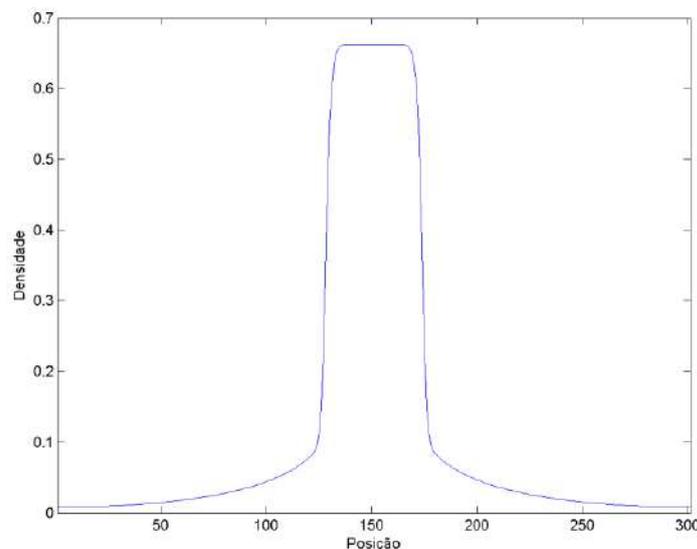


Figura 5.24 – Distribuição final de densidades para  $\tau_1 = 1.5$ ,  $\tau_2 = 1.0$  e  $G = 1.7$

O tamanho final da gota também foi verificado, pois o resultado esperado seria uma gota com raio entre 28 e 29 u.l., ou unidades de lattice. Para  $\tau_1 = 0.7$ ,  $\tau_2 = 0.6$  e  $G = 0.8$ , calculando-se o raio a partir dos pontos mais próximos da metade da interface de acordo com a Figura 5.23, foi verificado que a gota tem um diâmetro de  $180 - 122 = 58$  unidades de lattice, aproximadamente, o que equivale a um raio de 29 u.l.

Já no caso em que  $\tau_1 = 1.5$ ,  $\tau_2 = 1.0$  e  $G = 1.7$ , a gota sofreu uma dispersão pelo domínio, como pode ser visto na Figura 5.24. Caso a simulação fosse executada por mais tempo, a distribuição de densidades certamente chegaria a um perfil gaussiano centrado em 150.

### V.3.2. Simulação II: $\eta = 10$

Na seção anterior, foi verificado que a escolha de menores tempos de relaxação permite a escolha de parâmetros de interação ( $G$ ) que mais se aproximem de uma situação de imiscibilidade. Nesta seção, foi verificada a influência da razão de viscosidades ( $\eta$ ).

A escolha dos valores de  $\tau$  deve satisfazer a seguinte razão:

$$\eta = \frac{\left(\tau_1 - \frac{1}{2}\right)}{\left(\tau_2 - \frac{1}{2}\right)} = 10 \quad (5.42)$$

Respeitando-se a necessidade de valores de  $\tau$  maiores que 0,5 para assegurar estabilidade numérica, como discutido na Seção V.1, foram escolhidos  $\tau_2 = 0.55$  e, conseqüentemente,  $\tau_1 = 1.0$ . Os demais parâmetros para simulação foram mantidos iguais ao caso anterior, com  $\eta = 2$ . Os principais resultados observados estão na Tabela 5.4 a seguir.

Tabela 5.4 – Resultados das simulações com  $\tau_1 = 1.0$ ,  $\tau_2 = 0.55$  e  $\eta = 10$

G	Efeitos positivos	Efeitos negativos
1.0	1) A interface se comporta como uma membrana elástica 2) A simulação se mantém estável até 20000 passos de tempo	1) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo 2) Ocorre uma difusão alta, com $\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.74$ 3) Ocorrem densidades negativas a partir da interface ( $\approx -0.02$ )
1.1	1) A interface se comporta como uma membrana elástica 2) A simulação se mantém estável até 20000 passos de tempo	1) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo 2) Ocorre uma difusão alta, com $\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.80$ 3) Ocorrem densidades negativas a partir da interface ( $\approx -0.035$ )
1.3	1) A interface se comporta como uma membrana elástica 2) A simulação se mantém estável até 20000 passos de tempo	1) A densidade oscila bastante nos primeiros passos de tempo 2) Ocorre uma difusão considerável, com $\rho_{\text{máx,final}} \approx 0.88$ 3) Ocorrem densidades negativas a partir da interface ( $\approx -0.07$ )

Assim como no caso anterior, o balanço de massa foi observado através do somatório constante das densidades locais do fluido 2, igual a  $2.514 \times 10^3$  ao longo de toda a simulação.

Para valores de  $G$  maiores que 1.3, foi observado um comportamento anormal do fluido 2. Para  $G = 1.5$ , por exemplo, a quantidade de fluido 2 que se difunde inicialmente através da interface sofre uma repulsão do fluido 1 suficientemente forte para aglomerar esta massa em gotículas menores (Figura 5.25). Esse resultado não era esperado e foi atribuído à incapacidade do método de Shan e Chen em manter uma interface não-difusiva.

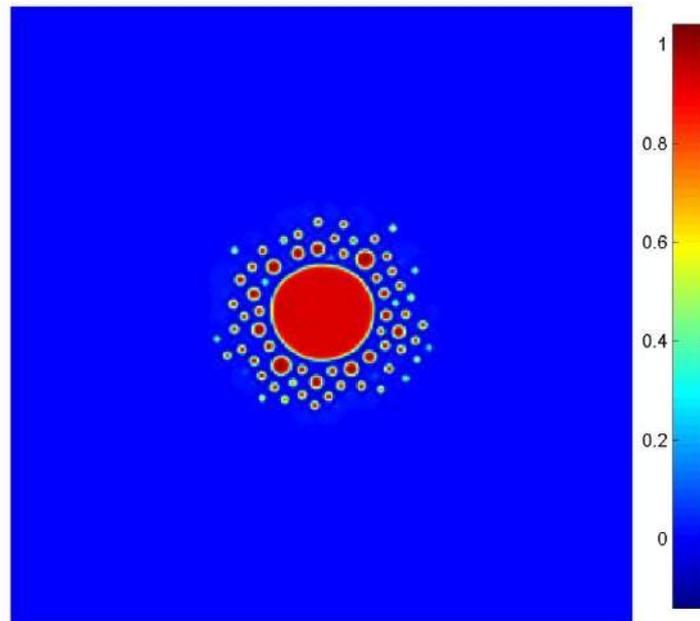


Figura 5.25 – Distribuição final de densidades para  $G = 1.5$

A partir dos experimentos de coalescência, foi definido que as simulações de escoamento de emulsões na seção seguinte seriam executadas com razão de viscosidades igual a 2, pois foi a que apresentou os melhores resultados quanto à imiscibilidade das fases.

#### V.4. Escoamento de Emulsões

O escoamento bifásico óleo-água é um problema de grande interesse da indústria do petróleo. A modelagem computacional do comportamento de emulsões escoando por tubulações e equipamentos pode ser uma ferramenta muito interessante para a otimização de projetos e operações do setor.

Entretanto, simulações em CFD deste tipo de problema não são triviais de se executar usando métodos tradicionais. A quebra e a coalescência de gotas são difíceis de modelar e o equacionamento do fenômeno exige métodos avançados como balanços populacionais. Assim, o método Lattice Boltzmann surge como uma possível alternativa para este tipo de simulação.

##### V.4.1. Simulação I: Emulsão de Água em Óleo com $c_v = 0.2$

A primeira simulação de escoamento realizada foi de uma emulsão com concentração volumétrica ( $c_v$ ) de 20% de água em um tubo horizontal. Os parâmetros

de simulação escolhidos foram:  $\tau_{\text{água}} = 0.6$ ,  $\tau_{\text{óleo}} = 0.7$ ,  $n_y = 101$  e  $g = -1.111 \times 10^{-7}$ . Foi acrescentada ainda uma queda de pressão na direção horizontal tal que a força por unidade de massa nesta direção seja dez vezes a aceleração da gravidade. As densidades virtuais foram  $\rho_{\text{água}} = 1$  e  $\rho_{\text{óleo}} = 0.8$ . Com este conjunto de parâmetros o número de Reynolds da água fica igual a 3.125, exatamente como na simulação V.1.3, que levou os mesmos parâmetros para um escoamento de água pura. Desta forma a simulação não apresentou nenhum problema de estabilidade relacionado à escolha destes parâmetros.

Em termos de parâmetros reais, o escoamento foi simulado em um tubo de 1 mm de diâmetro. Foram assumidas densidades de 1000 kg/m<sup>3</sup> para a água e 800 kg/m<sup>3</sup>. A água tem viscosidade cinemática  $1 \times 10^{-6}$  m<sup>2</sup>/s com uma razão de viscosidade entre óleo e água  $\eta = 2$ . Por simplificação, assumiu-se que a aceleração da gravidade é de 10 m/s<sup>2</sup>.

A escolha dos tempos de relaxação e da razão de viscosidades cinemáticas teve como base o estudo da coalescência de gotas da Seção V.3. Foi demonstrado que o método apresenta instabilidades para grandes diferenças de viscosidade, o que é um fator limitante para a aplicação deste modelo em problemas reais, visto que o óleo tem uma viscosidade consideravelmente maior que a da água.

O parâmetro  $G$  foi testado até que a densidade máxima da água pudesse se manter em torno de 1 após o regime transiente inicial. O valor de  $G$  que apresentou o melhor resultado foi de 1.05. Valores maiores que este causaram problemas numéricos com densidades tendendo a infinito.

O tubo foi definido como “oil wet”, ou seja, o óleo tem maior preferência por molhar a parede do tubo do que a água. O comprimento foi escolhido de acordo com a condição de “tubo infinito” para evitar problemas numéricos. Esta simulação foi executada com  $n_x = 3000$ , o que se mostrou exagerado. As simulações seguintes foram rodadas com malhas um pouco menores na direção horizontal.

O resultado da simulação pode ser visto na Figura 5.26 a seguir. A evolução do escoamento deve ser lida de cima para baixo e da esquerda para a direita. Os passos de tempo representados são os seguintes: 25, 250, 500, 1000, 2000, 4000, 7000, 10000, 15000, 20000, 30000 e 40000.

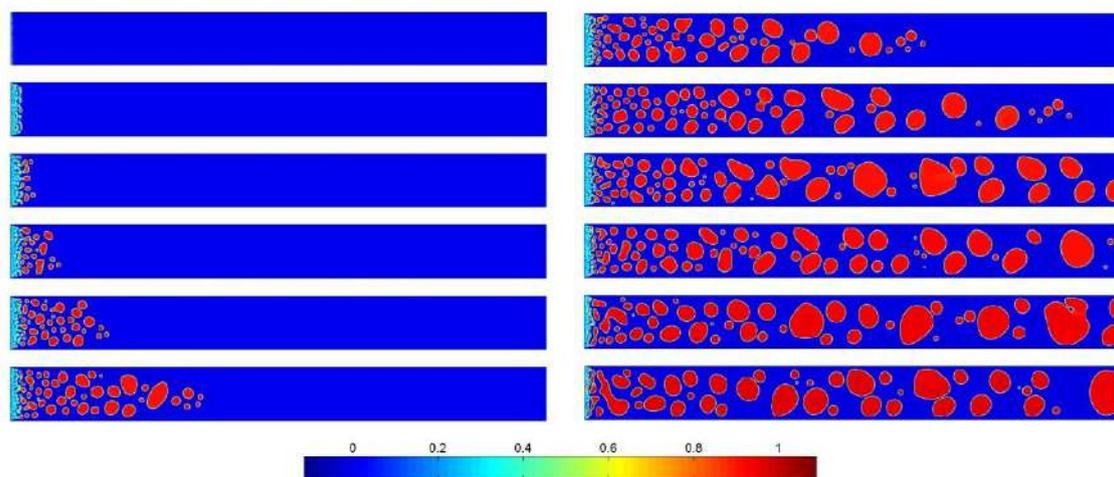


Figura 5.26 – Escoamento de emulsão com 20% de água em volume

Diversos padrões de escoamento bifásico líquido-líquido são apresentados por BRAUNER (2002) na Figura 5.27. Comparando com a Figura 5.26, o escoamento simulado apresenta um padrão de gotas esféricas ou alongadas da fase dispersa na fase contínua, de acordo com os itens (q) e (r) da Figura 5.27.

O tempo de computação para esta simulação foi de 14 horas, aproximadamente. O domínio foi dividido em  $3001 \times 101 = 303101$  pontos na malha. Como as distribuições de probabilidade ainda têm uma terceira dimensão para alocar as 9 direções discretas de velocidade, cada distribuição foi representada por uma matriz com  $303101 \times 9 = 2727909$  elementos. Trata-se, portanto, de uma simulação de alto custo computacional para uma máquina de uso doméstico, com duas matrizes tridimensionais de 2,7 milhões de elementos sendo percorridas várias vezes em um mesmo passo de tempo ao longo de 40000 passos ao todo. O tempo de 14 horas de simulação foi bastante razoável para tais exigências de computação.

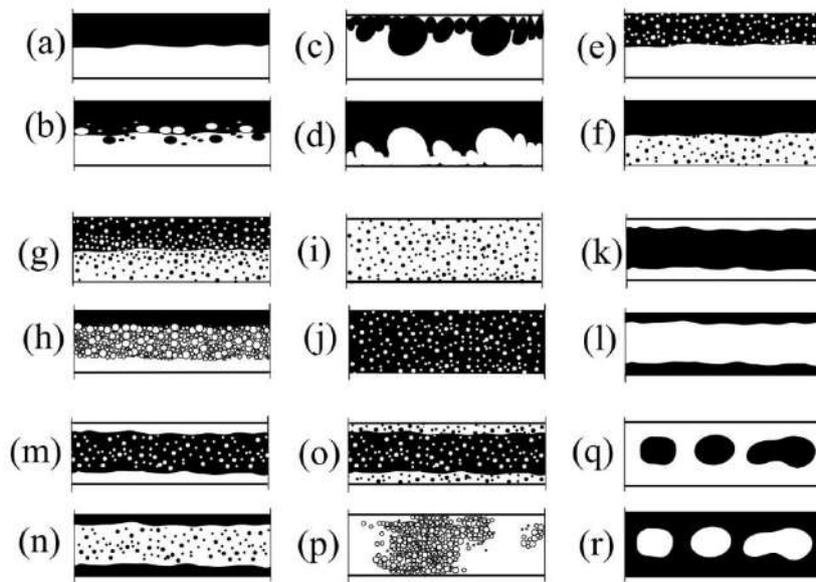


Figura 5.27 – Padrões de escoamentos líquido-líquido (adaptado de BRAUNER, 2002)

A Figura 5.28 mostra uma análise da densidade da água em cinco pontos diferentes. A densidade em todos os pontos está próxima à densidade unitária fornecida nas definições do problema, implicando em um comportamento próximo da imiscibilidade dos fluidos.

É interessante observar que a densidade apresenta uma redução gradativa da entrada (esquerda) para a saída (direita). No método Lattice Boltzmann a densidade está diretamente relacionada à pressão, como discutido na Seção III.3. Portanto, como a pressão é uma força motriz para um escoamento, é esperado um pequeno gradiente de densidade intrínseco ao método.

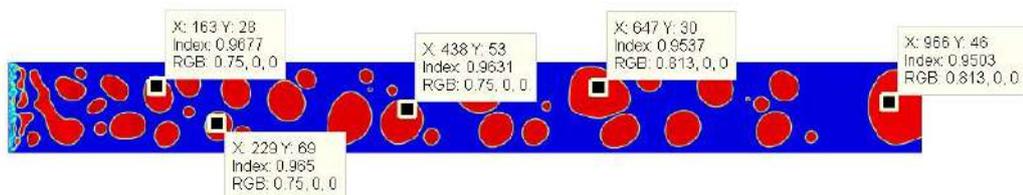


Figura 5.28 – Densidade da água ao longo do tubo para emulsão com  $c_v = 20\%$

Traçando um gráfico de densidade da água na posição  $\tilde{x} = 775$ , que passa próximo ao centro de uma gota com formato circular (Figura 5.29), foi observado que esta gota tem um diâmetro de 42 unidades de lattice, o equivalente a  $420 \mu\text{m}$ . Repetindo esse procedimento para mais três pontos espalhados ao longo do tubo, é possível estimar

um diâmetro médio de 340  $\mu\text{m}$  para as gotas desta emulsão. Este diâmetro aparentemente alto é coerente com a fração volumétrica de alimentação, pois esta quantidade considerável de água se aglomera em gotas maiores pelo efeito de repulsão com o óleo.

Também é possível verificar a presença de algumas densidades negativas próximas à interface água/óleo. Devido à natureza do método Lattice Boltzmann baseada em colisões e propagações, as densidades negativas geradas nas interfaces das gotas acabam por se alastrar por todo o domínio. Esse problema numérico é um fator limitante grave para o modelo avaliado neste trabalho.

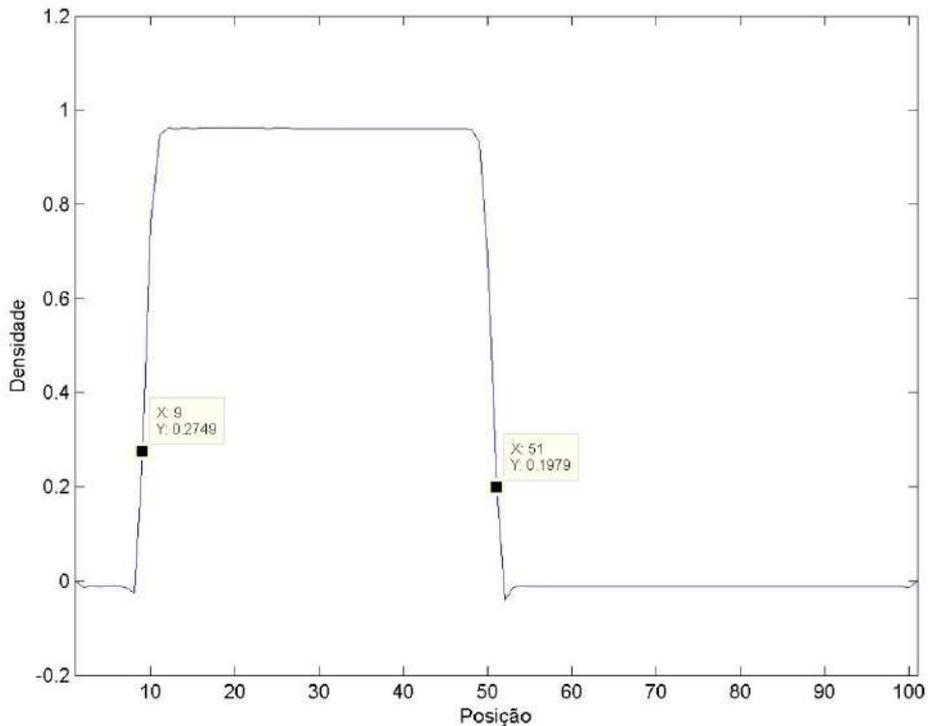


Figura 5.29 – Diâmetro de uma gota de água na emulsão com  $c_v = 20\%$

Para investigar o efeito da concentração volumétrica sobre o padrão de escoamento da emulsão, duas simulações foram executadas para  $c_v = 0.1$  e  $c_v = 0.3$ .

#### V.4.2. Simulação II: Emulsão de Água em Óleo com $c_v = 0.1$

A simulação II foi uma repetição da simulação I com a variação da concentração volumétrica de água de 20% para 10%. O resultado pode ser visto na Figura 5.30. O tempo de computação para esta simulação foi em torno de 15 horas.

O padrão de escoamento observado nesta simulação foi o de emulsão completa da água no óleo, com gotas de diâmetro pequeno dispersas no óleo. O caso (i) e (j) da Figura 5.27 é equivalente ao perfil simulado neste caso.

Tanto na simulação I quanto na simulação II foi possível observar que as gotas com maiores velocidades estão concentradas no centro do tubo, embora tenha ficado mais evidente na simulação II. Este resultado é coerente com a teoria dos escoamentos em tubo circular como discutido na Seção V.1. Neste caso não foi possível traçar um perfil de velocidades tal como foi feito no estudo do escoamento de Pouseuille pelo fato da água estar dispersa em gotículas, o que daria um gráfico com muitas descontinuidades.

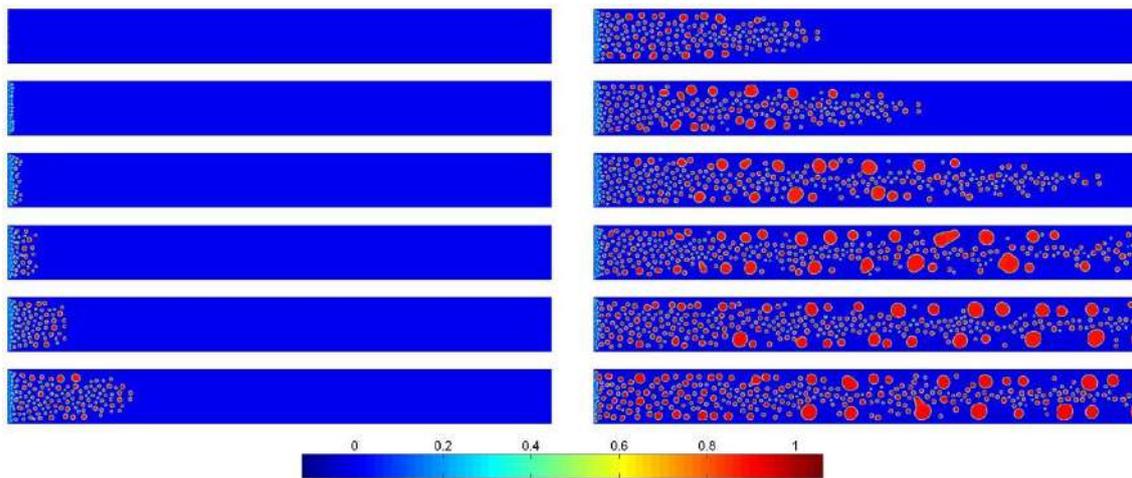


Figura 5.30 – Escoamento de emulsão com 10% de água em volume

Assim como na simulação anterior, a Figura 5.30 deve ser lida de cima para baixo e da esquerda para a direita. Os passos de tempo representados nesta figura também são de 25, 250, 500, 1000, 2000, 4000, 7000, 10000, 15000, 20000, 30000 e 40000, os mesmos que da Figura 5.26.

Uma característica interessante da simulação realizada foi que as gotas de maiores diâmetros mostraram uma tendência a se afastar do centro do tubo, como pode ser visto nos últimos quadros da Figura 5.30. Este efeito surge, possivelmente, do fato do óleo também ter maiores velocidades no centro do tubo. A repulsão neste caso faz as gotas coalescerem afastando-se da região central. Entretanto, como as paredes do tubo ainda são do tipo “oil wet”, as gotas maiores ficam numa região intermediária entre o centro e as paredes do tubo. Este tipo de informação pode ser de grande utilidade no projeto de separadores.

Diversos valores para o parâmetro  $G$  foram testados para esta simulação. O valor  $G = 1.15$  foi o que apresentou os melhores resultados, sendo impossível aumentar este valor sem causar instabilidades à simulação. Analisando as densidades da água ao longo do tubo (Figura 5.31), foi observado que este valor de  $G$  é insuficiente para manter a densidade da água próxima de 1, ficando aproximadamente 10% abaixo do esperado.

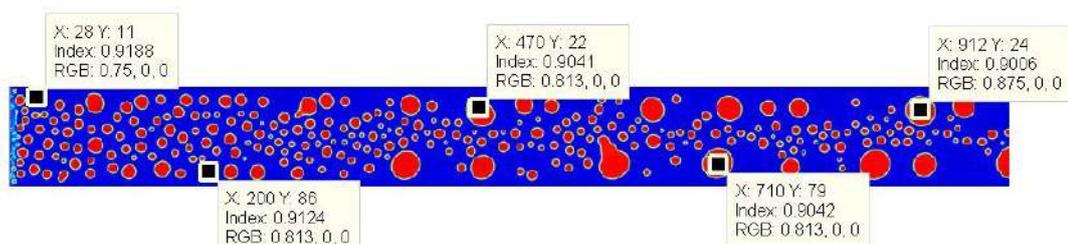


Figura 5.31 – Densidade da água ao longo do tubo para emulsão com  $c_v = 10\%$

O diâmetro médio foi calculado a partir de gráficos de densidade x posição em quatro pontos diferentes do tubo após 40000 passos de tempo, chegando-se a um valor de  $150 \mu\text{m}$ , cerca de 55% menor que o diâmetro médio das gotas da emulsão com fração volumétrica de alimentação  $c_v = 0.2$ . A Figura 5.32 mostra um dos gráficos utilizados no cálculo do diâmetro médio.

As distribuições de diâmetros de gotas de emulsões são muito variáveis de acordo com o tipo de óleo e as condições hidrodinâmicas do experimento. KHATIBI (2003), por exemplo, desenvolve métodos experimentais de medição de tamanhos de

gotas em emulsões de 10 a 20% de água para determinados tipos de óleo, cujas distribuições ocupam um intervalo de 10 a 200  $\mu\text{m}$ . Os resultados destas simulações estão, portanto, dentro de uma faixa normal de diâmetros de gotas.

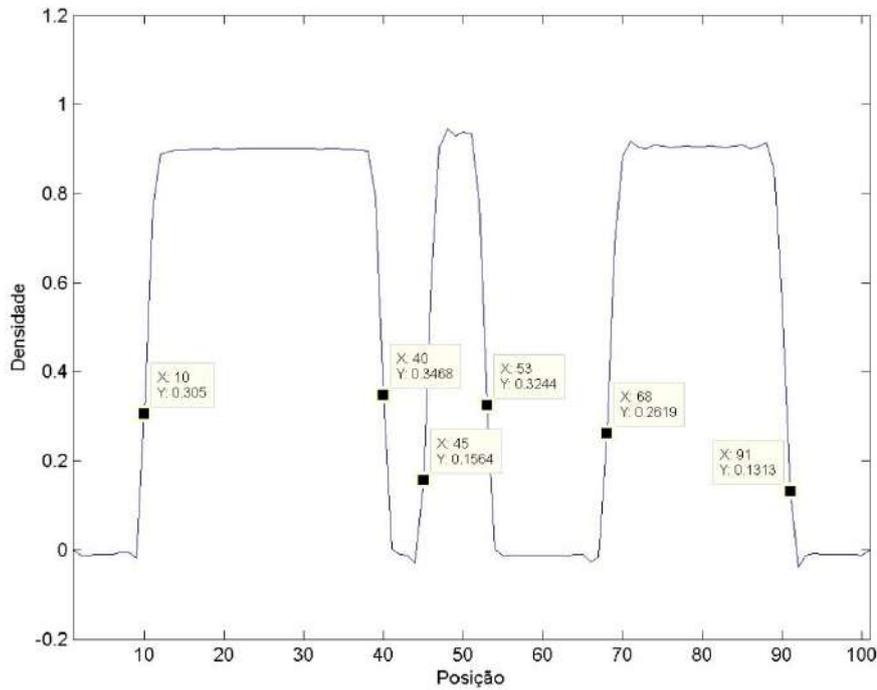


Figura 5.32 – Diâmetros de três gotas de água na emulsão com  $c_v = 10\%$

#### V.4.3. Simulação III: Emulsão de Água em Óleo com $c_v = 0.3$

Outra simulação foi executada com variação na concentração volumétrica, aumentada para 0.3. A Figura 5.33 mostra a evolução do escoamento. Esta simulação foi rodada com um comprimento de tubo ligeiramente menor (2800 unidades de lattice) e por 30000 passos de tempo, reduzindo o tempo de computação para 10 horas, aproximadamente.

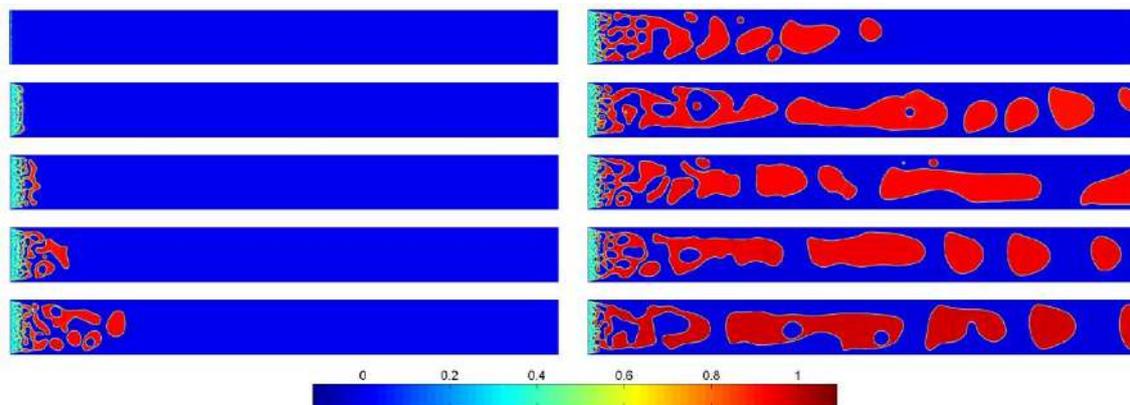


Figura 5.33 – Escoamento de emulsão com 30% de água em volume

O valor  $G = 1.0$  foi escolhido para esta simulação como o de melhor desempenho. Este valor foi menor que o  $G$  ótimo para a emulsão com 20% de água, que por sua vez foi menor que o  $G$  ótimo da emulsão com 10% de água. Existe, portanto,

uma correlação inversa entre a concentração da fase dispersa e o parâmetro  $G$ , conforme disposto na Figura 5.34.

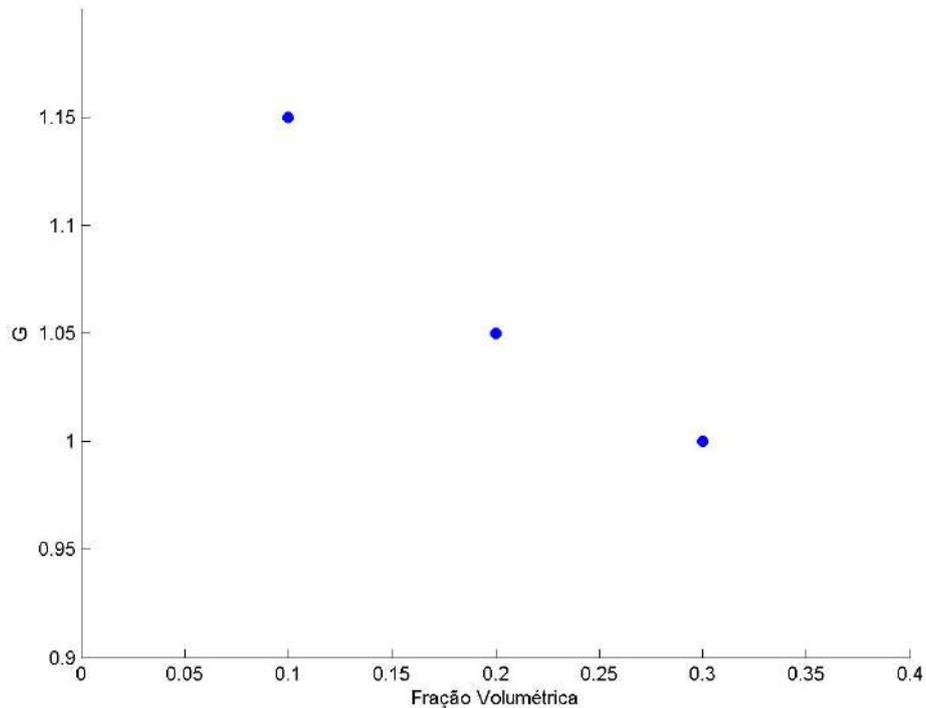


Figura 5.34 – Relação entre  $G$  e  $c_v$  para as simulações realizadas

O escoamento simulado apresentou novos fenômenos interfaciais interessantes. O padrão de escoamento foi um intermediário entre o de gotas alongadas e o central anular, representados na Figura 5.27 pelas letras (q)/(r) e (k)/(l), respectivamente.

Duas configurações complexas de emulsões foram observadas na imagem referente ao passo de tempo 10000 (Figura 5.35). Uma parcela de óleo ficou retida dentro da água próximo à metade do tubo. Este tipo de emulsão é chamado óleo em água em óleo ou O/A/O. Existem também emulsões duplas do tipo A/O/A. Quanto maior a fração volumétrica da água, maior será sua tendência a aprisionar gotas de óleo.

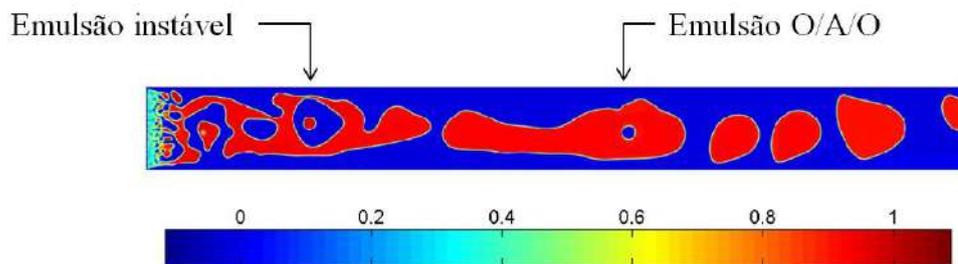


Figura 5.35 – Formação de emulsões complexas

As emulsões duplas podem ser bastante estáveis e se manter ao longo do escoamento. Entretanto, outra formação ainda mais complexa foi observada nesta mesma figura. Um pouco depois da entrada do tubo é possível observar uma emulsão tripla A/O/A/O. De acordo com a Figura 5.36, esta configuração mostrou-se instável e não se manteve por muito tempo, com o óleo rompendo a barreira de água entre os passos de tempo 11000 (cima) e 11100 (baixo) e se juntando à fase contínua.

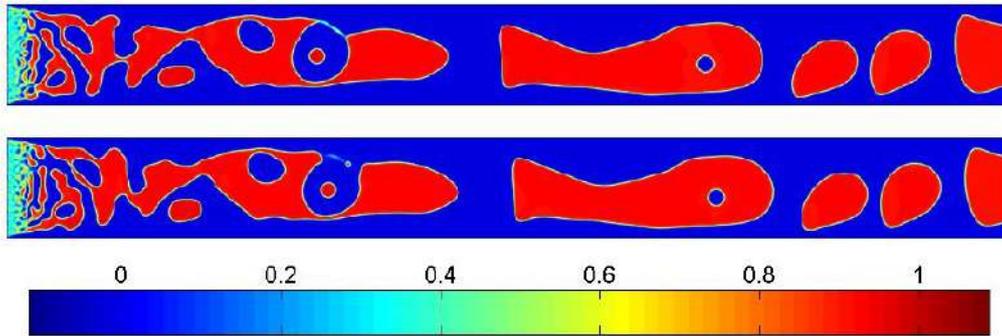


Figura 5.36 – Emulsão tripla se desfazendo com o tempo

Um fenômeno característico de escoamentos de emulsões com altas concentrações que ficou bem representado nesta simulação foi o da inversão de fases. Neste fenômeno, a fase dispersa pode se aglomerar em um ponto de modo a se tornar a fase contínua, enquanto a fase contínua começa a se comportar como fase dispersa.

Segundo MCCLAREY e MANSOORI (1978), as condições de inversão de fase em sistemas bifásicos são fundamentais para projetos de contactores, trocadores de calor e separadores, por exemplo. Diversos fatores podem influenciar neste fenômeno, tais como: razão volumétrica entre as fases, diferenças de densidade e viscosidade, tensão interfacial, condições de escoamento e agitação. Existem muitos trabalhos disponíveis na literatura quanto à inversão de fases em tanques de mistura, mas estudos para tubulações são escassos (DE ORTIZ, 2010).

O campo de densidades do passo de tempo  $\tilde{t} = 20000$  evidencia uma inversão de fases logo na região de alimentação do tubo (Figura 5.37). O óleo atravessa uma massa de água que se concentra na entrada na forma de gotas dispersas. Simultaneamente, a água escoou como fase dispersa da região central em diante.

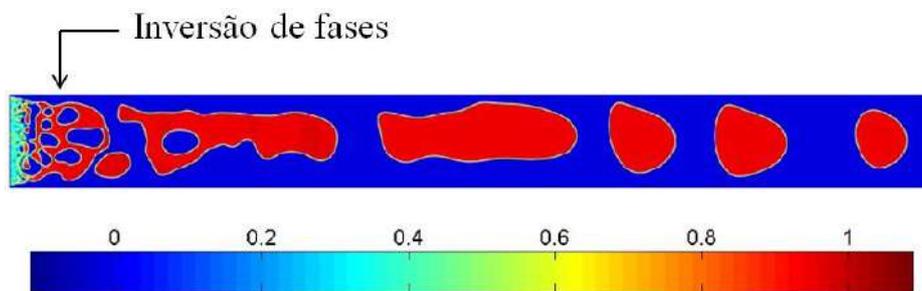


Figura 5.37 – Inversão de fases entre óleo e água na entrada do tubo

Analisando a densidade da água ao longo do escoamento após 30000 passos de tempo pela Figura 5.38, foi observado que a simulação III foi a que mais se aproximou de uma densidade  $\bar{\rho} = 1$ .

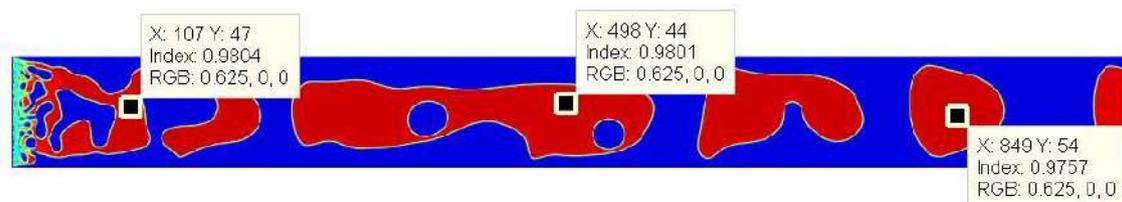


Figura 5.38 – Densidade da água ao longo do tubo para emulsão com  $c_v = 30\%$

É possível concluir pela análise das três simulações executadas que o grau de diluição da emulsão também influencia na capacidade do modelo em manter os líquidos com densidade constante, sendo as emulsões mais diluídas as com maiores limitações para manter as interfaces não-difusivas.

Como o padrão de escoamento observado foi mais próximo de uma emulsão anular, não é adequado fazer medidas de diâmetro de gotas como nas simulações anteriores.

## Capítulo VI – Conclusão

Neste trabalho foi avaliado o método Lattice Boltzmann aplicado à simulação de escoamentos de emulsões de água em óleo, com enfoque no modelo de Shan e Chen para problemas multifásicos.

O modelo monofásico monocomponente reproduziu bem dois resultados clássicos da fluidodinâmica: o escoamento de Poiseuille e o escoamento ao redor de cilindro. No primeiro caso foi possível observar os efeitos de parâmetros numéricos sobre a qualidade dos resultados, demonstrando-se que pequenas variações no tempo de relaxação  $\tau$  podem alterar fortemente a acurácia da simulação. Já o segundo caso demonstrou a influência de parâmetros físicos sobre a dinâmica dos fluidos.

O modelo multifásico multicomponente de Shan e Chen apresentou problemas numéricos para fases dispersas devido à própria descontinuidade dos campos de densidades. As instabilidades surgiram principalmente nas interfaces durante os cálculos de colisão, região onde há as diferenças mais acentuadas de densidades para cada componente. Tais instabilidades foram transportadas por todo o domínio pelo mecanismo de propagação inerente ao método, o que não permite garantir a acurácia dos resultados.

O principal parâmetro de controle da interação entre os componentes ( $G$ ) mostrou ter restrições bastante rígidas. A escolha de um parâmetro  $G$  muito baixo provocou a mistura dos fluidos, enquanto um valor excessivamente alto provocou divergência no método. O uso combinado dos parâmetros  $\tau$  e  $G$  permitiu relaxar parcialmente estas restrições. Para reproduzir condições próximas à imiscibilidade, baixos valores de  $\tau$  associados aos maiores valores possíveis de  $G$  são sugeridos.

De uma forma geral, o método foi capaz de simular um comportamento físico realista para os fluidos. Configurações complexas de sistemas multifásicos foram observadas em todas as simulações de escoamentos de emulsões, tais como a influência da concentração volumétrica sobre o padrão de escoamento, a coalescência de gotas, a inversão de fases e a formação de emulsões duplas.

Portanto, a simplicidade para programação em Fortran e a capacidade de reproduzir uma dinâmica interfacial complexa tornam o método muito atrativo para simulações de emulsões de água em óleo. Ajustes numéricos são necessários, porém, para garantir melhor convergência dos resultados.

Algumas sugestões para trabalhos futuros são:

- (a) Implementação de modelos mais recentes do método Lattice Boltzmann para problemas multifásicos dispersos;
- (b) Adaptação do modelo ao método de múltiplos tempos de relaxação, equivalente aos métodos adaptativos de controle do passo de tempo;
- (c) Aplicação do método Lattice Boltzmann para a simulação de equipamentos de separação com geometrias complexas;
- (d) Estudo de padrões de escoamento de emulsões em tubos e fenômenos complexos como inversões de fases com validação experimental.

## Referências Bibliográficas

- Bird, R.B. Fenômenos de Transporte. 2 ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004.
- Brauner, N. Liquid-Liquid Two-Phase Flow Systems. In: Bertola, V. Modelling and Control of Two-Phase Phenomena. Udine: CISM Center, 2002.
- Carmo, R.P. Simulação do Escoamento em Meios Porosos Utilizando o Método Lattice-Boltzmann [Monografia]. Rio de Janeiro: UFRJ, 2013.
- Castellan, G.W. Fundamentos de Físico-Química. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1986.
- De Ortiz, E.S.P. Liquid-Liquid Flow. Disponível em: <<http://www.thermopedia.com/content/10/>>. Acesso em: 25 jul 2015.
- Fox, R.W., Pritchard, P.J., McDonald, A.T. Introdução à Mecânica dos Fluidos. 7 ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2012.
- Gunstensen, A.K., Rothman, D.H., Zaleski, S., Zanetti, G. Lattice Boltzmann Modelo f Immiscible Fluids. Physical Review A, v. 43, p. 4320-4327, 1991.
- Inamuro, T., Yoshina, M., Ogino, F. A Non-Slip Boundary Condition for Lattice Boltzmann Simulations. Physics of Fluids, v. 7, p. 2928-2930, 1995.
- Khatibi, M. Experimental Study on Droplet Size of Dispersed Oil-Water Flow [dissertação]. Trondheim: NTNU, 2013.
- Kremer, G.M. Uma Introdução à Equação de Boltzmann. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005. 160 p.
- Krüger, T. Unit Conversion in LBM. LBM Workshop; 2011 Ago 22-26; Edmonton, Canada.
- Latt, J., Chopard, B. A Benchmark Case for Lattice Boltzmann: Turbulent Dipole-Wall Collision. International Journal of Modern Physics C, v. 18, p. 619-626, 2007.
- Leal-Calderon, F., Schmitt, V., Bibette, J. Emulsion Science: Basic Principles. 2 ed. New York: Springer, 2007.
- McClarey, M.J., Mansoori, G.A. Factors Affecting the Phase Inversion of Dispersed Immiscible Liquid-Liquid Mixtures. AIChE Journal, v. 74, p. 134-139, 1978.
- Martys, N.S., Chen. H. Simulation of Multicomponent Fluids in Complex Three-Dimensional Geometries by the Lattice Boltzmann Method. Physical Review, v. 53, p. 743-750, 1996.
- McNamara, G.R., Zanetti, G. Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice Gas Automata. Physical Review Letters, v. 61, p. 2332-2335, 1988.

Mei, R., Luo, L., Lallemand, P., d'Humières, D. Consistent Initial Conditions for Lattice Boltzmann Simulations. *Computer & Fluids*, v. 35, p. 855 – 862, 2006.

Mohamad, A.A. *Lattice Boltzmann Method: Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes*. Londres: Springer, 2011.

Moortgat, J., Firoozabadi, A. Three-Phase Compositional with Capillarity in Heterogeneous and Fractured Media. Paper apresentado em: SPE Annual Technical Conference and Exhibition; 2012 Out 8-10; San Antonio, Texas.

Perry, R.H. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 8 ed; New York: McGraw-Hill, 2008.

Rosen, M.J. *Surfactants and Interfacial Phenomena*. 3 ed. New Jersey: Wiley, 2004.

Rothman, D., Keller, J. Immiscible Cellular-Automation Fluids. *Journal of Statistical Physics*, v. 52, p. 1119-1127, 1988.

Schäfer, M. *Computational Engineering: Introduction to Numerical Methods*. Berlin: Springer, 2006.

Shan, X., Chen, H. Lattice Boltzmann Model for Simulating Flows with Multiple Phases and Components. *Physical Review E*, v. 47, p. 1815 – 1819, 1993.

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

Succi, S. *The Lattice Boltzmann Equation: for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford: Editora da Universidade de Oxford, 2001.

Sukop, M.C., Thorne, D.T. *Lattice Boltzmann Modeling: an Introduction for Geoscientists and Engineers*. Berlin: Springer, 2006. 172 p.

Swift, M.R., Orlandini, E., Osborn, W.R., Yeomans, J.M. Lattice Boltzmann Simulations of Liquid-Gas and Binary Fluid Systems. *Physical Review E*, v. 54, p. 5041-5052, 1996.

Thomas, J.E. *Fundamentos da Engenharia de Petróleo*. Rio de Janeiro: Interciência, 2001.

Versteeg, H.K., Malalasekera, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: the Finite Volume Method*. Nova Iorque: Prentice Hall, 1995.

Wauquier, J.P. *Petroleum Refining*. Paris: Technip, 1994.

Wolf-Gladrow, D.A. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: an Introduction*. Springer, 2005.

Wolfram, S. Theory and Applications of Cellular Automata. Singapura: World Scientific Publishing Co., 1986.

Wolfram, S. A New Kind of Science. Champaign: Wolfram Media, 2002.

Yergin, D. The Prize: The Epic Quest for Oil, Money and Power. New York: Simon & Schuster, 1991.

Zou, Q., He, X. On Pressure and Velocity Boundary Conditions for the Lattice Boltzmann BGK Model. Physics of Fluids, v. 9, p. 1591-1598, 1997.

## Apêndice A – Códigos em Fortran

### A.1. Modelo Monofásico Monocomponente

Este código foi utilizado na simulação da Seção V.1.2. É preciso ajustar os parâmetros e as sub-rotinas para executar outras simulações monofásicas e monocomponentes.

---

```
PROGRAM LBM

IMPLICIT NONE

! Declaração de variáveis

INTEGER, PARAMETER :: nx = 1150
INTEGER, PARAMETER :: ny = 100
INTEGER, PARAMETER :: n = nx * ny
INTEGER, PARAMETER :: nt = 20000
INTEGER :: timestep
INTEGER :: k

INTEGER :: ex(9) = (/ 0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, -1, 1 /)
INTEGER :: ey(9) = (/ 0, 0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1 /)

REAL, PARAMETER :: ga = 1.111111111E-5
REAL, PARAMETER :: tau2 = 0.6
REAL, PARAMETER :: uxeq2 = 0.15
REAL, PARAMETER :: uyeq2 = 0.
REAL, PARAMETER :: rhoent2 = 1.
REAL :: maxrho1 = 0
REAL :: maxrho2 = 0
REAL :: rho1max
REAL :: rho2max

REAL :: limrho1(2)
REAL :: limrho2(2)

REAL :: nos_solidos(ny,nx) = 0
REAL :: rho2(ny,nx) = 0.
REAL :: rho2graf(ny,nx)
REAL :: uxeq2(ny,nx) = 0.15
REAL :: uyeq2(ny,nx) = 0.
REAL :: px2(ny,nx)
REAL :: py2(ny,nx)

REAL :: feq2(ny,nx,9)
REAL :: f2(ny,nx,9)

CHARACTER(15) :: char

! Inicialização da matriz do meio poroso, nos_solidos
nos_solidos(1,:) = 1.
nos_solidos(ny,:) = 1.

! Inicialização das densidades dos fluidos
rho2 = 1

! Cálculo das funções de distribuição de equilíbrio iniciais
CALL fequilibrio(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho2, uxeq2, uyeq2, feq2)

f2 = feq2

! Método Lattice Boltzmann
```

```

DO timestep = 1, nt
  ! Cálculo de densidades e momentos lineares

  CALL p_rho(f2, nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho2, px2, py2)

  ! Condição de contorno de entrada

  CALL entrada(nx, ny, uxent2, uyent2, rhoent2, nos_solidos, f2, rho2, px2, py2)

  ! Cálculo das velocidades de equilíbrio

  WHERE (nos_solidos == 0)
    uxeq2 = px2 / rho2 + tau2 * ga
    uyeq2 = py2 / rho2
  END WHERE

  ! Cálculo da distribuição de equilíbrio

  CALL fequilibrio(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho2, uxeq2, uyeq2, feq2)

  ! Etapa de colisão

  CALL colisao(nx, ny, tau2, nos_solidos, feq2, f2)

  ! Etapa de propagação

  CALL propagacao(nx, ny, nos_solidos, f2)

  ! Condição de contorno de saída

  f2(:,nx,:) = f2(:,nx-1,:)

  ! Geração do arquivo de resultados

  IF ( MOD(timestep,25) == 0 ) THEN

    rho2max = MAXVAL(uxeq2)
    WRITE (*,*) "Velocidade maxima da agua: ", rho2max
    WRITE (*,*) "Passo: ", timestep

    ! Máximo da densidade

    IF ( rho2max > maxrho2 ) THEN
      maxrho2 = rho2max
    END IF

    ! Matriz de velocidades

    WHERE ( nos_solidos == 0 )
      rho2graf = uxeq2
    ELSEWHERE
      rho2graf = 0.
    END WHERE

    ! Caractere para criar nomes diferentes para cada arquivo

    WRITE (char,'(I15)') timestep

    ! Criação do arquivo .dat organizado em forma de matriz para posterior
    processamento em MATLAB
    OPEN (UNIT = 9, FILE = 'velocidade'//TRIM(ADJUSTL(char))//'.dat', STATUS =
'REPLACE', ACTION = 'WRITE')
    DO k = 1, ny
      WRITE (9,*) rho2graf(k,:)
    END DO
    CLOSE (UNIT = 9)
  END IF

END DO

```

```

limrho2(1) = 0.
limrho2(2) = maxrho2

OPEN (UNIT = 9, FILE = 'limrho2.txt', STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE')
WRITE (9,*) limrho2
CLOSE (UNIT = 9)

END PROGRAM

```

---

## A.2. Modelo Multifásico Multicomponente

Este código foi utilizado na simulação da Seção V.4.1. É preciso ajustar os parâmetros e as sub-rotinas para executar outras simulações multifásicas e/ou multicomponentes.

---

```

PROGRAM LBM

IMPLICIT NONE

! Declaração de variáveis

INTEGER, PARAMETER :: nx = 3001
INTEGER, PARAMETER :: ny = 101
INTEGER, PARAMETER :: n = nx * ny
INTEGER, PARAMETER :: nt = 60000
INTEGER :: timestep
INTEGER :: k

INTEGER :: ex(9) = (/ 0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, -1, 1 /)
INTEGER :: ey(9) = (/ 0, 0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1 /)

REAL, PARAMETER :: pi = 3.1415926536
REAL, PARAMETER :: ga = -1.11111111E-7
REAL, PARAMETER :: dp = 1.11111111E-6
REAL, PARAMETER :: G = 1.05
REAL, PARAMETER :: theta = pi / 6
REAL, PARAMETER :: Gads1 = -0.05
REAL, PARAMETER :: Gads2 = (Gads1 + G*cos(theta)) * 1.03
REAL, PARAMETER :: tau1 = 0.7
REAL, PARAMETER :: tau2 = 0.6
REAL, PARAMETER :: uxent = 0.0013
REAL, PARAMETER :: uyent = 0.
REAL, PARAMETER :: rhoent1 = 0.8
REAL, PARAMETER :: rhoent2 = 1.
REAL :: cv = 0.2
REAL :: maxrho1 = 0
REAL :: maxrho2 = 0
REAL :: rho1max = 0
REAL :: rho2max = 0
REAL :: minrho1 = 0
REAL :: minrho2 = 0
REAL :: rho1min = 0
REAL :: rho2min = 0

REAL :: limrho1(2)
REAL :: limrho2(2)

REAL :: nos_solidos(ny,nx) = 0
REAL :: rho1(ny,nx) = 0.
REAL :: rho2(ny,nx) = 0.
REAL :: rho1graf(ny,nx)
REAL :: rho2graf(ny,nx)
REAL :: uxeq1(ny,nx) = uxent
REAL :: uyeq1(ny,nx) = 0.
REAL :: uxeq2(ny,nx) = 0.
REAL :: uyeq2(ny,nx) = 0.

```

```

REAL :: uxbulk(ny,nx) = 0.
REAL :: uybulk(ny,nx) = 0.
REAL :: px1(ny,nx)
REAL :: py1(ny,nx)
REAL :: px2(ny,nx)
REAL :: py2(ny,nx)
REAL :: Fx1(ny,nx) = 0.
REAL :: Fy1(ny,nx) = 0.
REAL :: Fx2(ny,nx) = 0.
REAL :: Fy2(ny,nx) = 0.
REAL :: Fadsx1(ny,nx) = 0.
REAL :: Fadsy1(ny,nx) = 0.
REAL :: Fadsx2(ny,nx) = 0.
REAL :: Fadsy2(ny,nx) = 0.

REAL :: feq1(ny,nx,9)
REAL :: feq2(ny,nx,9)
REAL :: f1(ny,nx,9)
REAL :: f2(ny,nx,9)

CHARACTER(15) :: char

! Inicialização da matriz do meio poroso, nos_solidos

nos_solidos(1,:) = 1.
nos_solidos(ny,:) = 1.

! Inicialização das densidades dos fluidos

rho1 = 0.8
rho2(:,1) = 1.0

! Inicialização das velocidades de equilíbrio

CALL uequilibrio(nx, ny, tau1, ga, uxbulk, uybulk, Fx1, Fy1, Fadsx1, Fadsy1, uxeq1, uyeq1)
CALL uequilibrio(nx, ny, tau2, ga, uxbulk, uybulk, Fx2, Fy2, Fadsx2, Fadsy2, uxeq2, uyeq2)

! Cálculo das funções de distribuição de equilíbrio iniciais

CALL fequilibrio(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho1, uxeq1, uyeq1, feq1)
CALL fequilibrio(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho2, uxeq2, uyeq2, feq2)

f1 = feq1
f2 = feq2

CALL entrada(nx, ny, uxent, uyent, cv, rhoent1, rhoent2, nos_solidos, f1, f2, rho1, rho2,
px1, px2, py1, py2)

! Método Lattice Boltzmann

DO timestep = 1, nt
  ! Cálculo de densidades e momentos lineares

  CALL p_rho(f1, nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho1, px1, py1)
  CALL p_rho(f2, nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho2, px2, py2)

  ! Condições de contorno de entrada

  IF (nt > 1) THEN
    CALL entrada(nx, ny, uxent, uyent, cv, rhoent1, rhoent2, nos_solidos, f1, f2,
rho1, rho2, px1, px2, py1, py2)
  END IF

  ! Cálculo das velocidades do bulk

  CALL ubulk(nx, ny, tau1, tau2, nos_solidos, px1, py1, px2, py2, rho1, rho2, uxbulk,
uybulk)

  ! Cálculo das forças de atração e de adsorção

```

```

CALL forcas(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho2, G, Gads1, Fadsx1, Fadsy1, Fx1, Fy1)
CALL forcas(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho1, G, Gads2, Fadsx2, Fadsy2, Fx2, Fy2)

! Cálculo das velocidades de equilíbrio

CALL uequilibrio(nx, ny, tau1, ga, uxbulk, uybulk, Fx1, Fy1, Fadsx1, Fadsy1, uxeq1,
uyeq1)
CALL uequilibrio(nx, ny, tau2, ga, uxbulk, uybulk, Fx2, Fy2, Fadsx2, Fadsy2, uxeq2,
uyeq2)

uxeq1 = uxeq1 + tau1 * dp
uxeq2 = uxeq2 + tau2 * dp

! Cálculo da distribuição de equilíbrio

CALL fequilibrio(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho1, uxeq1, uyeq1, feq1)
CALL fequilibrio(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho2, uxeq2, uyeq2, feq2)

! Etapa de colisão

CALL colisao(nx, ny, tau1, nos_solidos, feq1, f1)
CALL colisao(nx, ny, tau2, nos_solidos, feq2, f2)

! Etapa de propagação

CALL propagacao(nx, ny, nos_solidos, f1)
CALL propagacao(nx, ny, nos_solidos, f2)

! Condições de contorno de saída

f1(:,nx,:) = f1(:,nx-1,:)
f2(:,nx,:) = f2(:,nx-1,:)

! Geração do arquivo de resultados

IF ( MOD(timestep,25) == 0 ) THEN

rho1max = MAXVAL(rho1(:,2:nx))
rho1min = MINVAL(rho1(:,2:nx))
rho2max = MAXVAL(rho2(:,2:nx))
rho2min = MINVAL(rho2(:,2:nx))
WRITE (*,*) "Densidade máxima do óleo: ", rho1max
WRITE (*,*) "Densidade mínima do óleo: ", rho1min
WRITE (*,*) "Densidade máxima da água: ", rho2max
WRITE (*,*) "Densidade mínima da água: ", rho2min
WRITE (*,*) "Passo: ", timestep

! Máximo da densidade

IF ( rho2max > maxrho2 ) THEN
maxrho2 = rho2max
END IF

! Mínimo da densidade

IF ( rho2min < minrho2 ) THEN
minrho2 = rho2min
END IF

! Matriz de densidades

WHERE ( nos_solidos == 0 )
rho2graf = rho2
ELSEWHERE
rho2graf = 0.
END WHERE

! Caractere para criar nomes diferentes para cada arquivo

WRITE (char,'(I15)') timestep

```

```

! Criação do arquivo .dat organizado em forma de matriz para posterior
processamento em MATLAB
OPEN (UNIT = 9, FILE = 'densidade'//TRIM(ADJUSTL(char))//'.dat', STATUS =
'REPLACE', ACTION = 'WRITE')
DO k = 1, ny
WRITE (9,*) rho2graf(k,:)
END DO
CLOSE (UNIT = 9)

limrho2(1) = minrho2
limrho2(2) = maxrho2

OPEN (UNIT = 9, FILE = 'limrho2.txt', STATUS = 'REPLACE', ACTION = 'WRITE')
WRITE (9,*) limrho2
CLOSE (UNIT = 9)

END IF

END DO

END PROGRAM

```

---

### A.3. Sub-rotinas

As sub-rotinas a seguir foram utilizadas em todas as simulações deste trabalho. A sub-rotina referente à condição de contorno de entrada na Seção A.3.3 foi a utilizada nas simulações de escoamentos de emulsões, precisando de adaptações para o caso monofásico. A condição de contorno de saída está implementada diretamente no código principal, pois é uma interpolação simples, não justificando a criação de uma sub-rotina.

#### A.3.1. Distribuição de Equilíbrio

---

```

SUBROUTINE fequilibrio(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho, uxeq, uyeq, feq)

```

```

! Descrição: Subrotina para cálculo da distribuição de velocidades de equilíbrio, feq

```

```

IMPLICIT NONE

```

```

! Declaração de parâmetros de entrada e saída

```

```

INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
INTEGER, INTENT(IN) :: ex(9)
INTEGER, INTENT(IN) :: ey(9)
REAL, INTENT(IN) :: nos_solidos(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: rho(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: uxeq(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: uyeq(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: feq(ny,nx,9)

```

```

! Declaração de variáveis auxiliares

```

```

INTEGER :: k
REAL :: a = 3., b = 9./2., c = -3./2.
REAL :: w(9)
REAL :: m(ny,nx)
REAL :: n(ny,nx)

```

```

! Inicialização de feq

```

```

feq = 0.

```

```

! Definição do vetor de pesos, w

```

```

w = (/ 4., 1., 1., 1., 1., 0.25, 0.25, 0.25, 0.25 /)
w = w / 9.

! Definição de n
n = uxeq * uxeq + uyeq * uyeq

! Cálculo da distribuição de equilíbrio, feq
DO k = 1, 9
  m = ex(k) * uxeq + ey(k) * uyeq
  feq(:, :, k) = w(k) * rho * (1 + a * m + b * m * m + c * n)
END DO

RETURN
END SUBROUTINE

```

---

### A.3.2. Densidades de Massa e de Momento Macroscópicas

```

SUBROUTINE p_rho(f, nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho, px, py)

! Descrição: Subrotina para cálculo da densidade rho e dos momentos lineares px e py

IMPLICIT NONE

! Declaração de parâmetros de entrada e saída
REAL, INTENT(IN) :: f(ny,nx,9)
INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
INTEGER, INTENT(IN) :: ex(9)
INTEGER, INTENT(IN) :: ey(9)
REAL, INTENT(IN) :: nos_solidos(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: rho(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: px(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: py(ny,nx)

! Declaração de variáveis auxiliares
INTEGER :: k

! Inicialização de px, py e rho
px = 0.
py = 0.
rho = 0.

! Cálculo dos momentos lineares e da densidade
DO k = 1, 9
  WHERE ( nos_solidos == 0 )
    px = px + ex(k) * f(:, :, k)
    py = py + ey(k) * f(:, :, k)
    rho = rho + f(:, :, k)
  END WHERE
END DO

RETURN
END SUBROUTINE

```

---

### A.3.3. Condição de Contorno de Entrada

```

SUBROUTINE entrada(nx, ny, uxent, uyent, cv, rhoent1, rhoent2, nos_solidos, f1, f2, rho1,
rho2, px1, px2, py1, py2)

! Descrição: Subrotina para aplicação da condição de contorno de velocidade na entrada do
sistema (esquerda)

```

IMPLICIT NONE

! Declaração de parâmetros de entrada e saída

```
INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
REAL, INTENT(IN) :: uxent
REAL, INTENT(IN) :: uyent
REAL, INTENT(IN) :: cv
REAL, INTENT(IN) :: rhoent1
REAL, INTENT(IN) :: rhoent2
REAL, INTENT(IN) :: nos_solidos(ny,nx)
REAL, INTENT(INOUT) :: f1(ny,nx,9)
REAL, INTENT(INOUT) :: f2(ny,nx,9)
REAL, INTENT(INOUT) :: rho1(ny,nx)
REAL, INTENT(INOUT) :: rho2(ny,nx)
REAL, INTENT(INOUT) :: px1(ny,nx)
REAL, INTENT(INOUT) :: py1(ny,nx)
REAL, INTENT(INOUT) :: px2(ny,nx)
REAL, INTENT(INOUT) :: py2(ny,nx)
```

! Declaração de variáveis auxiliares

```
INTEGER :: i
INTEGER :: size
REAL :: ux(ny,1)
REAL :: uy(ny,1)
REAL :: randnum(ny)
```

! Inicialização de ux e uy

```
ux = 0.
uy = 0.
```

! Densidades dos fluidos

```
rho1(:,1) = 0.
rho2(:,1) = 0.
```

```
CALL system_clock(size)
CALL random_seed(size)
CALL RANDOM_NUMBER(randnum)
DO i = 2, ny-1
  IF ( randnum(i) >= cv ) THEN
    rho1(i,1) = rhoent1
    f2(i,1,:) = 0.
  ELSE
    rho2(i,1) = rhoent2
    f1(i,1,:) = 0.
  END IF
END DO
```

! Cálculo das distribuições

```
WHERE ( nos_solidos(:,1) == 0 )
  ux(:,1) = uxent
  px1(:,1) = ux(:,1) * rho1(:,1)
  px2(:,1) = ux(:,1) * rho2(:,1)
  uy(:,1) = uyent
  py1(:,1) = uy(:,1) * rho1(:,1)
  py2(:,1) = uy(:,1) * rho2(:,1)
  f1(:,1,2) = f1(:,1,4) + 2. * px1(:,1) / 3.
  f1(:,1,6) = f1(:,1,8) + px1(:,1) / 6. + py1(:,1) / 2. + (f1(:,1,5) - f1(:,1,3)) / 2.
  f1(:,1,9) = f1(:,1,7) + px1(:,1) / 6. - py1(:,1) / 2. + (f1(:,1,3) - f1(:,1,5)) / 2.
  f2(:,1,2) = f2(:,1,4) + 2. * px2(:,1) / 3.
  f2(:,1,6) = f2(:,1,8) + px2(:,1) / 6. + py2(:,1) / 2. + (f2(:,1,5) - f2(:,1,3)) / 2.
  f2(:,1,9) = f2(:,1,7) + px2(:,1) / 6. - py2(:,1) / 2. + (f2(:,1,3) - f2(:,1,5)) / 2.
END WHERE
```

```
RETURN
END SUBROUTINE
```

---

### A.3.4. Velocidade do Bulk

```
SUBROUTINE ubulk(nx, ny, tau1, tau2, nos_solidos, px1, py1, px2, py2, rho1, rho2, uxbulk, uybulk)
```

```
! Descrição: Subrotina para o cálculo da velocidade do bulk
```

```
IMPLICIT NONE
```

```
! Declaração de parâmetros de entrada e saída
```

```
INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
REAL, INTENT(IN) :: tau1
REAL, INTENT(IN) :: tau2
REAL, INTENT(IN) :: nos_solidos(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: px1(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: py1(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: px2(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: py2(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: rho1(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: rho2(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: uxbulk(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: uybulk(ny,nx)
```

```
! Declaração de variáveis auxiliares
```

```
INTEGER :: k
REAL :: rhotot(ny,nx)
```

```
! Inicialização de uxbulk e uybulk
```

```
uxbulk = 0.
uybulk = 0.
rhotot = 0.
```

```
! Cálculo de uxbulk e uybulk
```

```
WHERE ( nos_solidos == 0 )
  rhotot = rho1 / tau1 + rho2 / tau2
  uxbulk = px1 / tau1 + px2 / tau2
  uybulk = py1 / tau1 + py2 / tau2

  uxbulk = uxbulk / rhotot
  uybulk = uybulk / rhotot
END WHERE
```

```
RETURN
END SUBROUTINE
```

---

### A.3.5. Forças de Interação

```
SUBROUTINE forcas(nx, ny, ex, ey, nos_solidos, rho, G, Gads, Fadsx, Fadsy, Fx, Fy)
```

```
! Descrição: Subrotina para cálculo das forças de interação líquido-líquido e líquido-sólido simultaneamente
```

```
IMPLICIT NONE
```

```
! Declaração de parâmetros de entrada e saída
```

```
INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
INTEGER, INTENT(IN) :: ex(9)
```

```

INTEGER, INTENT(IN) :: ey(9)
REAL, INTENT(IN) :: nos_solidos(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: rho(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: G
REAL, INTENT(IN) :: Gads
REAL, INTENT(OUT) :: Fadsx(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: Fadsy(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: Fx(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: Fy(ny,nx)

! Declaração de variáveis auxiliares

INTEGER :: i, j
INTEGER :: up, down, left, right
REAL :: w(9)
REAL :: a(9)
REAL :: b(9)
REAL :: rhotemp(9)
REAL :: nostemp(9)

! Inicialização das forças

Fx = 0.
Fy = 0.
Fadsx = 0.
Fadsy = 0.

! Definição do vetor de pesos, w

w = (/ 4., 1., 1., 1., 1., 0.25, 0.25, 0.25, 0.25 /)
w = w / 9.

! Definição dos vetores a e b

a = w * ex
b = w * ey

! Cálculo das forças de atração

DO i = 1, ny
  IF ( i > 1 ) THEN
    up = i - 1
  ELSE
    up = ny
  END IF

  IF ( i < ny ) THEN
    down = i + 1
  ELSE
    down = 1
  END IF

  DO j = 1, nx
    IF ( j > 1 ) THEN
      left = j - 1
    ELSE
      left = j
    END IF

    IF ( j < nx ) THEN
      right = j + 1
    ELSE
      right = j
    END IF

    IF ( nos_solidos(i,j) == 0 ) THEN
      rhotemp = (/ rho(i,j), rho(i,right), rho(up,j), rho(i,left), rho(down,j),
rho(up,right), &
rho(up,left), rho(down,left), rho(down,right) /)
      Fx(i,j) = -G * sum(a * rhotemp)
    END IF
  END DO
END DO

```

```

        Fy(i,j) = -G * sum(b * rhotemp)

        nostemp = (/ nos_solidos(i,j), nos_solidos(i,right), nos_solidos(up,j),
nos_solidos(i,left), nos_solidos(down,j), &
        nos_solidos(up,right), nos_solidos(up,left), nos_solidos(down,left),
nos_solidos(down,right) /)
        Fadsx(i,j) = -Gads * sum(a * nostemp)
        Fadsy(i,j) = -Gads * sum(b * nostemp)
    END IF

    END DO
END DO

RETURN
END SUBROUTINE

```

---

### A.3.6. Velocidade de Equilíbrio

```

SUBROUTINE uequilibrio(nx, ny, tau, ga, uxbulk, uybulk, Fx, Fy, Fadsx, Fadsy, uxeq, uyeq)

```

! Descrição: Subrotina para o cálculo da velocidade do bulk

IMPLICIT NONE

! Declaração de parâmetros de entrada e saída

```

INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
REAL, INTENT(IN) :: tau
REAL, INTENT(IN) :: ga
REAL, INTENT(IN) :: uxbulk(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: uybulk(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: Fx(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: Fy(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: Fadsx(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: Fadsy(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: uxeq(ny,nx)
REAL, INTENT(OUT) :: uyeq(ny,nx)

```

! Cálculo de uxeq e uyeq

```

uxeq = uxbulk + tau * Fx + tau * Fadsx
uyeq = uybulk + tau * Fy + tau * Fadsy + tau * ga

```

```

RETURN
END SUBROUTINE

```

---

### A.3.7. Colisão

```

SUBROUTINE colisao(nx, ny, tau, nos_solidos, feq, f)

```

! Descrição: Subrotina para a etapa de colisão do método Lattice Boltzmann

IMPLICIT NONE

! Declaração de parâmetros de entrada e saída

```

INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
REAL, INTENT(IN) :: tau
REAL, INTENT(IN) :: nos_solidos(ny,nx)
REAL, INTENT(IN) :: feq(ny,nx,9)
REAL, INTENT(INOUT) :: f(ny,nx,9)

```

! Declaração de variáveis auxiliares

```

INTEGER :: k

```

```

REAL :: ftemp(ny,nx,9)

! Atualização da distribuição de velocidades pela colisão

DO k = 1, 9
  WHERE ( nos_solidos == 0 )
    ftemp(:, :, k) = f(:, :, k) - (f(:, :, k) - feq(:, :, k)) / tau
  ELSEWHERE
    ftemp(:, :, k) = 0
  END WHERE
END DO

f = ftemp

RETURN
END SUBROUTINE

```

---

### A.3.8. Propagação

```

SUBROUTINE propagacao(nx, ny, nos_solidos, f)

! Descrição: Subrotina para a etapa de propagação do método Lattice Boltzmann

IMPLICIT NONE

! Declaração de parâmetros de entrada e saída

INTEGER, INTENT(IN) :: nx
INTEGER, INTENT(IN) :: ny
REAL, INTENT(IN) :: nos_solidos(ny,nx)
REAL, INTENT(INOUT) :: f(ny,nx,9)

! Declaração de variáveis auxiliares

INTEGER :: i, j
INTEGER :: up, down, left, right
REAL :: ftemp(ny,nx,9)

! Inicialização de ftemp

ftemp = 0.

! Propagação das distribuições

DO i = 1, ny
  IF ( i > 1 ) THEN
    up = i - 1
  ELSE
    up = ny
  END IF

  IF ( i < ny ) THEN
    down = i + 1
  ELSE
    down = 1
  END IF

  DO j = 1, nx
    IF ( j > 1 ) THEN
      left = j - 1
    ELSE
      left = nx
    END IF

    IF ( j < nx ) THEN
      right = j + 1
    ELSE
      right = 1
    END IF
  END DO
END DO

```

```
END IF

IF ( nos_solidos(i,j) == 0 ) THEN
  ftemp(i,j,1) = f(i,j,1)
  ftemp(i,right,2) = f(i,j,2)
  ftemp(up,j,3) = f(i,j,3)
  ftemp(i,left,4) = f(i,j,4)
  ftemp(down,j,5) = f(i,j,5)
  ftemp(up,right,6) = f(i,j,6)
  ftemp(up,left,7) = f(i,j,7)
  ftemp(down,left,8) = f(i,j,8)
  ftemp(down,right,9) = f(i,j,9)

ELSE
  ftemp(i,right,2) = f(i,right,4)
  ftemp(up,j,3) = f(up,j,5)
  ftemp(i,left,4) = f(i,left,2)
  ftemp(down,j,5) = f(down,j,3)
  ftemp(up,right,6) = f(up,right,8)
  ftemp(up,left,7) = f(up,left,9)
  ftemp(down,left,8) = f(down,left,6)
  ftemp(down,right,9) = f(down,right,7)

END IF

END DO
END DO

f = ftemp

RETURN
END SUBROUTINE
```

---

## Apêndice B – Código em MATLAB®

O código a seguir foi utilizado para a geração automática e sequencial de imagens no formato PNG. Estas imagens foram utilizadas para montar animações dos processos simulados.

---

```
files = dir('*.dat');
[~,idx] = sort([files.datenum]);
load limrho2.txt;

for i=1:length(files)
    eval(['load ' files(idx(i)).name ' -ascii']);
    name = eval(strrep(files(idx(i)).name, '.dat', ''));
    imagesc(name)
    colorbar('south')
    axis equal off
    drawnow
    filename = sprintf('densidade%d.png',25*i);
    saveas(gcf,filename,'png')
end
```

---