



MODELO DE DUAS ESCALAS PARA ESTUDO NUMÉRICO DA
ACIDIFICAÇÃO EM MEIOS POROSOS CONSIDERANDO ÁCIDOS COM
COMPORTAMENTO REOLÓGICO COMPLEXO

Allan Barbosa Geoffroy Motta

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Roney Leon Thompson

Rio de Janeiro
Dezembro de 2022

MODELO DE DUAS ESCALAS PARA ESTUDO NUMÉRICO DA
ACIDIFICAÇÃO EM MEIOS POROSOS CONSIDERANDO ÁCIDOS COM
COMPORTAMENTO REOLÓGICO COMPLEXO

Allan Barbosa Geoffroy Motta

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO
LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Orientador: Roney Leon Thompson

Aprovada por: Prof. Roney Leon Thompson

Prof. Daniel Onofre de Almeida Cruz

Prof. Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva

Prof. Paulo Couto

Prof. Edson José Soares

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
DEZEMBRO DE 2022

Motta, Allan Barbosa Geoffroy

Modelo de duas escalas para estudo numérico da acidificação em meios porosos considerando ácidos com comportamento reológico complexo/Allan Barbosa Geoffroy Motta. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2022.

XX, 187 p.: il.; 29, 7cm.

Orientador: Roney Leon Thompson

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Mecânica, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 155 – 159.

1. meio poroso. 2. reologia. 3. acidificação. I. Thompson, Roney Leon. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer primeiramente à minha família, que me forneceu apoio e condições para prosseguir na pós-graduação.

Agradeço muito ao meu orientador, Professor Roney Leon Thompson, por toda paciência, atenção, ensinamento, aulas e todas as contribuições, que foram essenciais, no mestrado e doutorado.

Agradeço o apoio da Wikki, pelo treinamento em OpenFOAM, pelo fornecimento da versão inicial da *solver* e pelo suporte no desenvolvimento e implementação do código.

Agradeço à Petrobras pelo suporte financeiro do projeto 4600563074, pelas sugestões e pelo direcionamento da pesquisa, amplamente motivada pela aplicação prática da técnica de acidificação de reservatórios.

Agradeço ao CNPQ pelo apoio financeiro, a UFRJ, COPPE e o Programa de Engenharia Mecânica pelo curso e infraestrutura.

E a Deus.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

MODELO DE DUAS ESCALAS PARA ESTUDO NUMÉRICO DA
ACIDIFICAÇÃO EM MEIOS POROSOS CONSIDERANDO ÁCIDOS COM
COMPORTAMENTO REOLÓGICO COMPLEXO

Allan Barbosa Geoffroy Motta

Dezembro/2022

Orientador: Roney Leon Thompson

Programa: Engenharia Mecânica

Este trabalho tem por objetivo elaborar um modelo de duas escalas para estudar o escoamento de um fluido não newtoniano reativo em meio poroso. O modelo é capaz de fornecer previsões qualitativas em escala de Darcy, de padrões de dissolução e de variáveis de interesse, como o *pore volume to breakthrough*. O fechamento do modelo é feito com informações provenientes da menor escala, a escala de poro. O sistema de equações proposto é baseado na Teoria Contínua de Mistura e outros modelos contínuos presentes na literatura. O termo de interação é modelado da maneira clássica analítica mas também de maneira numérica, permitindo que diferentes geometrias idealizadas de poro tenham impacto no resultado da escala de Darcy, além de permitir o relaxamento de outras hipóteses restritivas necessárias para a metodologia de obtenção do termo de interação analítico. Também é proposto um modelo para contabilizar o efeito de variação local da viscosidade devido a mudança no pH, que é um fenômeno presente em ácidos viscoelásticos aplicados na técnica de acidificação de matrizes e que permitem que o fluido trate regiões menos propensas, de menor permeabilidade. O modelo proposto foi implementado através de um *solver* no software de código aberto OpenFOAM. Simulações foram realizadas considerando o termo de interação analítico para um fluido *power-law* e resultados preliminares foram gerados para analisar a influência do índice *power-law* e do modelo de pH, para diferentes números de Damköhler. A partir desses resultados, foi possível observar o impacto expressivo do modelo reológico nos resultados. Ainda, foram gerados resultados em escala de poro que indicam forte impacto da geometria de poro na análise do problema e estes resultados são aplicados nas simulações em escala de Darcy e seus efeitos são analisados.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

TWO-SCALE MODEL FOR NUMERICAL STUDY OF ACIDIZING PROCESS
IN POROUS MEDIA CONSIDERING ACIDS WITH COMPLEX
RHEOLOGICAL BEHAVIOR

Allan Barbosa Geoffroy Motta

December/2022

Advisor: Roney Leon Thompson

Department: Mechanical Engineering

This work aims to develop a two-scale model to study the flow of a reactive non-Newtonian fluid in a porous medium. The model is able to provide qualitative predictions on a Darcy scale, dissolution patterns and variables of interest, such as pore volume to breakthrough. The model closure uses information from the smallest scale, the pore scale. The proposed system of equations is based on the Continuum Mixture Theory and other continuous models present in the literature. The interaction term is modeled in the classic analytical way but also numerically, allowing different idealized pore geometries to have an impact on the result of the Darcy scale, in addition to allowing the relaxation of other restrictive hypotheses necessary for the methodology to obtain the analytical term of interaction. A model is also proposed to account for the effect of local variation in viscosity due to the change in pH, which is a phenomenon present in viscoelastic acids applied in the matrix acidification technique and that allow the fluid to treat less prone regions, with less permeability. The proposed model was implemented using a solver in the open source software OpenFOAM. Simulations were performed considering the analytical interaction term for a power-law fluid and preliminary results were generated to analyze the influence of the power-law index and the pH model, for different Damköhler numbers. From these results, it was possible to observe the expressive impact of the rheological model on the results. Also, pore scale results were generated and indicate a strong impact of pore geometry in the analysis of the problem and these results are applied in Darcy scale simulations and their effects are analyzed.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xv
Lista de Símbolos	xvi
1 Introdução	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivos	2
2 Revisão Bibliográfica	3
2.1 Estimulação de Reservatórios Petrolíferos	3
2.2 Acidificação de Reservatórios Porosos com Fluidos Não Newtonianos .	7
3 Análise Teórica	10
3.1 Teoria de Média Volumétrica	10
3.1.1 Fundamentos da Teoria de Média	10
3.1.2 Equações de transporte médias	16
3.1.3 Fluido Newtoniano Generalizado	19
3.1.4 Fluido Viscoelástico	22
3.2 Teoria de Mistura	27
3.2.1 Fundamentos da Teoria de Mistura	27
3.2.2 Teoria Constitutiva para Fluido Newtoniano	34
3.2.3 Teoria Constitutiva para Fluidos Não-Newtonianos	37
4 Metodologia	41
4.1 Modelagem Matemática	41
4.1.1 Conservação de Massa	41
4.1.2 Balanço de Quantidade de Movimento Linear	42
4.1.3 Balanço de Espécies	42
4.2 Acoplamento entre Escalas	43
4.2.1 Escalas do Problema	43

4.2.2	Termo de Interação	44
4.2.3	Idealização da Geometria de Poro	46
4.2.4	Relações entre Propriedades e Estrutura do Meio Poroso	50
4.2.5	Coeficiente de Transferência de Massa	52
4.2.6	Coeficientes de Dispersão	52
4.2.7	Permeabilidade e Permeabilidade Modificada	53
4.3	Modelo na Forma Adimensional para um Fluido <i>Power-Law</i>	59
4.3.1	Variáveis e Equações Adimensionais	59
4.3.2	Condições de Contorno	63
4.4	Influência do pH no Comportamento do Fluido	63
4.4.1	Influência do pH na Viscosidade	63
4.4.2	Concentração em função do pH	64
4.5	Modelo de Fluido Carreau	65
4.6	Volume Elementar Representativo com Distribuição de Poros	66
4.6.1	Mobilidade para REV com Distribuição de Poros	67
4.6.2	Caso Carreau	70
4.6.3	Viscosidade aparente e taxa de deformação	71
4.6.4	Modelo Herschel-Bulkley	71
4.6.5	Modelo com Distribuição de Poros e Extensionalidade	78
4.7	Escoamento Reativo de Fluidos Viscoelásticos em Plug	80
4.8	OpenFOAM	81
4.8.1	O <i>software</i> OpenFOAM	81
4.8.2	Estrutura do <i>solver</i> utilizado	82
5	Resultados	85
5.1	Simulações em Escala de Poro	85
5.1.1	Validação Numérica	85
5.1.2	Casos para Base de Dados	91
5.2	Simulações em Escala de Darcy	105
5.2.1	Condições Iniciais e de Contorno	105
5.2.2	Padrões de Dissolução	106
5.2.3	Curvas de PVbt	113
5.2.4	Curvas de Pressão	115
5.2.5	Validação do Banco de Dados	116
5.2.6	Casos Carreau em Plug	120
5.2.7	Casos Giesekus em Plug	133
5.2.8	Volume Elementar Representativo com Distribuição de Poros	138

6	Considerações Finais	152
6.1	Conclusões	152
6.2	Sugestões para Trabalhos Futuros	154
	Referências Bibliográficas	155
A	Desenvolvimentos Complementares	160
A.1	O problema do fechamento da Teoria de Média Volumétrica	160
A.2	Promediação da Equação Constitutiva para Modelo Oldroyd-B	168
A.3	Teoria Constitutiva - Taxa de Dissipação	171
A.4	Caso Cartesiano com Distribuição de Poros	177
A.5	Modelo Bingham com Distribuição de Poros	182

Lista de Figuras

2.1	Diferentes formas de wormholes em rochas carbonáticas a taxas a) baixas, b) médias e c) altas de injeção de ácido. Imagens obtidas com tomografia computadorizada de alta resolução [1].	4
2.2	Viscosidade aparente em função da taxa de cisalhamento para fluido com 15% HCl e 4 vol% surfactante. Adaptado de [2].	9
2.3	Exemplo de Curva $PVbt \times 1/Da$	9
3.1	Domínio macroscópico e o volume elementar referencial (REV). Adaptado de [3].	11
3.2	Escoamento em um meio poroso rígido. Adaptado [3].	12
3.3	Idealização do Meio Poroso [4]	35
3.4	Segunda idealização para o meio poroso.	38
3.5	Proporções da segunda idealização do meio poroso [5].	39
4.1	As diferentes escalas do problema [6].	43
4.2	Microtomografia de uma rocha carbonática com porosidade média de 0,213. O espaço vazio está representado em branco [7].	44
4.3	Geometria convergente-divergente e seus parâmetros.	46
4.4	Comparação entre geometrias de poro: cilíndrico e convergente-divergente com $\delta = 0.2$	50
4.5	Efeito dos níveis de extensionalidade na geometria de poro.	51
4.6	Visão frontal e lateral do volume elementar representativo.	53
4.7	Visão frontal e lateral do volume elementar representativo.	57
4.8	Curvas de viscosidade para modelo de Carreau e diferentes valores de n . $\eta_0 = 10^{-5} Pa.s$, $\eta_\infty = 10^{-6} Pa.s$, $\lambda = 0.2s$	65
4.9	REV com distribuição não-uniforme de raio de poros.	67
5.1	Três tipos de malhas empregadas nas simulações. (a) completa; (b) axissimétrica sem extensão; (c) axissimétrica convergente-divergente.	86
5.2	Convergência da força para o caso das malhas axissimétricas em geometria cilíndrica. Casos newtonianos.	88

5.3	Convergência da força para o caso das malhas completas em geometria cilíndrica. Casos newtonianos.	89
5.4	Convergência da força para o caso das malhas axissimétrica em geometria cilíndrica. Casos <i>power-law</i>	90
5.5	Convergência da força para o caso da malha completa em geometria cilíndrica. Caso <i>power-law</i>	90
5.6	Convergência de malha para a força adimensional. Casos Carreau. $Re = 1$	91
5.7	Força adimensional viscosa para caso newtoniano com raio de poro de $1\mu m$	92
5.8	Força adimensional viscosa para caso $n = 0.5$ com raio de poro de $1\mu m$	93
5.9	Campo de velocidade para o caso <i>shear-thinning</i> ($n=0.50$), raio de poro de $1\mu m$, grau de extensionalidade de 0.8 e número de Reynolds de 0.01.	93
5.10	Linhas de corrente para o caso <i>shear-thinning</i> ($n=0.50$), raio de poro de $10\mu m$, grau de extensionalidade de 0.4 e número de Reynolds de 0.01.	94
5.11	Campo de pressão para o caso <i>shear-thinning</i> ($n=0.50$), raio de poro de $10\mu m$, grau de extensionalidade de 0.4 e número de Reynolds de 0.01.	94
5.12	Força adimensional viscosa para caso $n = 1.2$ com raio de poro de $1\mu m$	95
5.13	Campo de viscosidade cinemática para o caso <i>shear-thickening</i> ($n=1.20$), raio de poro de $1\mu m$, grau de extensionalidade de 0.6 e número de Reynolds de 1.	95
5.14	Taxa de deformação para caso $n = 1.2$ com raio de poro de $1\mu m$, $\delta = 0.8$ e $Re = 0.01$	96
5.15	Curvas de viscosidade e comportamento dos parâmetros para os fluidos Carreau analisados.	97
5.16	Casos Carreau com $n = 0.5$. $Re = 1$	98
5.17	Força adimensional para casos Carreau com $n = 0.50$ e $n = 0.80$. . .	98
5.18	Forças adimensionais para fluido Carreau. Geometria de poro convergente-divergente com $\delta = 0.0, 0.4$ e 0.8	99
5.19	Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.0$	100
5.20	Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.2$	101
5.21	Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.4$	101
5.22	Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.6$	102
5.23	Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.8$	102

5.24	Força adimensional em função de Wi para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.15$	103
5.25	Força adimensional em função de Re para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.15$	103
5.26	Força adimensional em função de Wi para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.30$	104
5.27	Força adimensional em função de Re para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.30$	104
5.28	Campo de porosidade inicial para todos os casos avaliados.	105
5.29	Distribuição inicial do inverso da permeabilidade para todos os casos avaliados.	106
5.30	Malha usada nas simulações e as dimensões do domínio, em metros. .	106
5.31	Perfis de porosidade para casos newtoniano e <i>power-law</i> com $Da = 10$. Figura a: tempo de breakthrough em 1100 s; b: 1100 s; c: 1300 s; d: 1300 s; e: 1600 s; f: 1400 s.	107
5.32	Perfis de porosidade para casos newtoniano e <i>power-law</i> com $Da = 50$. Figura a: tempo de breakthrough em 2600 s; b: 3000 s; c: 3900 s; d: 4500 s; e: 4200 s; f: 4800 s.	108
5.33	Evolução de campo de pH para o caso com $Da = 50$ e $n = 1.50$. Em a: Tempo simulado de 600 s; b: 1700 s; c: 3600 s; d: 4800 s.	109
5.34	Perfis de porosidade para casos newtoniano e <i>power-law</i> com $Da =$ 100. Figura a: tempo de breakthrough em 4300 s; b: 7200 s; c: 6300 s; d: 8300 s; e: 7300 s; f: 9100 s.	110
5.35	Evolução de concentração para o caso com $Da = 100$ e $n = 0.50$. Em a: Tempo simulado de 1000 s; b: 2200 s; c: 3200 s; d: 4300 s.	111
5.36	Perfis de porosidade para casos newtoniano e <i>power-law</i> com $Da =$ 1000. Figura a: tempo de breakthrough em 56500 s; b: 84000 s; c: 89000 s; d: 100500 s; e: 99000 s; f: 115500 s.	112
5.37	Curvas de PVbt para os casos sem influência do pH.	114
5.38	Curvas de PVbt para casos com e sem influência do pH.	114
5.39	Curvas de pressão para casos <i>shear-thinning</i> e <i>shear-thickening</i> . . .	115
5.40	Comparação da permeabilidade para casos newtonianos.	117
5.41	Comparação do campo de velocidade para casos newtonianos.	117
5.42	Comparação da permeabilidade para casos <i>shear-thinning</i> com $n = 0.5$.	118
5.43	Comparação do campo de velocidade para casos <i>shear-thinning</i> com $n = 0.5$	118
5.44	Comparação da permeabilidade para casos <i>shear-thickening</i> com $n =$ 1.2.	119
5.45	Comparação do campo de velocidade para casos <i>shear-thickening</i> com $n = 1.2$	119
5.46	Perfis de porosidade para os casos com $Da = 1$	121
5.47	Perfis de porosidade para os casos com $Da = 10$	122
5.48	Perfis de porosidade para os casos com $Da = 50$	123

5.49	Perfis de porosidade para os casos com $Da = 100$	124
5.50	Perfis de porosidade para os casos com $Da = 1000$	125
5.51	Perfis de porosidade para os casos com $Da = 10000$	126
5.52	Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 10$	128
5.53	Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 50$	129
5.54	Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 100$	130
5.55	Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 1000$	131
5.56	Curvas de PVbt para casos de poro com geometria cilíndrica.	132
5.57	Queda de pressão adimensional ao longo do tempo para fluidos Carreau e newtoniano com três níveis de extensão. Casos com $Da = 10$ e $Da = 100$. <i>Probe</i> posicionada no centro do <i>plug</i>	133
5.58	Perfis de porosidade no <i>breakthrough</i> para casos com $Da = 10$	134
5.59	Perfis de porosidade no <i>breakthrough</i> para casos com $Da = 50$	135
5.60	Perfis de porosidade no <i>breakthrough</i> para casos com $Da = 100$	136
5.61	Perfis de porosidade no <i>breakthrough</i> para casos com $Da = 1000$	137
5.62	Curvas de PVBt para os casos newtonianos e Giesekus.	138
5.63	Curvas de viscosidade para casos Carreau e <i>power-Law</i>	138
5.64	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional.	139
5.65	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional adimensional.	140
5.66	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional com outra distribuição inicial de porosidade ($\bar{\varepsilon} = 0.1$).	140
5.67	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão adimensional com outra distribuição inicial de porosidade ($\bar{\varepsilon} = 0.1$).	141
5.68	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.02$).	141
5.69	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão adimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.02$).	142
5.70	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.001$).	142
5.71	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão adimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.001$).	143
5.72	Comparação da queda de pressão dimensional para diferentes valores de raio de poro médio.	143

5.73	Comparação da queda de pressão adimensional para diferentes valores de raio de poro médio.	144
5.74	Razão de mobilidade para casos $R_1 \sigma_1$	144
5.75	Razão de mobilidade para casos $R_1 \sigma_2$	145
5.76	Razão de mobilidades para casos com distribuição uniforme e R_1 . . .	145
5.77	Viscosidade aparente versus taxa de deformação aparente para casos <i>power-law</i> com $n = 0.5$ para diferentes distribuições normais e a comparação com a viscosidade original do modelo. (a) Taxa de deformação característica obtida usando a expressão para raio de poro representativo. (b) Correção da taxa de deformação característica levando a distribuição em consideração.	147
5.78	Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão.	148
5.79	Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão. Casos <i>power-law</i> . .	149
5.80	Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão adimensional. Casos <i>power-law</i>	150
5.81	Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão. Casos Carreau. . .	150
5.82	Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão adimensional. Casos Carreau.	151
A.1	O problema microscópico. Adaptado de [3].	161
A.2	Visão frontal e lateral do REV idealizado por um poro representativo constituído de placas planas paralelas.	177
A.3	Volume elementar representativo com uma distribuição não-uniforme de poros idealizados por placas paralelas.	178

Lista de Tabelas

5.1	Malhas para os casos de validação cilíndricos.	87
5.2	Condições de contorno para os casos de validação cilíndricos.	87
5.3	Comparação entre os dados obtidos numericamente com os dados analíticos.	87
5.4	Comparação entre os dados obtidos numericamente com os dados analíticos.	88
5.5	Parâmetros considerados para as simulações em escala de poro.	92
5.6	Condições iniciais e de contorno para todos os casos.	105
5.7	Valores do índice <i>power-law</i> e números de Damköhler analisados.	113
5.8	Tempos de <i>breakthrough</i> para os casos Carreau e newtoniano.	127
5.9	Fatores para os diferentes casos com distribuição.	147

Lista de Símbolos

S	Superfície do volume elementar representativo, p. 15
\mathbf{p}	Vetor posição em relação ao referencial do centróide , p. 16
$(\)^*$	Índice que denota a variável na forma adimensional, p. 69
C_0	Concentração na entrada do domínio, p. 69
C_f	Concentração de Mistura, p. 61
C_i	Concentração do constituinte i , p. 61
C_s	Concentração de ácido na interface sólido-fluido, p. 68
D_m	Difusividade molecular, p. 67
D_{eT}	Coefficiente de dispersão transversal, p. 67
D_{eX}	Coefficiente de dispersão longitudinal, p. 67
E_c	Parcela de energia transferida devido ao contato, p. 43
E_e	Parcela de energia transferida de fonte externa, p. 43
E_m	Parcela de energia transferida mutuamente, p. 43
Fr	Número de Froude, p. 71
H	Altura da garganta do canal convergente-divergente, p. 64
K_0	Permeabilidade inicial, p. 66
L	Comprimento característico do problema, p. 11
N_m	Número de interação, p. 71
N_{ac_b}	Número de capacidade do ácido modificado, p. 70
N_{ac}	Número de capacidade do ácido, p. 70

Pe_p	Número de Péclet no poro, p. 67
Q_e	Interação calor proveniente do meio externo, p. 44
R	Raio do canal, p. 57
$R(C_s)$	Taxa de reação, p. 68
Re_{sf}	Raio da esfera delimitadora do canal convergente-divergente, p. 64
Re	Número de Reynolds, p. 71
Re_p	Número de Reynolds no poro, p. 67
S_0	Área superficial específica, p. 65
Sc	Número de Schmidt, p. 67
Sh	Número de Sherwood, p. 67
Sh_∞	Número de Sherwood assintótico, p. 67
Δ	Espaço entre placas planas, p. 48
Φ	Potencial gravitacional, p. 28
Φ^2	Módulo de Thiele, p. 71
α	Poder de dissolução de ácido, p. 68
α_T	Difusividade térmica, p. 73
α_{os}	Constante para o modelo de dispersão, p. 67
β	Fase fluida, p. 12
γ_i	Vetor fluxo de concentração, p. 61
τ	Parte deviatórica do tensor das tensões, p. 29
δ	Espessura de uma placa plana, p. 48
δ_e	Grau de extensionalidade, p. 65
$\dot{\gamma}$	Taxa de deformação, p. 29
$\dot{\gamma}_c$	Taxa de deformação característica, p. 69
$\dot{\epsilon}$	Taxa de alongação, p. 63

ℓ_β	Menor escala do meio poroso, p. 11
η_0	Soma de viscosidade do polímero e do solvente, p. 35
η_0	Viscosidade base, p. 73
η_c	Viscosidade característica, p. 69
η_e	Viscosidade extensional, p. 63
η_m	Máximo incremento na viscosidade, p. 73
λ_1	Tempo de relaxação, p. 35
λ_2	Tempo de retardo, p. 35
λ_T	Coefficiente transversal do modelo de dispersão, p. 67
λ_X	Coefficiente longitudinal do modelo de dispersão, p. 67
$\langle \rangle$	Operador Média Volumétrica, p. 12
D	Tensor taxa de deformação, p. 29
D_e	Tensor dispersão, p. 67
I	Tensor identidade, p. 19
K	Tensor permeabilidade, p. 25
M	Mapeamento de fechamento, p. 22
T	Tensor das tensões de Cauchy, p. 27
j_i	Velocidade de transferência de massa entre constituintes, p. 42
m_i	Termo fonte de interação entre constituintes, p. 42
n	Vetor normal à superfície, p. 14
o	Vetor fluxo de entropia, p. 45
q	Vetor fluxo de calor, p. 44
r	Vetor posição de referência, p. 42
s(n)	Vetor tração, p. 41
v	Velocidade, p. 19

\mathbf{w}	Velocidade da superfície, p. 14
μ	Viscosidade, p. 19
\overline{K}	Permeabilidade modificada, p. 66
$\left(\begin{smallmatrix} \nabla \end{smallmatrix} \right)$	Operador derivada convectada superior, p. 30
ϕ	Propriedade física genérica, p. 13
ψ_i	Termo de transferência de energia entre constituintes, p. 45
ρ	Massa específica, p. 19
σ	Fase sólida, p. 12
θ	Temperatura, p. 50
ε	Porosidade volumétrica, p. 14
\mathcal{V}	Volume elementar representativo, p. 12
ξ	Dissipação de energia, p. 50
a	Parâmetro do modelo de pH, p. 73
a_0	Área interfacial inicial disponível para reação, p. 66
a_i	Potencial de Helmholtz, p. 50
a_v	Área interfacial disponível para reação, p. 66
d_i	Termo fonte de massa, p. 40
e	Energia, p. 44
g_0	Aceleração gravitacional de referência, p. 69
h	Fluxo de calor, p. 44
h_i	Termo fonte de transferência de espécies, p. 61
k	Índice de consistência <i>power-law</i> , p. 54
k_c	Coeficiente de transferência de massa, p. 67
k_e	Constante experimental de Carman-Kozeny, p. 65
k_s	Constante de taxa de reação superficial, p. 68

k_{p1}	Constante de proporcionalidade do modelo de pH, p. 73
k_{p2}	Constante de ajuste do modelo de pH, p. 73
l	Comprimento de poro, p. 64
n	Índice de comportamento do fluido <i>power-law</i> , p. 54
o_e	Interação de entropia a distância, p. 45
p	Pressão, p. 19
pH	pH do ácido, p. 73
pH_m	pH que corresponde à viscosidade máxima, p. 73
p_e	Pressão na saída do domínio, p. 69
r_0	Raio de poro inicial, p. 66
r_e	Raio da entrada do canal convergente-divergente, p. 64
r_p	Raio de poro, p. 66
r_r	Tamanho do volume elementar representativo, p. 11
s	Entropia, p. 45
t_m	Tempo de relaxação característico, p. 30
u	Energia interna, p. 45
v_0	Velocidade na entrada do domínio, p. 69
Da	Número de Damköhler, p. 9
PVbt	<i>Pore volume to breakthrough</i> , p. 9
t	Tempo, p. 14

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

A estimulação de poços é um objeto de estudo de grande importância na indústria petrolífera. Tendo em vista que o petróleo é um recurso natural não renovável, há uma perspectiva de declínio da produção mundial ao longo do tempo. Tamanho interesse se deve ao fato de que o petróleo é uma fonte de energia primária, utilizada em ampla escala e que a descoberta de novos reservatórios é um evento cada vez mais raro. Sendo assim, existe a necessidade de que as reservas já existentes sejam melhor exploradas.

O tratamento de reservatórios carbonáticos utilizando ácidos é uma técnica muito praticada para estimular a produção de petróleo e gás natural. O objetivo primário deste processo é aumentar a taxa de produção aumentando a permeabilidade do meio. O ácido injetado dissolve o material e cria canais, facilitando o escoamento. Diversos padrões de dissolução podem ser formados, o que depende de vários de fatores, como por exemplo: a taxa de injeção do ácido, tipo de ácido, características de formação da rocha. É desejável que se tenha um padrão que ofereça o maior nível de permeabilidade aliado a menor quantidade de ácido utilizada.

O ácido comumente usado para este fim é o ácido clorídrico, por ser de baixo custo e ter uma alta taxa de reação. Muitos ácidos alternativos ao HCl apresentam comportamento não newtoniano, como efeitos de variação da viscosidade com a taxa de deformação, temperatura, pH e também viscoelasticidade. Existem diversos modelos para fluidos que não atendem à hipótese não newtoniana.

Além de muitos fluidos práticos usados em acidificação serem não-newtonianos, em algumas aplicações o uso de ácidos não-newtonianos é desejável. Em casos de reservatórios com alta heterogeneidade, onde há grande variação da permeabilidade, o escoamento do ácido geralmente apresenta uma trajetória preferencial nos caminhos de maior permeabilidade, o que leva um estímulo maior em regiões de maior

permeabilidade e o oposto em regiões de menor permeabilidade. Uma das possíveis soluções é utilizar um ácido conhecido como *self-diverting*, em que o processo de reação química faz com que o fluido sofra um aumento local e temporário em sua viscosidade, criando uma barreira que faz com que o escoamento desvie para regiões menos propensas.

1.2 Objetivos

O presente trabalho possui os objetivos de: Explorar as teorias existentes que se aplicam ao problema do escoamento de um fluido reativo em meio poroso com reologia complexa; Fazer a conexão entre escalas de poro e a escala de Darcy; Desenvolver uma metodologia em que seja possível prever o comportamento do fluido nestas circunstâncias através de simulações computacionais; Realizar as simulações com o auxílio do *software* de código aberto OpenFOAM, o qual se baseia no Método dos Volumes Finitos, fazendo as implementações necessárias; Comparar resultados obtidos com modelos reológicos de fluidos newtonianos generalizados e viscoelásticos com os casos newtonianos equivalentes para entender o impacto da reologia do fluido no problema.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Estimulação de Reservatórios Petrolíferos

Pelo fato de cerca de 50% as reservas mundiais de petróleo e gás estejam armazenadas em rochas carbonáticas, há grande interesse nesse tipo de reservatório [8]. Tais rochas porosas são compostas principalmente por calcários e dolomitas. Uma característica importante de reservatórios carbonáticos é de que estes mantêm a qualidade, do ponto de vista de reservatórios petrolíferos, ou seja, sua porosidade e permeabilidade são mantidas mesmo a altas profundidades.

A redução da produção de um reservatório pode estar associada a uma redução da permeabilidade na região próxima ao poço, devido a incrustações e precipitações. Tal redução é conhecida como “dano”. Existem diversos métodos que buscam recuperar ou aumentar a produção, através da remoção do dano ou da criação de novos canais que permitam o escoamento do fluido. Os mais usuais são: fraturamento hidráulico e acidificação de matriz. Quando o fraturamento é realizado com ácidos, é denominado “fraturamento ácido” [9].

De acordo com Fernandes [10], fraturamento hidráulico é uma operação de estimulação que consiste na injeção de um fluido na rocha reservatório, sob pressão suficientemente alta para exercer na rocha uma tensão maior do que a soma de sua resistência à tração mais a menor tensão confinante, com o objetivo de causar a falha do material, dando início à fratura. A fratura tende a se propagar conforme o fluido continua sendo bombeado e no final do processo, um canal de alta condutividade é criado entre a rocha e o poço, permitindo o aumento da produtividade. No fraturamento hidráulico ácido, além da fratura causada pela pressão do fluido, porções da face da fratura são dissolvidas pela reação com o ácido [11].

A acidificação de matriz consiste em um processo no qual o ácido que é injetado reage com a rocha, tendo como resultado um aumento na permeabilidade através da remoção de material. Ácidos usados comumente incluem o clorídrico, o fórmico

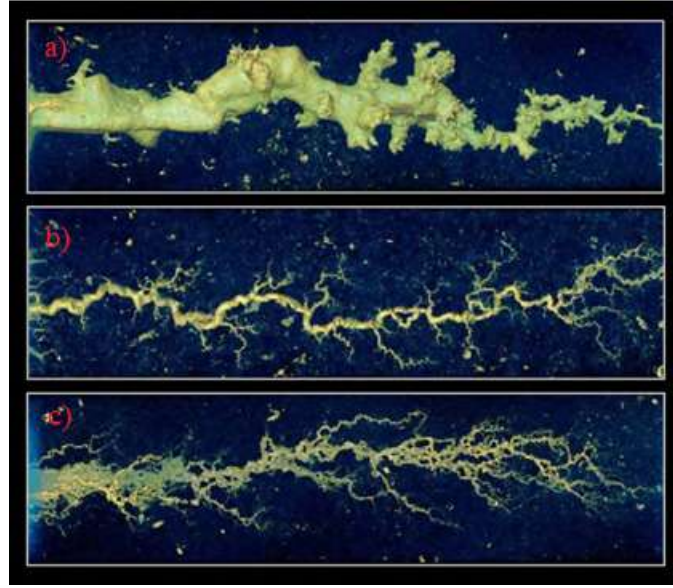


Figura 2.1: Diferentes formas de wormholes em rochas carbonáticas a taxas a) baixas, b) médias e c) altas de injeção de ácido. Imagens obtidas com tomografia computadorizada de alta resolução [1].

e o acético [12]. Ao mesmo tempo em que a dissolução aumenta a permeabilidade, o aumento relativo na permeabilidade para uma dada quantidade de ácido tem uma relação forte com as condições de injeção. A taxas muito baixas, o ácido é consumido assim que entra em contato com o meio, resultando em uma dissolução de face. A profundidade de penetração do ácido é restrita a uma região próxima à do poço. Por outro lado, a altas taxas de injeção, o ácido penetra profundamente na rocha, porém o aumento na permeabilidade não é grande pois o ácido reage numa larga região, levando a uma dissolução uniforme. Entre esses dois casos limítrofes, canais condutivos de alta permeabilidade podem ser formados, conhecidos como *wormholes* [13]. A Figura 2.1 mostra diferentes formas de *wormholes* formados em rochas carbonáticas, a diferentes taxas de injeção de ácido.

A compreensão acerca dos fenômenos que regem a formação e características dos *wormholes* é de grande interesse na indústria do petróleo e por isso, diversos trabalhos foram publicados fazendo uso de modelos com abordagens diferentes para prever seu comportamento. Um modelo simples é o que representa o *wormhole* como um tubo cilíndrico. Em 1997, Buijse e Halliburton [14] utilizaram um modelo de poro cilíndrico para explicar qualitativamente fenômenos observados experimentalmente, como a taxa ótima de injeção.

Outro modelo para estudar o comportamento dos *wormholes* é o modelo de redes, onde o meio poroso é representado como uma rede de tubos interconectados uns aos outros nos nós. O escoamento do ácido no interior dos tubos é descrito pelas equações clássicas de Navier-Stokes. O ácido reage na parede do tubo e a dissolução é contabilizada em termos do aumento no raio do tubo. Esses modelos são

capazes de prever a taxa ótima de dissolução, porém são computacionalmente caros. Em 1989, Daccord, Touboul e Lenormand [15] realizaram um estudo utilizando o modelo de redes para analisar o fenômeno dos *wormholes* e concluíram que simulações numéricas reproduzem quantitativamente os resultados experimentais. Mais tarde, em 1998, Fredd e Fogler [16] analisaram o efeito do transporte e da reação na formação de *wormholes*. Eles investigaram o comportamento de diversos ácidos, em várias condições e utilizaram o modelo de redes, que apresentou concordância qualitativa com resultados experimentais. Também foi possível prever a existência de um número de Damköhler ótimo, o qual é um número adimensional que relaciona a taxa de reação com a taxa de transporte de massa convectivo.

Uma abordagem intermediária entre os modelos citados anteriormente envolve o uso de modelos médios ou contínuos. Esses modelos descrevem a dissolução na escala de Darcy, a qual requer informação dos processos na escala do poro, que são obtidas por um modelo de escala de poro. Obter informações detalhadas dos poros e sua mudança durante a dissolução é difícil, sendo uma das desvantagens do modelo na escala de Darcy. Em 2005, Panga et al. [13] apresentaram um modelo contínuo bidimensional para descrever a formação de *wormholes* em rochas carbonáticas. O modelo acopla fenômenos de reação e transporte à escala de Darcy, através de variáveis de concentração, correlações da estrutura, transferência de massa e coeficiente de dispersão. O modelo foi capaz de prever qualitativamente informações de interesse, como a taxa ótima de injeção. Eles também propuseram um critério qualitativo para prever as condições necessárias para a criação de *wormholes*. Maheshware et al., em 2013 [17] adaptaram o modelo proposto por Panga et. al. [13], que originalmente era bidimensional, para uma simulação tridimensional. Também foi feita uma análise dos efeitos de diversos parâmetros do problema, como:

- Efeito da taxa de injeção do ácido, que exibiu *wormholes* de formatos diferentes entre a dissolução uniforme e de face, tais como: ramificado, dominante e cônico, sendo o dominante o regime de dissolução no qual se enquadra a taxa ótima de injeção correspondente ao menor valor de volume do poro para que haja aumento na permeabilidade média;
- Efeitos da taxa de dissolução, que para um ácido que reage rapidamente, os *wormholes* são mais finos e mais ramificados quando comparados com os ácidos que reagem lentamente;
- Permeabilidade inicial da rocha carbonática – é uma propriedade inerente da rocha, a qual depende de sua formação. Foi observada uma relação inversamente proporcional entre a taxa ótima de injeção do ácido e a permeabilidade inicial;

- Heterogeneidade média, que também depende da formação rochosa. Quanto maior a heterogeneidade, mais ramificações os *wormholes* apresentam. Na ausência de heterogeneidade, o padrão de dissolução se assemelha com a dissolução de face. Além disso, há uma heterogeneidade crítica, onde o volume do poro para que haja aumento na permeabilidade é mínimo.

Igzec, Zhu e Hill [18] realizaram em 2010 um estudo teórico-experimental para analisar efeitos da heterogeneidade na formação de *wormholes* em rochas carbonáticas. Concluíram que a propagação do ácido em rochas heterogêneas é muito mais rápida que em estruturas homogêneas, o que impacta diretamente na formação dos *wormholes*. Adicionalmente, nos meios heterogêneos, o ácido injetado seguiu um caminho preferencial.

Em 2016, Liu et al. [19] simularam a propagação tridimensional de *wormholes* em rochas carbonáticas considerando que as propriedades físicas da rocha variam de acordo com uma correlação espacial para investigar seu efeito em acidificação de matrizes. Quando comparado ao modelo de distribuição uniforme, os *wormholes* formados tiveram forma mais larga e menos ramificada. Além disso, a correlação de caminhos preferenciais do escoamento e da formação de *wormholes* teve boa concordância com resultados experimentais.

Soulaine et al. [20] em 2017 estudaram a formação de *wormholes* a partir de um modelo contínuo na escala de poro. A formulação matemática envolve equações médias baseadas na Teoria de Média Volumétrica. As simulações em escala de poro foram comparadas a um experimento de microfluídica e modelos macroscópicos para a taxa de dissolução são propostos a partir dos modelos na micro escala através de um procedimento de *upscale*. Esta técnica também foi aplicada para prever relações de permeabilidade e porosidade.

O modelo contínuo de duas escalas foi aplicado em 2017 por Liu et al. [21] para casos onde o domínio contém uma fratura. Analisaram diversos arranjos de fraturas explícitas no domínio e verificaram que no caso de fraturas orientadas na direção do escoamento podem dominar a formação dos *wormholes*, enquanto fraturas perpendiculares ao escoamento podem mudar não apenas a orientação dos *wormholes* como também o número de ramificações. A principal conclusão é que a presença de fraturas não altera significativamente a taxa ótima de injeção, apenas os padrões de dissolução. Outros trabalhos recentes também estudaram casos com fraturas presentes no domínio, usando o modelo de duas escalas [22, 23].

2.2 Acidificação de Reservatórios Porosos com Fluidos Não Newtonianos

Durante a acidificação de matriz, o ácido injetado reage com a rocha e forma caminhos de maior permeabilidade, ocorrendo uma tendência de que o ácido siga preferencialmente nesses caminhos, consequentemente, a maior parte do ácido escoará por regiões já tratadas ou com pouco dano, deixando de lado outras zonas de interesse. Portanto, é necessário que o ácido desvie das zonas já tratadas para atacar regiões de baixa permeabilidade. Uma alternativa é o uso de sistemas ácidos ditos *self-diverting*, os quais exibem um comportamento do aumento local da viscosidade com a redução do pH, que resulta da reação do ácido com a rocha. O aumento na viscosidade cria resistência ao escoamento nas zonas de alta permeabilidade, permitindo que o ácido escoe por zonas ainda não tratadas. Porém, alguns estudos sugerem que a penetração do ácido e a forma dos *wormholes* podem ser alterados ao fazer uso desta técnica [24–26].

Em 2001, Chang et al. [26] desenvolveram em laboratório um ácido viscoelástico o qual apresenta aumento na viscosidade conforme a concentração diminui. Diferentemente dos sistemas ácidos baseados em polímeros, o material proposto não deixa resíduos na rocha, que permanece sem traços de resíduos ao final do processo. Além disso, este ácido não contém sólidos, o que evita complicações no bombeamento. Uma limitação é que o sistema admite uma temperatura máxima de $93^{\circ} C$.

Mais tarde, em 2003, Taylor et al. [27] desenvolveram um sistema ácido viscoelástico *self-diverting* aprimorado. O fluido engloba diversas vantagens que o sistema proposto por Chang et al. [26], tendo como principal avanço um limite superior de temperatura, até o qual o ácido se mantém estável, na faixa de $150^{\circ} C$. Outra característica positiva verificada nos experimentos é de que a viscosidade responde rapidamente ao desgaste do ácido durante a dissolução.

Nasr-El-Din et al. realizaram um levantamento em 2006 [2] acerca de experiências obtidas com a aplicação de surfactantes viscoelásticos em acidificação de matriz. Concluíram que os tratamentos apresentam boa taxa de sucesso, mas algumas observações adicionais devem ser feitas:

- Altas cargas e o uso intenso de surfactantes podem causar danos ao poço, particularmente em reservatórios de baixa permeabilidade e esgotados;
- O dano causado por surfactantes viscoelásticos pode ser amenizado usando mutualmente um solvente dissolvido em diesel ou em salmoura;
- Uso elevado de inibidores de corrosão pode causar efeito adverso na performance do surfactante usado;

- Altas concentrações de ferro irão afetar negativamente a performance do surfactante e a adição de um agente redutor não elimina este efeito.

Em 2016, Naizhen e Ming [19] realizaram uma simulação da propagação de *wormholes* utilizando um surfactante viscoelástico *self-diverting*. Eles usaram um modelo contínuo acoplado com a função que descreve a viscosidade e o modelo do reservatório foi desenvolvido. Verificaram que na acidificação convencional, apenas um *wormhole* atravessou o domínio, enquanto o fluido viscoelástico formou um segundo *wormhole* bem desenvolvido. Além disso, a taxa ótima de injeção para o fluido *self-diverting* foi maior quando comparado ao ácido convencional, devido ao efeito de aumento da viscosidade. Outro resultado importante foi que quando o meio era caracterizado por um grande contraste na permeabilidade, a eficiência do ácido viscoelástico era mais limitada.

Ainda no mesmo ano, Maheshwari et al. [28] realizaram simulações numéricas em um domínio tridimensional envolvendo ácido clorídrico mas também ácidos com emulsionantes e gelificantes. Estes conferem ao fluido um comportamento não-newtoniano que foi inserindo em um modelo contínuo de duas escalas clássico baseado na equação de Darcy, através do conceito de viscosidade aparente. Eles avaliaram padrões de dissolução e compararam com dados experimentais. Observaram pelas simulações numéricas que uma menor quantidade de ácido é necessária para atingir o *breakthrough* e *wormholes* mais finos são formados no caso dos ácidos com aditivos, quando comparados com o HCl.

Existem diversos modelos para capturar informações acerca do escoamento de fluidos viscoelásticos. Entretanto, em alguns casos, os fluidos viscoelásticos podem apresentar um comportamento próximo a um fluido lei de potência. Em 2006, Nasr-El-Din et al. [2] observaram que para o fluido viscoelástico estudado com 4 vol% de surfactante, a viscosidade decaí com o aumento na taxa de cisalhamento, apresentando um comportamento *shear-thinning*, conforme mostra a Figura 2.2.

Para os problemas de acidificação de reservatórios, alguns resultados de interesse são apresentados na literatura, como o campo das variáveis obtidas, principalmente o campo de porosidade que permite avaliar o padrão de dissolução. Outro resultado frequentemente analisado, é o *pore volume to breakthrough* [13, 16–18].

De acordo com Fredd e Fogler [16], o *pore volume to breakthrough* é definido como a razão de fluido injetado para alcançar o *breakthrough*, isto é, que o canal atravesse todo o domínio, e o volume de espaço de poros. Fica claro então, a forte dependência de λ e a vazão de entrada.

Um importante número adimensional presente nessas análises é o número de Damköhler (Da), que é a razão entre o tempo convectivo e o tempo de reação, dado por [29]:

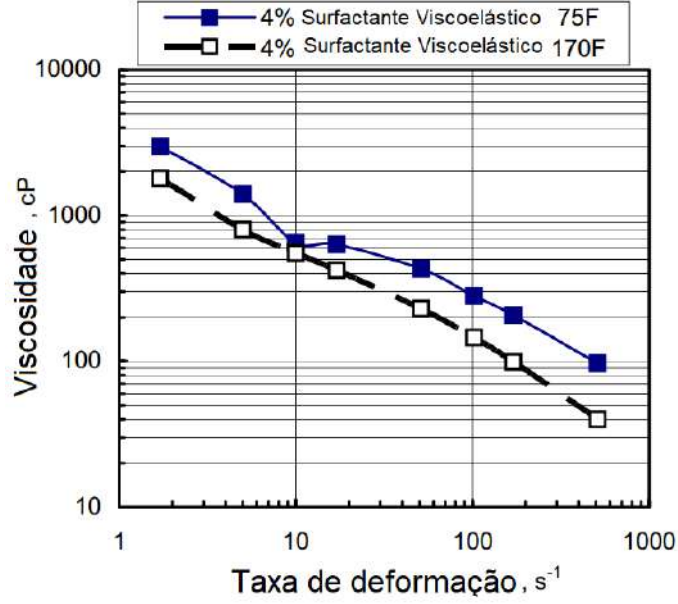


Figura 2.2: Viscosidade aparente em função da taxa de cisalhamento para fluido com 15% HCl e 4 vol% surfactante. Adaptado de [2].

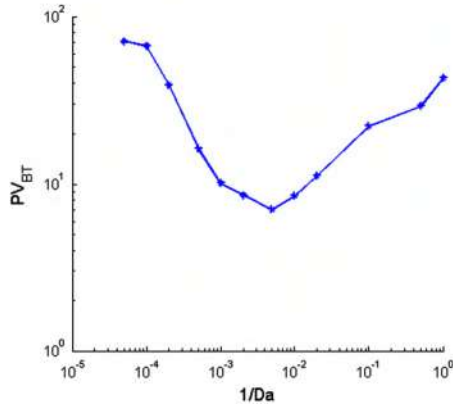


Figura 2.3: Exemplo de Curva $PV_{bt} \times 1/Da$

$$Da = \frac{k_s a_0 L}{u_0} \quad (2.1)$$

Onde k_s é a constante de reação na superfície do poro, a_0 é a área interfacial média inicial por unidade de volume, L é o comprimento característico e u_0 a velocidade de entrada.

A fim de estudar o comportamento de PV_{bt} de acordo com a velocidade de entrada, tipicamente são plotados gráficos de PV_{bt} em função de $1/Da$, com o objetivo de constatar qual o menor valor de PV_{bt}, que está relacionado a um valor de Damköhler ótimo. Ou seja, deseja-se obter o *breakthrough* injetando a menor quantidade possível de fluido. A curva obtida frequentemente é decrescente até o valor ótimo e em seguida volta a crescer, como mostra a Figura 2.3.

Capítulo 3

Análise Teórica

Neste capítulo são analisadas e discutidas duas teorias para a abordagem de problemas multifásicos: Teoria de Média Volumétrica e Teoria de Mistura. As particularidades e semelhanças de cada uma são apresentadas, bem como algumas hipóteses para o problema de um fluido que escoar por um meio poroso.

3.1 Teoria de Média Volumétrica

3.1.1 Fundamentos da Teoria de Média

A Teoria de Média volumétrica é uma teoria desenvolvida para lidar com problemas multifásicos onde a análise do problema apenas em sua menor escala torna a sua solução proibitiva.

Para lidar com este problema, tanto o domínio quanto as equações passam por um processo de homogenização. Ou seja, cria-se um domínio fictício representativo do problema que seja mais simplificado. A teoria de média volumétrica oferece uma abordagem matematicamente rigorosa para tal fim através de um processo de promediação em relação a um volume elementar representativo (REV), cujo comprimento característico é denotado por r_r . Este volume elementar deve conter informação estatística do meio poroso não-homogêneo suficiente para que este consiga representá-lo de maneira macroscópica, isto implica que o comprimento característico do REV deve ser suficientemente maior do que a menor escala do meio poroso, $\ell_\beta \ll r_o$. Logo, pode se concluir que

$$\ell_\beta \ll r_o \ll L \quad (3.1)$$

As equações que descrevem originalmente o escoamento em meios porosos estão associadas ao que acontece nas menores escalas do esqueleto poroso, ℓ_β . Depois do processo de homogenização, onde se aplica o operador média volumétrica em

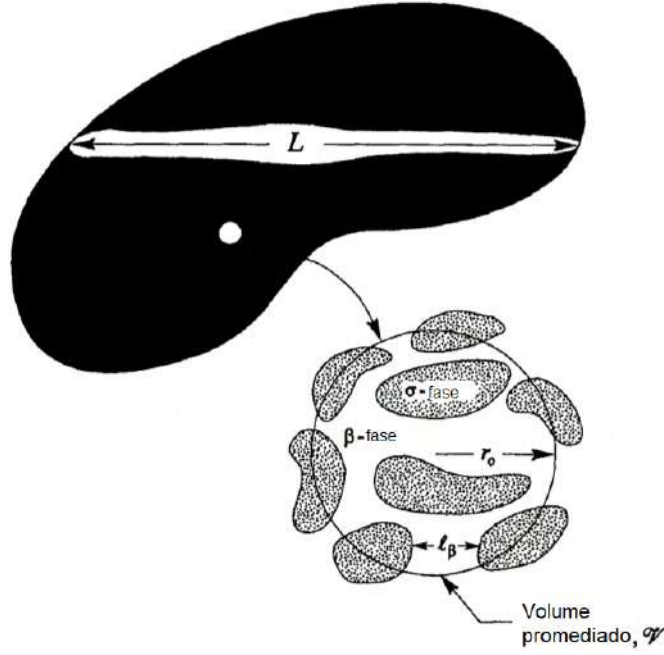


Figura 3.1: Domínio macroscópico e o volume elementar referencial (REV). Adaptado de [3].

relação ao REV nas equações originais, é obtido um novo conjunto de equações representativas. Estas agora estão associadas ao que ocorre na escala de tamanho do REV, que é significativamente superior à ℓ_β , na Eq. (3.1). Por conta disto, este procedimento, chamado de *upscaling*, resolve o problema de escalas citado anteriormente, visto que agora a malha computacional necessita ser refinada somente o suficiente para resolver a escala de comprimento do REV.

O operador média volumétrica

Inicialmente, será analisada uma fase fluida, β , que escoar em um esqueleto poroso que representa uma fase sólida, σ , como pode ser visto na Figura 3.2. O volume sobre o qual será feita a promediação, o volume elementar de referência como pode ser visto na Figura 3.1, conterá ambas as fases. Ou seja, dentro do REV há um meio descontínuo, uma vez que há interface singular entre as fases. Isto implicará no surgimento de termos superficiais nas equações promediadas.

O volume ocupado pelo REV é denotado como \mathcal{V} , e é a soma dos volumes das fases presentes no mesmo, $\mathcal{V} = \mathcal{V}_\beta + \mathcal{V}_\sigma$. Baseado nisto, [30] listou três possíveis operadores de média. O primeiro, e menos utilizado, é o chamado operador média espacial definido pela Equação 3.2:

$$\langle \phi \rangle \triangleq \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} \phi d\mathcal{V} \quad (3.2)$$

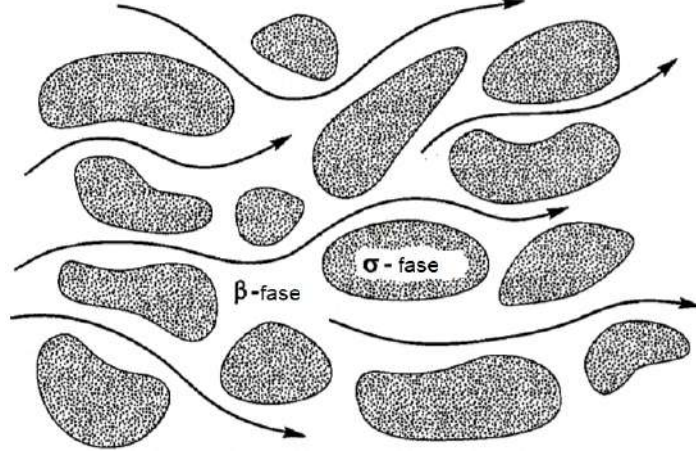


Figura 3.2: Escoamento em um meio poroso rígido. Adaptado [3].

Esta definição representa a média de uma propriedade ϕ em ambas as fases. A segunda definição é chamada de média de fase, e é definida na Equação 3.3:

$$\langle \phi_\beta \rangle \triangleq \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V} \quad (3.3)$$

Este operador realiza a média integrando em todo o volume de REV, porém apenas sobre o campo ϕ associado a fase fluida. Em outras palavras, o campo ϕ_β é não-nulo apenas na fase β . Devido a isso, o limite de integração acaba se degenerando apenas ao volume ocupado pela fase fluida. A terceira definição é a chamada média intrínseca de fase, onde se realiza a promediação apenas em relação à fase desejada, como pode ser visto na Equação 3.4:

$$\langle \phi_\beta \rangle^\beta \triangleq \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V} \quad (3.4)$$

Esta última definição é mais útil para descrever reações químicas em escoamentos multifásicos e em problemas gerais de transferência de massa [30], e tem mais proximidade com dados obtidos de experimentos.

Definindo a fração volumétrica da fase β como

$$\epsilon_\beta \triangleq \frac{\mathcal{V}_\beta}{\mathcal{V}} \quad (3.5)$$

é possível relacionar as médias de fase com a intrínseca,

$$\langle \phi_\beta \rangle = \epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta \quad (3.6)$$

Uma identidade importante associada a porosidade é demonstrada a seguir, sendo

esta útil para outras demonstrações e desenvolvimentos teóricos ao longo do texto,

$$\epsilon_\beta = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} 1 \, d\mathcal{V} \rightarrow \epsilon_\beta = \langle 1 \rangle \quad (3.7)$$

Gray [31] definiu uma decomposição em relação ao operador média intrínseca, análoga a definição usada em teoria de escoamentos turbulentos, onde se define um campo como a soma de seu valor médio e sua flutuação,

$$\phi_\beta \triangleq \langle \phi_\beta \rangle^\beta + \phi'_\beta \quad (3.8)$$

onde as propriedades do valor médio e flutuante são dados por,

$$\langle \phi'_\beta \rangle^\beta = 0 \quad (3.9a)$$

$$\langle \langle \phi_\beta \rangle^\beta \rangle^\beta = \langle \phi_\beta \rangle^\beta \quad (3.9b)$$

Outra propriedade útil aqui é a de média de produtos:

$$\begin{aligned} \langle \phi_\beta \gamma_\beta \rangle &= \langle \langle \phi_\beta \rangle^\beta \langle \gamma_\beta \rangle^\beta \rangle + \langle \phi'_\beta \langle \gamma_\beta \rangle^\beta \rangle + \langle \langle \phi_\beta \rangle^\beta \gamma'_\beta \rangle + \langle \phi'_\beta \gamma'_\beta \rangle \\ &= \langle \phi_\beta \rangle^\beta \langle \gamma_\beta \rangle^\beta \langle 1 \rangle + \langle \gamma_\beta \rangle^\beta \langle \phi'_\beta \rangle + \langle \phi_\beta \rangle^\beta \langle \gamma'_\beta \rangle + \langle \phi'_\beta \gamma'_\beta \rangle \\ &= \epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta \langle \gamma_\beta \rangle^\beta + \epsilon_\beta \langle \phi'_\beta \gamma'_\beta \rangle^\beta \end{aligned} \quad (3.10)$$

Propriedades de médias de derivadas

É de suma importância entender a relação entre a média de derivadas e a derivada de médias. Nesta sessão serão demonstradas as relações existentes para derivadas espaciais e temporais. Para tal, o teorema generalizado de transporte de Reynolds será usado.

Média de derivada temporal

Usando o teorema de transporte de Reynolds generalizado com condição de salto ao longo da fase β ,

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi \, d\mathcal{V}_\beta = \int_{\mathcal{V}_\beta} \frac{\partial \phi}{\partial t} \, d\mathcal{V}_\beta + \int_{\partial \mathcal{V}_\beta} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi \frac{d\mathbf{x}}{dt} \Big|_s \right) dA \quad (3.11)$$

Definindo a velocidade de superfície como $\mathbf{w} \triangleq \left. \frac{d\mathbf{X}}{dt} \right|_s$,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi d\mathcal{V}_\beta \right) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathcal{V}_\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\partial \mathcal{V}_\beta} \hat{\mathbf{n}} \cdot (\phi \mathbf{w}) dA \quad (3.12)$$

separando a integral de superfície entre a superfície S e a superfície relacionada com as entradas e saídas de fluido do REV, $\partial \mathcal{V}_\beta - S$, e dividindo ambos os lados da equação por \mathcal{V} ,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi d\mathcal{V}_\beta \right) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\mathcal{V}_\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}} \cdot (\phi \mathbf{w}) dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\partial \mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot (\phi \mathbf{w}) dA \quad (3.13)$$

Sendo $\mathbf{w} = \mathbf{0}$ em $\partial \mathcal{V}_\beta - S$ pois, nesta região, a superfície \mathcal{V}_β coincide com a superfície do REV que é constante no tempo. Ou seja, a propriedade da média da derivada temporal de uma grandeza ϕ , e para uma grandeza tensorial $\boldsymbol{\phi}$ (demonstração análoga) são, respectivamente

$$\left\langle \frac{\partial \phi}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}} \cdot (\phi \mathbf{w}) dA \quad (3.14a)$$

$$\left\langle \frac{\partial \boldsymbol{\phi}}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \boldsymbol{\phi} \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}} \cdot (\boldsymbol{\phi} \otimes \mathbf{w}) dA \quad (3.14b)$$

Média da derivada espacial: teorema de média volumétrica

A média de uma derivada espacial é uma propriedade demonstrada por diferentes autores, e de diferentes formas. Esta propriedade também é chamada teorema de média volumétrica. Neste texto será reproduzida a demonstração feita por HOWES e WHITAKER [32].

A começar pela integral volumétrica sobre o divergente de $\boldsymbol{\phi}_\beta$ ao longo da fase β , e aplicando o teorema da divergência. A integral de superfície é decomposta entre superfície interfacial S e a superfície de entrada $\partial \mathcal{V}_\beta - S$,

$$\int_{\mathcal{V}_\beta} \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\phi}_\beta) d\mathcal{V} = \int_{\partial \mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\phi}_\beta dA + \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \boldsymbol{\phi}_\beta dA \quad (3.15)$$

dividindo ambos os lados por \mathcal{V} , e aplicando a definição de média superficial,

$$\langle \boldsymbol{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\phi}_\beta) \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\partial \mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\phi}_\beta dA + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \boldsymbol{\phi}_\beta dA \quad (3.16)$$

Na Equação 3.16, pode ser visto um componente interfacial como esperado, e a superfície de integração em relação à $\partial\mathcal{V}_\beta - S$. Este termo deve ser tratado, para tal, o campo é parametrizado em termo de s e ξ , $\phi_\beta = \phi_\beta(t, \mathbf{x}(s, \xi))$, assim como a superfície $\partial\mathcal{V}_\beta$. Uma curva arbitrária também parametrizada em relação a s é definida, esta conecta os centroides dos volumes de integração. Em outras palavras, volumes de integração são criados ao longo desta curva na medida em que s varia. Calculado a derivada da integral de volume de ϕ_β ao longo de \mathcal{V}_β , e aplicando o Teorema de Transporte de Reynolds com superfície singular,

$$\frac{d}{ds} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta = \int_{\mathcal{V}_\beta} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial s} d\mathcal{V}_\beta + \int_{\partial\mathcal{V}_\beta} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi_\beta \otimes \frac{d\mathbf{x}}{ds} \Big|_s \right) dA \quad (3.17)$$

e usando o fato de $\frac{\partial \phi_\beta}{\partial t} = \mathbf{0}$, e decompondo a superfície de integração,

$$\frac{d}{ds} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta = \int_{\partial\mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi_\beta \otimes \frac{d\mathbf{x}}{ds} \Big|_s \right) dA + \int_S \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi_\beta \otimes \frac{d\mathbf{x}}{ds} \Big|_s \right) dA \quad (3.18)$$

Como a superfície fluida $\partial\mathcal{V}_\beta$ é parametrizada por s e ξ , então $\frac{d\mathbf{x}}{ds}$ é tangente a superfície. Na interface S , esta derivada sempre é perpendicular a normal da superfície,

$$\frac{d}{ds} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta = \int_{\partial\mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi_\beta \otimes \frac{d\mathbf{x}}{ds} \Big|_s \right) dA \quad (3.19)$$

O próximo passo é decompor o vetor posição no vetor que localiza o centroide \mathbf{x}_o e o vetor posição em relação ao referencial do centroide \mathbf{p} , onde $\mathbf{x} = \mathbf{x}_o + \mathbf{p}$,

$$\frac{d}{ds} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta = \int_{\partial\mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi_\beta \otimes \frac{d\mathbf{x}_o}{ds} \Big|_s \right) dA + \int_{\partial\mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi_\beta \otimes \frac{d\mathbf{p}}{ds} \Big|_s \right) dA \quad (3.20)$$

Nesta parte, a topologia do REV é importante. É preciso escolher uma topologia que garanta a ortogonalidade entre $\frac{d\mathbf{p}}{ds}$, o qual é tangente à superfície $\partial\mathcal{V}_\beta - S$ e $\hat{\mathbf{n}}$. A esfera é uma escolha possível. Outras topologias que não satisfazem as condições de ortogonalidade podem ser usadas para a realização da média, mas terá um erro associado como é mostrado por [32]. Com esta simplificação:

$$\frac{d}{ds} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta = \int_{\partial\mathcal{V}_\beta - S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \left(\phi_\beta \otimes \frac{d\mathbf{x}_o}{ds} \Big|_s \right) dA \quad (3.21)$$

e usando o fato de $\frac{d\mathbf{x}_o}{ds}$ ser constante ao longo da superfície de integração,

$$\frac{d}{ds} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta = \frac{d\mathbf{x}_o}{ds} \Big|_s \int_{\partial\mathcal{V}_\beta-S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \phi_\beta dA \quad (3.22)$$

usando a regra da cadeia,

$$\frac{d\mathbf{x}_o}{ds} \Big|_s \nabla \cdot \left(\int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta \right) = \frac{d\mathbf{x}_o}{ds} \Big|_s \int_{\partial\mathcal{V}_\beta-S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \phi_\beta dA \quad (3.23)$$

e dividindo ambos os lados por \mathcal{V}

$$\nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \phi_\beta d\mathcal{V}_\beta \right) \right) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\partial\mathcal{V}_\beta-S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \phi_\beta dA \quad (3.24)$$

$$\nabla \cdot (\langle \phi_\beta \rangle) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\partial\mathcal{V}_\beta-S} \hat{\mathbf{n}} \cdot \phi_\beta dA \quad (3.25)$$

Este resultado é aplicado na 3.16, concluindo assim a demonstração do teorema,

$$\langle \nabla \cdot (\phi_\beta) \rangle = \nabla \cdot (\langle \phi_\beta \rangle) + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \phi_\beta dA \quad (3.26)$$

A versão deste teorema para o operador gradiente (demonstração análoga):

$$\langle \nabla \phi_\beta \rangle = \nabla \langle \phi_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \phi_\beta \hat{\mathbf{n}}_s dA \quad (3.27)$$

Usando o teorema, pode-se provar a seguinte relação que será útil ao longo do texto:

$$\nabla \epsilon_\beta = \nabla \langle 1 \rangle = \langle \nabla 1 \rangle - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s dA \quad (3.28)$$

$$\nabla \epsilon_\beta = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s dA \quad (3.29)$$

3.1.2 Equações de transporte médias

Com os conceitos expostos na seção anterior, aplica-se o operador média em ambos os lados das equações de transporte. Seguindo o procedimento feito por WHITAKER [30], chega-se em uma equação de transporte geral. Aplicando o operador média em

ambos os lados de uma equação de transporte para ϕ_β :

$$\left\langle \frac{\partial \phi_\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta) \right\rangle = \left\langle \nabla \cdot (\Lambda_\beta) + \vartheta_\beta \right\rangle \quad (3.30)$$

e aplicando as propriedades de médias de derivadas temporal e espacial,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \phi_\beta \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\phi_\beta \otimes \mathbf{w}) dA + \nabla \cdot (\langle \phi_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta \rangle) + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\phi_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta) dA = \\ \nabla \cdot (\langle \Lambda_\beta \rangle) + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \Lambda_\beta dA + \langle \vartheta_\beta \rangle \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \phi_\beta \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \phi_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta \rangle) + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\phi_\beta \otimes (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w})) dA = \\ \nabla \cdot (\langle \Lambda_\beta \rangle) + \langle \vartheta_\beta \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \Lambda_\beta dA \end{aligned} \quad (3.32)$$

Duas parcelas referentes à fenômenos interfaciais aparecem na Equação 3.32. A parcela do lado esquerdo da equação é relacionado com o fluxo de ϕ entre a interface S e a fase fluida. A parcela situada no lado direito está relacionada a σ na superfície. Em seguida, a média intrínseca é aplicada,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta) + \nabla \cdot ((\epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) + \nabla \cdot (\epsilon_\beta \langle \phi'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta) + \\ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\phi_\beta \otimes (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w})) dA = \\ \epsilon_\beta \nabla \cdot (\langle \Lambda_\beta \rangle^\beta) + \langle \Lambda_\beta \rangle^\beta \cdot \nabla \epsilon_\beta + \epsilon_\beta \langle \vartheta_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \Lambda_\beta dA \end{aligned} \quad (3.33)$$

Do termo advectivo, o qual é não-linear, uma terceira parcela surge na equação quando a promediação é aplicada. Este termo relaciona o valor médio de ϕ_β com a sua flutuação. Isto demonstra a estreita relação existente entre o problema médio que passou por um *upsacaling*, e as menores escalas. Usando a propriedade 3.29,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta) + \nabla \cdot ((\epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) + \nabla \cdot (\epsilon_\beta \langle \phi'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta) + \\ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\phi_\beta \otimes (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w})) dA = \\ \epsilon_\beta \nabla \cdot (\langle \Lambda_\beta \rangle^\beta) - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \langle \Lambda_\beta \rangle^\beta dA + \epsilon_\beta \langle \vartheta_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \Lambda_\beta dA \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta) + \nabla \cdot ((\epsilon_\beta \langle \phi_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) + \nabla \cdot (\epsilon_\beta \langle \phi'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta) + \\
\frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\phi_\beta \otimes (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w})) dA = \\
\epsilon_\beta \nabla \cdot (\langle \Lambda_\beta \rangle^\beta) + \epsilon_\beta \langle \vartheta_\beta \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \Lambda'_\beta dA
\end{aligned} \tag{3.35}$$

A 3.35 é a equação geral de transporte média. [3] chama o terceiro termo do lado esquerdo de filtro de volume, e o último termo do lado direito é chamado de filtro de superfície. Estes termos mostram como informações que vêm da microescala são filtradas. O quarto termo do lado esquerdo se refere a mudanças de fase [30].

A partir do resultado da promediação de uma equação genérica de transporte obtida anteriormente, Eq. (3.35), aplica-se o operador média em ambos os lados do balanço de massa,

$$\langle \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta) \rangle = 0 \tag{3.36}$$

onde resulta em

$$\nabla \cdot (\epsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\mathbf{w} - \mathbf{v}_\beta) dA \tag{3.37}$$

e desconsiderando mudanças de fase, o balanço de massa promediado fica

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) = 0 \tag{3.38}$$

O mesmo também é feito para o balanço de quantidade de movimento linear. Aplicando o operador média em ambos os lados,

$$\left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta) \right\rangle = \langle -\nabla p_\beta + \mu \nabla^2 (\mathbf{v}_\beta) \rangle \tag{3.39}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_\beta \rho_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \nabla \cdot (\epsilon_\beta \rho_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \nabla \cdot (\epsilon_\beta \rho_\beta \langle \mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta) + \\
\frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (\rho_\beta \mathbf{v}_\beta \otimes (\mathbf{v}_\beta - \mathbf{w})) dA = \\
-\epsilon_\beta \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \epsilon_\beta \mu_\beta \nabla^2 (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \mu_\beta \nabla \cdot \left(\frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \otimes \mathbf{v}'_\beta dA \right) \\
+ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-p'_\beta \mathbf{I} + \mu_\beta \nabla \mathbf{v}'_\beta) dA
\end{aligned} \tag{3.40}$$

e desconsiderando a transformação de fase, chega-se na seguinte equação,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_\beta \rho_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \nabla \cdot ((\epsilon_\beta \rho_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \\ \nabla \cdot ((\epsilon_\beta \rho_\beta \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta)) = -\epsilon_\beta \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \epsilon_\beta \mu_\beta \nabla^2 (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) \\ + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-p'_\beta \mathbf{I} + \mu_\beta \nabla \mathbf{v}'_\beta) dA \end{aligned} \quad (3.41)$$

Para o problema de fechamento da literatura, verificar o Apêndice.

3.1.3 Fluido Newtoniano Generalizado

O desenvolvimento anterior se aplica a fluidos newtonianos. Isto é, a viscosidade é uma propriedade constante. Uma das primeiras maneiras de estudar o problema do escoamento de fluidos não newtonianos em meios porosos via Teoria de Média foi o de Slattery [33], mediante uma série de hipóteses simplificadoras. Em seguida, os termos não relacionados a pressão são descritos como uma transformação de resistência. O equacionamento é apresentado a seguir.

O balanço de quantidade de movimento linear é integrado no volume elementar representativo \mathcal{V} :

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla \cdot \mathbf{T} - \rho \mathbf{f} \right] d\mathcal{V} = 0 \quad (3.42)$$

Como a superfície de contorno está fixa, o operador integral pode ser inserido dentro da derivada temporal:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{v} d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \mathbf{T} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{f} d\mathcal{V} = 0 \quad (3.43)$$

Dividindo a Equação 3.43 pelo volume \mathcal{V} :

$$\frac{1}{\mathcal{V}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{v} d\mathcal{V} + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} d\mathcal{V} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} \nabla \cdot \mathbf{T} d\mathcal{V} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{f} d\mathcal{V} = 0 \quad (3.44)$$

A definição da média de uma variável a qualquer é dada por:

$$\langle a \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}} a d\mathcal{V} \quad (3.45)$$

Usando a notação acima, a Equação 3.44 é reescrita como:

$$\frac{\partial \langle \rho \mathbf{v} \rangle}{\partial t} + \langle \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle = \langle \nabla \cdot \mathbf{T} \rangle + \langle \rho \mathbf{f} \rangle \quad (3.46)$$

O teorema da Teoria de Média é dado por:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{a} \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{a} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{a}_\beta \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.47)$$

A Equação 3.46 pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial \langle \rho \mathbf{v} \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot \langle \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{T} \rangle + \langle \rho \mathbf{f} \rangle + \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{T}_\beta \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.48)$$

Definindo o tensor das tensões \mathbf{T} , a força de corpo \mathbf{f} e a pressão modificada $\langle P \rangle$, respectivamente, como:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad (3.49)$$

$$\mathbf{f} = -\nabla \Phi \quad (3.50)$$

$$\langle P \rangle = \langle p \rangle + \rho \Phi \quad (3.51)$$

Aplicando as definições anteriores e fazendo a hipótese de que os termo inercial é desprezível e o regime é estacionário, tem-se que:

$$\nabla \langle P \rangle - \nabla \cdot \langle \boldsymbol{\tau} \rangle - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S [\mathbf{T}_\beta - \rho \phi \mathbf{I}] \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (3.52)$$

Os últimos dois termos da Equação 3.52 podem ser descritos como uma transformação de resistência na forma:

$$-\nabla \cdot \langle \boldsymbol{\tau} \rangle - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S [\mathbf{T}_\beta - \rho \phi \mathbf{I}] \cdot \mathbf{n} dS = \mathbf{K} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle \quad (3.53)$$

Substituindo a Equação 3.53 na Eq. 3.52 é obtida uma equação na forma da Lei de Darcy, porém generalizada:

$$\nabla \langle P \rangle + \mathbf{K} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = 0 \quad (3.54)$$

Utilizando a hipótese de que o meio poroso é isotrópico, a transformação de resistência é simplificada para:

$$\mathbf{K} \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = k \langle \mathbf{v} \rangle \quad (3.55)$$

onde k é um escalar. É preciso ainda conhecer a função k . Uma possível aproximação é de que a transformação de resistência depende do comprimento característico do sistema L , da velocidade média característica $\langle \mathbf{v} \rangle$ e dos parâmetros do modelo de viscosidade. Para o modelo *power-law*, a parte deviatórica do tensor das tensões é

dada por:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta_1 \dot{\gamma}^{n-1} \mathbf{D} \quad (3.56)$$

Nesse caso, a dependência da transformação de resistência seria com o comprimento característico, da velocidade média característica, do índice de consistência η_1 e do expoente *power-law* n :

$$k = g(L, \langle \mathbf{v} \rangle, \eta_1, n) \quad (3.57)$$

Utilizando o Teorema Pi de Buckingham, é obtida uma dependência funcional na forma:

$$k = \frac{\langle \mathbf{v} \rangle^{n-1} \eta_1}{L^{n+1} k_1^*} \quad (3.58)$$

onde k_1 é uma função de n a ser determinada.

De uma forma geral, é possível trabalhar nas equações médias para fluidos newtonianos generalizados aplicando a média volumétrica diretamente na equação constitutiva. Da definição de fluido newtoniano generalizado:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu \mathbf{D} \quad (3.59)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\dot{\gamma})(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \quad (3.60)$$

Aplicando o operador média volumétrica:

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle = \langle \mu(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) \rangle \quad (3.61)$$

Aplicando a propriedade da média do produto:

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle = \varepsilon \langle \mu \rangle^\beta \langle \nabla \mathbf{v} + \mathbf{v}^T \rangle^\beta + \varepsilon \langle \mu' \rangle (\nabla \mathbf{v}' + \nabla \mathbf{v}^{T'})^\beta \quad (3.62)$$

Substituindo a média superficial pela média intrínseca:

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta = \langle \mu \rangle^\beta (\langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta + \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta) + \langle \mu' \rangle (\nabla \mathbf{v}' + \nabla \mathbf{v}^{T'})^\beta \quad (3.63)$$

Aplicando o teorema de média volumétrica para derivada espacial:

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta &= \langle \mu \rangle^\beta \left[\frac{\nabla (\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right] + \\ &+ \langle \mu \rangle^\beta \left[\frac{(\nabla \varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right] + \langle \mu' \rangle (\nabla \mathbf{v}' + \nabla \mathbf{v}^{T'})^\beta \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta &= \langle \mu \rangle^\beta \left[\frac{(\varepsilon \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \otimes \nabla \varepsilon)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right] + \\
&+ \langle \mu \rangle^\beta \left[\frac{(\varepsilon (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T + \nabla \varepsilon \otimes \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right] + \langle \mu' \rangle^\beta (\nabla \mathbf{v}' + \nabla \mathbf{v}^{T'})^\beta
\end{aligned} \tag{3.65}$$

Considerando que o meio poroso é homogêneo, $\nabla \varepsilon \approx 0$ e portanto:

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta &= \langle \mu \rangle^\beta \left[\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right] + \\
&+ \langle \mu \rangle^\beta \left[(\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right] + \langle \mu' \rangle^\beta (\nabla \mathbf{v}' + \nabla \mathbf{v}^{T'})^\beta
\end{aligned} \tag{3.66}$$

A condição de contorno de não-deslizamento deve ser satisfeita, o que torna as integrais de superfície na interface identicamente nulas:

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta = \langle \mu \rangle^\beta \left[\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T \right] + \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^* \tag{3.67}$$

onde:

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle^* = \langle \mu' \rangle^\beta (\nabla \mathbf{v}' + \nabla \mathbf{v}^{T'})^\beta \tag{3.68}$$

3.1.4 Fluido Viscoelástico

A Teoria de Média Volumétrica foi aplicada para descrever o escoamento de um fluido de Maxwell em meio poroso em 1996 no trabalho de Haro [34]. O modelo de fluido de Maxwell, também conhecido como modelo UCM (*Upper-Convected Maxwell*) é dado por:

$$\boldsymbol{\tau} + t_m \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = -\eta \mathbf{D} \tag{3.69}$$

onde t_m é o tempo de relaxação característico, η é um parâmetro de viscosidade e $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}$ denota o operador derivada convectada superior:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{L}^T \cdot \boldsymbol{\tau} \tag{3.70}$$

sendo \mathbf{L} é o gradiente de velocidade. É feita uma estimativa de ordem de grandeza dos termos da Eq. 3.70:

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \mathbf{O} \left(\frac{\boldsymbol{\tau}}{t^*} \right) + \mathbf{O} \left(\frac{\boldsymbol{\tau} \mathbf{v}}{L} \right) \tag{3.71}$$

onde L é o comprimento característico da fase fluida e t^* é o tempo característico do processo. É feita a hipótese que o tempo característico do processo é muito menor

que o tempo característico do fluido, a fim de linearizar a equação constitutiva:

$$t^* \ll \frac{L}{v} \quad (3.72)$$

A Eq. 3.69 pode então ser escrita como:

$$\boldsymbol{\tau} + t_m \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} = -\eta \mathbf{D} \quad (3.73)$$

O termo advectivo é considerado desprezível no balanço de quantidade de movimento linear da fase fluida, bem como as forças de corpo, o que leva a:

$$\rho_\beta \frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} = -\nabla p_\beta - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta \quad (3.74)$$

onde β denota a fase fluida. A Eq. 3.74 pode ser reescrita como:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta = -\rho_\beta \frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} - \nabla p_\beta \quad (3.75)$$

Aplicando o operador divergente na equação constitutiva linearizada (3.73):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta + t_m \frac{\partial \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta}{\partial t} = -\eta_\beta \nabla \cdot \mathbf{D}_\beta \quad (3.76)$$

Inserindo a Eq. 3.75 na Eq. 3.76 obtém-se:

$$t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \mathbf{v}_\beta}{\partial t^2} + t_m \frac{\partial}{\partial t} (\nabla p_\beta) + \rho_\beta \frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} = -\nabla p_\beta + \eta_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta \quad (3.77)$$

Com a hipótese de que o escoamento é incompressível, isto é, $\nabla \cdot \mathbf{v}_\beta = 0$. O escoamento é submetido a condição de não deslizamento:

$$\mathbf{v}_\beta = 0 \text{ em } A_{\beta\sigma} \quad (3.78)$$

onde $A_{\beta\sigma}$ é a área interfacial contida na região macroscópica. As condições iniciais são:

$$\mathbf{v}_\beta = \mathbf{h}(\mathbf{r}), \quad t = 0 \quad (3.79)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} = 0, \quad t = 0 \quad (3.80)$$

sendo $\mathbf{h}(\mathbf{r})$ é a solução do sistema de equações em regime estacionário. A segunda condição de contorno, referente às entradas e saídas do sistema macroscópico, ainda não é conhecida em termos de média volumétrica. É aplicada a média superficial na

Eq. 3.77, o que leva a:

$$\langle t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \mathbf{v}_\beta}{\partial t^2} \rangle + \langle t_m \frac{\partial}{\partial t} (\nabla p_\beta) \rangle + \langle \rho_\beta \frac{\partial \mathbf{v}_\beta}{\partial t} \rangle = -\langle \nabla p_\beta \rangle + \langle \eta_\beta \nabla^2 \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (3.81)$$

Algumas hipóteses são feitas. A primeira é de que para um meio poroso rígido, o volume da fase fluida não é função do tempo. Além disso, variações das propriedades físicas no volume são desprezíveis. Aplicando estas hipóteses, a Eq. 3.81 pode ser reescrita como:

$$t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle}{\partial t^2} + t_m \frac{\partial}{\partial t} \langle \nabla p_\beta \rangle + \rho_\beta \frac{\partial \langle \mathbf{v}_\beta \rangle}{\partial t} = -\langle \nabla p_\beta \rangle + \eta_\beta \langle \nabla \cdot \nabla \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (3.82)$$

É necessário tratar os dois termos do lado direito da Eq. 3.82. A análise destes termos foi feita por [3]. A utilização destes resultados leva a:

$$\begin{aligned} & t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle}{\partial t^2} + t_m \varepsilon_\beta \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta) + \rho_\beta \frac{\partial \langle \mathbf{v}_\beta \rangle}{\partial t} \\ &= -\varepsilon_\beta \nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \eta_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \eta_\beta \nabla \varepsilon_\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \\ &+ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot [-\mathbf{I} \tilde{p}_\beta + \eta_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta] dA - t_m \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{p}_\beta dA \right\} \end{aligned} \quad (3.83)$$

onde ε_β é a porosidade e \sim denota a flutuação da variável:

$$\mathbf{v}_\beta = \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \quad (3.84)$$

$$p_\beta = \langle p \rangle^\beta + \tilde{p}_\beta \quad (3.85)$$

A Eq. 3.83 está escrita em termos da média superficial. Para escreve-la em termos da média intrínseca, é preciso dividir a equação por ε_β :

$$\begin{aligned} & t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}{\partial t^2} + t_m \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta) + \rho_\beta \frac{\partial \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}{\partial t} \\ &= -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \eta_\beta (\nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\beta^{-1} \nabla \varepsilon_\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \varepsilon_\beta^{-1} \nabla^2 \varepsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \\ &+ \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \eta_{\beta\sigma} \cdot [-\tilde{p}_\beta \mathbf{I} + \eta_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta] dA - t_m \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{p}_\beta dA \right\} \end{aligned} \quad (3.86)$$

onde a relação entre as médias é:

$$\langle a \rangle = \varepsilon_\beta \langle a \rangle^\beta \quad (3.87)$$

Os termos com gradiente de porosidade podem ser substituídos por uma condição de salto na vizinha do meio poroso e a fase fluida. Assim, os termos com gradiente

de porosidade são descartados:

$$\begin{aligned}
& t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle}{\partial t^2} + t_m \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta) + \rho_\beta \frac{\partial \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}{\partial t} \\
& = -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \eta_\beta \nabla^2 \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \\
& + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \eta_{\beta\sigma} \cdot [-\tilde{p}_\beta \mathbf{I} + \eta_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta] dA - t_m \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{p}_\beta dA \right\}
\end{aligned} \tag{3.88}$$

Os últimos dois termos do lado direito da Eq. 3.88 são chamados de filtro pois a informação da microescala é filtrada por estas integrais. Devido às flutuações das variáveis, surge um problema de fechamento. As Equações 3.84 e 3.85 podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{v}}_\beta &= \mathbf{v}_\beta - \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta, \\
\tilde{p}_\beta &= p_\beta - \langle p_\beta \rangle^\beta
\end{aligned} \tag{3.89}$$

Equações para as flutuações podem ser obtidas subtraindo as equações das variáveis pelas suas equações médias. Para o balanço de quantidade de movimento linear, a equação é obtida subtraindo a Eq. 3.77 da Eq. 3.88:

$$\begin{aligned}
& t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\partial t^2} + \rho_\beta \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\partial t} + t_m \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \tilde{p}_\beta) + t_m \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{p}_\beta dA \right\} \\
& = -\nabla \tilde{p}_\beta + \eta_\beta \nabla^2 \tilde{\mathbf{v}}_\beta - \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot [-\mathbf{I} \tilde{p}_\beta + \eta_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta] dA
\end{aligned} \tag{3.90}$$

Para as condições iniciais e de contorno, a partir da Eq. 3.78 e Eq. 3.89, a primeira condição de contorno pode ser escrita como:

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta = -\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \text{ em } A_{\beta\sigma} \tag{3.91}$$

As condições iniciais:

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta = \tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{r}), \quad t = 0 \tag{3.92}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\partial t} = 0, \quad t = 0 \tag{3.93}$$

Para a segunda condição de contorno, é utilizada uma condição periódica, a fim de obter uma solução para a flutuação de pressão e velocidade numa região representativa que permita resolver as integrais na Eq. 3.88. Assim, o problema de valor de contorno é dado por:

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}_\beta = 0 \tag{3.94}$$

$$\begin{aligned}
& t_m \rho_\beta \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\partial t^2} + \rho_\beta \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\partial t} + t_m \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \tilde{p}_\beta) + t_m \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{p}_\beta dA \right\} \\
& = -\nabla \tilde{p}_\beta + \eta_\beta \nabla^2 \tilde{\mathbf{v}}_\beta - \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot [-\mathbf{I} \tilde{p}_\beta + \eta_\beta \nabla \tilde{\mathbf{v}}_\beta] dA
\end{aligned} \tag{3.95}$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta = -\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \text{ em } A_{\beta\sigma} \tag{3.96}$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_\beta = B_o \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle_0^\beta, \quad t = 0 \tag{3.97}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}_\beta}{\partial t} = 0, \quad t = 0 \tag{3.98}$$

$$\tilde{p}_\beta(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{p}_\beta(\mathbf{r}), \quad \tilde{\mathbf{v}}_\beta(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{\mathbf{v}}_\beta(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \tag{3.99}$$

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \rangle^\beta = 0 \tag{3.100}$$

Para resolver o problema analiticamente, os autores fazem uso da transformada de Fourier, além de algumas hipóteses, como ignorar o termo de Brinkman no balanço de Q.M.L. e a solução é obtida a partir do problema transformado para um caso particular.

A fim de verificar a viabilidade da Teoria de Média Volumétrica para o modelo proposto pela Tese, foi feita a promediação da equação constitutiva para o modelo de fluido viscoelástico Oldroyd-B. O desenvolvimento que foi realizado, disponível no apêndice, leva a:

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta + \lambda_1 \langle \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \rangle^\beta = \eta_0 \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \eta_0 (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T + \eta_0 \lambda_2 \langle \overset{\nabla}{\nabla} \mathbf{v} \rangle^\beta + \eta_0 \lambda_2 \langle \overset{\nabla}{\nabla} \mathbf{v}^T \rangle^\beta \tag{3.101}$$

3.2 Teoria de Mistura

A Mecânica do contínuo é uma disciplina clássica para descrever o comportamento de materiais, sejam estes fluidos ou sólidos, desde que se adéquem à hipótese de constituir um meio contínuo. Além disso, a mecânica do contínuo clássica descreve apenas um material. A Teoria Contínua de Misturas é uma extensão desta para problemas multifásicos. Para a melhor compreensão da teoria e do seu conjunto de equações, são descritos brevemente o processo de obtenção das equações governantes e as hipóteses feitas para o caso monofásico. Em seguida, a Teoria de Misturas é de fato introduzida em cada tópico, baseada nos conceitos fundamentais apresentados.

A Mecânica do Contínuo pode, basicamente, ser dividida em três tópicos: cinemática, leis de balanço e teoria constitutiva. O texto será limitado a abordar o necessário nos dois últimos tópicos com o objetivo de tecer uma introdução a respeito da Teoria de Mistura.

3.2.1 Fundamentos da Teoria de Mistura

Uma mistura consiste em dois ou mais materiais deformáveis, cada qual é considerado um meio contínuo. Pode ser entendida como uma superposição de n meios contínuos. Equações de Mecânica do Contínuo são utilizadas para prever o comportamento da mistura [35].

Cada constituinte também tem seu próprio conjunto de equações. Como se trata de uma mistura, no equacionamento de um constituinte, é necessário contabilizar a influência dos outros materiais presentes na mistura, que vão impactar nas suas leis de balanço.

É importante destacar que as leis de balanço que regem o comportamento de cada constituinte não são exatamente as mesmas que regem o comportamento daquele material em um problema monofásico. Além disso, são necessárias hipóteses constitutivas para modelar os termos responsáveis por descrever a influência de um constituinte no outro. Estes detalhes serão tratados adiante.

Conservação de Massa

Todo corpo material possui massa. Aqui é assumido que esta propriedade é distribuída continuamente pela extensão do corpo. Além disso, postula-se que a massa de um corpo material é conservada, independentemente da deformação a qual o corpo é submetido. A massa de um corpo B é então dada por [36]:

$$M(B) = \int_V \rho dV \quad (3.102)$$

onde ρ é o campo de massa específica do corpo. Como a massa é conservada, tem-se que:

$$\frac{dM(B)}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho dV = 0 \quad (3.103)$$

Aplicando o Teorema do Transporte de Reynolds para uma descrição espacial, tem-se que:

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.104)$$

onde $\frac{D}{Dt}$ denota o operador derivada material e \mathbf{v} é o campo de velocidade. Alternativamente, é possível escrever a Equação 3.104 como:

$$\frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.105)$$

A 3.105 também é conhecida como equação da continuidade. Para a mistura, a 3.105 é válida. Isto é, massa não é criada nem destruída na mistura. Porém, para um constituinte em específico, isso não é necessariamente verdade pois pode haver transferência de massa entre os constituintes, causada por reações químicas. Para um constituinte i , postula-se que [35] e [37]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_i dV = \int_V d_i dV \quad (3.106)$$

onde d_i é a densidade de produção de massa proveniente de outros constituintes. A massa específica do constituinte não é simplesmente a massa específica da substância. Aplicando o Teorema da Divergência e o Teorema da Localização:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i) = d_i \quad (3.107)$$

Segue então que uma condição necessária para que a 3.105 seja satisfeita para uma mistura é que:

$$\sum_i d_i = 0 \quad (3.108)$$

Uma aplicação usual de Teoria de Mistura encontrada na literatura é a de um meio poroso rígido saturado com fluido. Pela hipótese de que o meio poroso é rígido, a solução do seu conjunto de equações é a solução trivial. Para o constituinte fluido, considerando que não há reações químicas, a massa específica do constituinte é a massa específica ρ_f do fluido ponderada pela fração daquele constituinte na mistura, que neste caso coincide com a porosidade ε . Assim, o balanço de massa pode ser escrito como:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{v}_f) = 0 \quad (3.109)$$

Balanco de Quantidade de Movimento Linear

Para um corpo material qualquer, este obedece um balanço de forças \mathbf{f} , baseado na Segunda Lei de Newton.

As forças atuantes podem ser decompostas em duas principais contribuições: uma chamada de força de contato (ou de superfície), que atua na superfície de controle do corpo. Outra chamada força de corpo, que atua sobre o volume do mesmo. Aplicando esta decomposição na Segunda Lei de Newton [36]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} = \int_V \mathbf{b} dV + \int_{\partial V} \mathbf{s}(\mathbf{n}) dA \quad (3.110)$$

Sendo a 3.110 um balanço de forças por unidade de volume. O campo vetorial \mathbf{b} representa as forças de corpo por unidade de volume que atuam no corpo material. O campo vetorial de tração $\mathbf{s}(\mathbf{n})$ é proveniente da Hipótese de Cauchy e representa a força por unidade de área exercida na superfície material. O Lema Fundamental de Cauchy afirma que o campo de tração $\mathbf{s}(\mathbf{n})$ pode ser substituído por um campo tensorial aplicado ao vetor normal \mathbf{n} . Isto é:

$$\mathbf{s}(\mathbf{n}) = \mathbf{T} \cdot \mathbf{n} \quad (3.111)$$

O tensor \mathbf{T} é chamado Tensor das Tensões de Cauchy. Substituindo 3.111 em 3.110:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} = \int_V \mathbf{b} dV + \int_{\partial V} \mathbf{T} \mathbf{n} dA \quad (3.112)$$

O Teorema da Divergência pode ser aplicado ao último termo do lado direito da 3.112:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} = \int_V \mathbf{b} dV + \int_V \nabla \cdot \mathbf{T} dV \quad (3.113)$$

Aplicando o Teorema da Localização e fazendo uso do operador derivada material para descrever a aceleração, tem-se que:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{b} \quad (3.114)$$

A 3.114 também é válida para uma mistura. Para apenas um constituinte, o seu balanço de quantidade de movimento linear deve contabilizar a influência da presença dos outros constituintes da mistura, bem como a influência de reações químicas. Postula-se então que para um constituinte i , o seu balanço de Q.M.L. é [1,3]:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho_i \mathbf{v}_i = \int_V \mathbf{b}_i dV + \int_V \nabla \cdot \mathbf{T}_i dV + \int_V (\mathbf{m}_i) dV \quad (3.115)$$

onde \mathbf{v}_i é a velocidade do constituinte, \mathbf{b}_i é a força de corpo por unidade de volume,

\mathbf{T}_i é o tensor parcial das tensões, \mathbf{j}_i é o termo fonte que contabiliza a produção de Q.M.L. devido a reações químicas e \mathbf{m}_i é o termo fonte de interação com outros constituintes. Usando o Teorema da Localização para escrever o balanço na forma diferencial:

$$\rho_i \frac{D\mathbf{v}_i}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{T}_i + \mathbf{b}_i + d_i \mathbf{j}_i + \mathbf{m}_i \quad (3.116)$$

Como \mathbf{j}_i e \mathbf{m}_i representam forças internas na mistura, uma condição necessária para satisfazer a 3.114 para uma mistura é que:

$$\sum_i (d_i \mathbf{j}_i + \mathbf{m}_i) = 0 \quad (3.117)$$

Uma teoria constitutiva apropriada é necessária para descrever os termos \mathbf{j}_i e \mathbf{m}_i , além do tensor parcial de tensões. Esses detalhes serão abordados mais adiante.

Balanço de Quantidade de Movimento Angular

O balanço de quantidade de movimento angular pode ser escrito para um corpo material da seguinte forma [36]:

$$\int_V \rho \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{v}} = \int_V \mathbf{r} \times \mathbf{b} dV + \int_{\partial V} \mathbf{r} \times \mathbf{s}(\mathbf{n}) dA \quad (3.118)$$

onde \mathbf{r} é um vetor posição relativo a um ponto de referência. Usando a 3.111:

$$\int_V \rho \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{v}} = \int_V \mathbf{r} \times \mathbf{b} dV + \int_{\partial V} \mathbf{r} \times \mathbf{T} \mathbf{n} dA \quad (3.119)$$

Usando um sistema cartesiano de coordenadas, os termos da 3.116 podem ser escritos como:

$$\mathbf{r} = \sum_i r_i \mathbf{e}_i \quad (3.120)$$

$$\dot{\mathbf{v}} = \sum_i \dot{v}_i \mathbf{e}_i \quad (3.121)$$

$$\mathbf{b} = \sum_i b_i \mathbf{e}_i \quad (3.122)$$

$$\mathbf{T} = \sum_{i,j} T_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \quad (3.123)$$

$$\mathbf{n} = \sum_i n_i \mathbf{e}_i \quad (3.124)$$

Substituindo 3.120-3.124 em 3.119 e projetando na direção e_1 :

$$\int_{\partial V} \sum_j (r_2 T_{3j} - r_3 T_{2j}) n_j dA + \int_V r_2 (b_3 - \rho \dot{v}_3) dV - \int_V r_3 (b_2 - \rho \dot{v}_2) dV = 0 \quad (3.125)$$

Aplicando o Teorema da Divergência ao primeiro termo da 3.125 e rearrumando:

$$\int_V r_2 (\nabla \cdot T_{3j} + b_3 - \rho \dot{v}_3) dV - \int_V r_3 (\nabla \cdot T_{2j} + b_2 - \rho \dot{v}_2) dV + \int_V (T_{32} - T_{23}) dV = 0 \quad (3.126)$$

Os dois primeiros termos da 3.126 são identicamente nulos pois satisfazem o balanço de quantidade de movimento linear na direção e_3 e e_2 respectivamente. Portanto:

$$\int_V (T_{32} - T_{23}) dV = 0 \quad (3.127)$$

Como a 3.127 é válida para qualquer volume material, o Teorema da Localização pode ser aplicado, levando a:

$$T_{32} = T_{23} \quad (3.128)$$

De modo análogo, ao projetar a 3.119 na direção e_2 e e_3 obtém-se:

$$T_{31} = T_{13} \quad \text{e} \quad T_{12} = T_{21} \quad (3.129)$$

Das Equações 3.128 e 3.129 conclui-se que:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T \quad (3.130)$$

Ou seja, para satisfazer o balanço de quantidade de movimento angular, é condição necessária e suficiente que o tensor das tensões seja simétrico. O resultado, representado pela 3.130 também é válido para uma mistura. Isto é, o tensor das tensões total da mistura tem que ser simétrico. Porém, é importante notar que o tensor parcial das tensões, que descreve o estado de tensões de um constituinte, não necessariamente tem que ser simétrico [35].

Conservação de Energia

Energia é uma propriedade termodinâmica de um corpo material que pode ser transferida através de interações com outros corpos. Os tipos de transferência de energia são: por contato - ações a pequenas distâncias; transferência mútua - entre sub-corpos do corpo material; transferência externa - por ação a distância. A parcela referente à transferência de energia por contato E_c pode ser escrita como [38]:

$$E_c = \int_{\partial V} \mathbf{s} \cdot \mathbf{v} dA + \int_{\partial V} h dA \quad (3.131)$$

onde h representa a interação calor. A parcela que contabiliza a transferência mútua E_m é postulada como:

$$E_m = \int_V \rho \mathbf{f}_m \cdot \mathbf{v} dV + \int_V \rho Q_m dV \quad (3.132)$$

e f_m é o vetor tração de interação mútua e Q_m a quantidade de calor proveniente da interação mútua. Por fim, a transferência externa E_e :

$$E_e = \int_V \rho \mathbf{f}_e \cdot \mathbf{v} dV + \int_V \rho Q_e dV \quad (3.133)$$

sendo \mathbf{f}_e é o vetor tração de interação externa e Q_e a interação calor proveniente do meio externo. Para um volume material, escreve-se o fluxo de calor h como:

$$h = -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \quad (3.134)$$

onde \mathbf{q} é o vetor fluxo de calor. A variação de energia e de um corpo material, levando em conta as parcelas de transferência por contato e externa é postulada como:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e dV = \int_{\partial V} \mathbf{v} \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) dA - \int_{\partial V} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dA + \int_V \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}_e dV + \int_V \rho Q_e dV \quad (3.135)$$

Aqui foi considerado que o somatório da transferência de energia mútua é nulo. Aplicando o Teorema da Divergência na 3.135:

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho e dV = \int_V \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbf{T}) dV - \int_V \nabla \cdot \mathbf{q} dV + \int_V \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}_e dV + \int_V \rho Q_e dV \quad (3.136)$$

Aplicando o Teorema da Localização:

$$\frac{D(\rho e)}{Dt} = \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbf{T}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}_e + \rho Q_e \quad (3.137)$$

A 3.137 pode ser reescrita, fazendo uso da equação da continuidade, 3.105, como:

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(u + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbf{T}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}_e + \rho Q_e \quad (3.138)$$

onde e foi escrito como a soma de uma parcela de energia interna u e uma parcela de energia cinética. Fazendo o produto interno da equação de balanço de quantidade de movimento linear, 3.114, pela velocidade \mathbf{v} e rearranjando, tem-se que:

$$\rho \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbf{T}) - \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} + \rho \mathbf{f}_e \cdot \mathbf{v} \quad (3.139)$$

Subtraindo a 3.139 da 3.138:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{T} : \nabla \mathbf{v} + \rho Q_e \quad (3.140)$$

A 3.139 é a equação de conservação da energia interna, também válida para uma mistura. Para um constituinte i da mistura, postula-se que o balanço de energia é dado por:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho_i e_i dV = \int_V \nabla (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{T}_i) dV - \int_V \nabla \cdot \mathbf{q}_i dV + \int_V \rho_i \mathbf{v}_i \cdot (\mathbf{f}_{e_i} + \mathbf{m}_i) dV \\ + \int_V \rho Q_{e_i} dV + \int_V d_i G_i dV \int_V \psi_i dV \end{aligned} \quad (3.141)$$

onde ψ_i representa a transferência de energia proveniente da interação com outro constituinte. Procedendo de forma análoga ao que foi feito anteriormente para se obter uma equação para a energia interna, tem-se que:

$$\rho_i \frac{Du_i}{Dt} + d_i(u_i + (\mathbf{j}_i - 1/2 \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{v}_i - G_i) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_i + \mathbf{T}_i : \nabla \mathbf{v}_i + \rho_i Q_{e_i} + \psi_i \quad (3.142)$$

Para satisfazer o balanço de energia da mistura é necessário que:

$$\sum_i \psi_i + d_i G_i + \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{v}_i = 0 \quad (3.143)$$

Desigualdade para a Entropia

Postula-se que a variação da entropia é causada por três contribuições: por um vetor fluxo de entropia (\mathbf{o}) - interação através de contato; produção de entropia \dot{s} ; variação devido a um campo o_e - a distância [38]. Assim:

$$\frac{ds}{dt} = \frac{d}{dt} \int_V \rho s dV = \int_{\partial V} -\mathbf{o} \cdot \mathbf{n} dA + \int_V (\dot{s} + o_e) dV \quad (3.144)$$

Aplicando o Teorema do Transporte de Reynolds e o Teorema da Divergência:

$$\int_V \rho \frac{Ds}{Dt} dV = \int_V -\nabla \cdot \mathbf{o} dV + \int_V (\dot{s} + o_e) dV \quad (3.145)$$

Usando o Teorema da Localização:

$$\rho \frac{Ds}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{o} + \dot{s} + o_e \quad (3.146)$$

e isolando o termo de produção de entropia, obtém-se:

$$\rho \frac{Ds}{Dt} + \nabla \cdot \mathbf{o} - o_e = \dot{s} \geq 0 \quad (3.147)$$

É necessário que a produção de entropia seja nula ou positiva para que a Segunda Lei da Termodinâmica seja satisfeita. Apesar da entropia gerada em cada constituinte i da mistura possa ser positiva ou negativa a soma da geração de entropia dos constituintes deve ser nula ou positiva [35]. Isto é:

$$\sum_i \dot{s}_i = \dot{s} \geq 0 \quad (3.148)$$

3.2.2 Teoria Constitutiva para Fluido Newtoniano

Aqui é apresentada uma maneira presente na literatura de se obter equações constitutivas para o constituinte fluido de uma mistura fluido e meio poroso rígido e saturado, sem considerar reações químicas. As equações constitutivas do constituinte fluido serão obtidas para fluidos newtonianos.

Considerando um meio poroso saturado por um fluido newtoniano f , a partir da Teoria de Mistura, a conservação de massa é dada pela 3.109:

$$\frac{D(\varepsilon\rho)}{Dt} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{v}_f) = 0 \quad (3.149)$$

A partir da 3.116, o balanço de quantidade de movimento linear para o constituinte fluido, sem considerar reações químicas, é dado por:

$$\rho_f \frac{D\mathbf{v}_f}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{T}_f + \mathbf{b}_f + \mathbf{m}_f \quad (3.150)$$

Embora não seja necessário, aqui será considerado que o tensor parcial das tensões \mathbf{T}_f é simétrico. O termo fonte de interação \mathbf{m}_f será obtido a partir de um escoamento com velocidade constante [6]. Isto leva a um tensor parcial de tensões isotrópico:

$$\mathbf{T}_f = -p_f \mathbf{I} \quad (3.151)$$

onde \mathbf{I} é o tensor identidade e p_f é a pressão do constituinte fluido na mistura. Um meio poroso idealizado pode ser assumido como um conjunto de placas paralelas, de acordo com a 3.3.

Na Mecânica do Contínuo clássica, o escoamento de um fluido newtoniano entre placas planas é obtido da 3.114 aplicando a equação constitutiva para este fluido:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D} \quad (3.152)$$

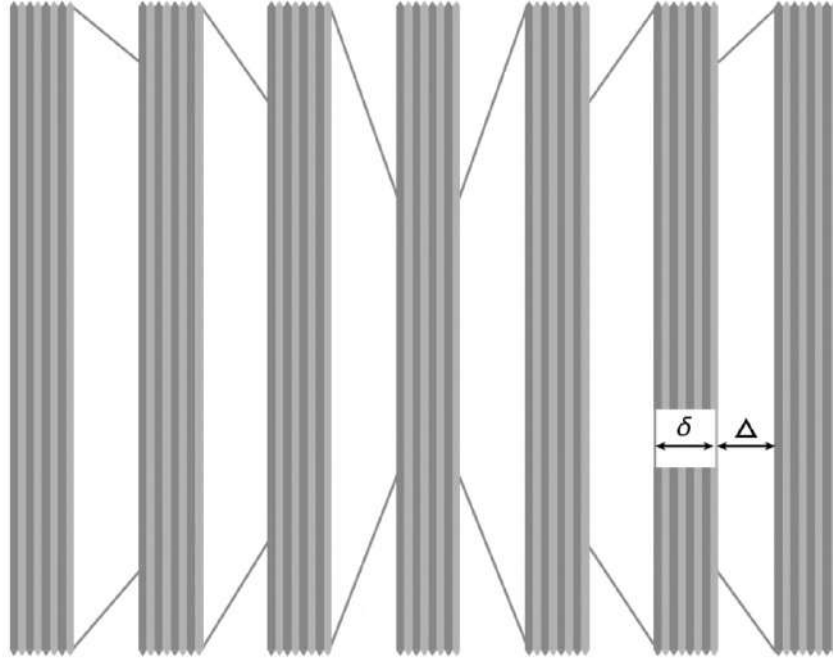


Figura 3.3: Idealização do Meio Poroso [4]

onde \mathbf{T} é o tensor das tensões do fluido, p a pressão mecânica, μ o primeiro coeficiente de viscosidade e \mathbf{D} a parte simétrica do gradiente de velocidade. Inserindo a 3.152 na 3.114 e supondo que o fluido é incompressível:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{b} \quad (3.153)$$

Aqui é feita a hipótese de que o escoamento é totalmente desenvolvido e em regime estacionário, o que elimina o termo a esquerda da 3.153. Também são desconsideradas forças de corpo, o que leva a:

$$\nabla p = \mu \nabla^2 \mathbf{v} \quad (3.154)$$

Como o perfil é desenvolvido, é assumido que o escoamento ocorre na direção x e o perfil varia em y . Isto é, $\mathbf{v} = u(y)$. Assim:

$$\frac{dp}{dx} = \mu \frac{d^2 u}{dy^2} \quad (3.155)$$

Com as condições de contorno de não deslizamento ($u = 0$ em $y = \Delta/2$) e simetria ($du/dy = 0$ em $y = 0$), a solução da 3.155 leva ao perfil:

$$u(y) = -\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} \left[\left(\frac{\Delta}{2} \right)^2 - y^2 \right] \quad (3.156)$$

A porosidade do meio poroso idealizado na 3.3 pode ser obtida analiticamente:

$$\varepsilon = \frac{\Delta}{\Delta + \delta} \quad (3.157)$$

A velocidade média é calculada:

$$\bar{v} = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} u(y) dy = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} -\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} \left[\left(\frac{\Delta}{2} \right)^2 - y^2 \right] dy \quad (3.158)$$

$$\bar{v} = -\frac{1}{12\mu} \frac{dp}{dx} \Delta^2 \quad (3.159)$$

A Lei de Darcy que relaciona a velocidade de percolação de um fluido que escoar através de um meio poroso é dada por:

$$-\varepsilon \frac{dp}{dx} = \frac{\varepsilon \mu}{K} \bar{v} \quad (3.160)$$

onde K é a permeabilidade do meio. Inserindo a 3.159 na 3.160:

$$\frac{K}{\varepsilon} = \frac{\Delta^2}{12} \quad (3.161)$$

A velocidade média \bar{v} pode então ser escrita em função da permeabilidade K como:

$$\bar{v} = -\frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx} \frac{K}{\varepsilon} \quad (3.162)$$

A força de interação sólido-fluido neste caso é a força que o sólido exerce sobre o fluido através do cisalhamento nas paredes. Esta força é dada por:

$$\mathbf{F} = -2 \int_A \mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_y dA = -2 \left. \frac{du}{dy} \right|_{y=-\frac{\Delta}{2}} A \mathbf{e}_x = \Delta \frac{dp}{dx} A \mathbf{e}_x \quad (3.163)$$

Mas também:

$$\mathbf{F} = \int_V \mathbf{m} dV \quad (3.164)$$

A força de interação neste caso pode ser considerada a mesma em todos os pontos da mistura. Assim:

$$\mathbf{F} = \mathbf{m} V = \Delta \frac{dp}{dx} A \mathbf{e}_x \quad (3.165)$$

onde o volume é dado por $V = (\Delta + \delta)A$. Isto implica em:

$$\mathbf{m} = \frac{\Delta}{\Delta + \delta} \frac{dp}{dx} \mathbf{e}_x = \varepsilon \frac{dp}{dx} \mathbf{e}_x \quad (3.166)$$

Combinando a 3.162 com a 3.166:

$$m_x = -\frac{\varepsilon^2 \mu}{K} v_x \quad (3.167)$$

A 3.167 pode ser extrapolada para:

$$\mathbf{m} = -\frac{\varepsilon^2 \mu}{K} \mathbf{v} \quad (3.168)$$

Dentro das hipóteses do problema, a 3.166 combinada com 3.150 leva a:

$$\nabla \cdot \mathbf{T}_f \cdot \mathbf{e}_x = -\varepsilon \frac{dp}{dx} \quad (3.169)$$

ou seja:

$$-\varepsilon p = -p_f \quad (3.170)$$

Baseado em observações empíricas, notou-se que a descrição da viscosidade do constituinte fluido ponderada diretamente pela fração de fluido na mistura (que neste caso é a própria porosidade) não é uma abordagem apropriada. É proposta a seguinte viscosidade μ_f para o constituinte fluido:

$$\mu_f = \varepsilon^2 \mu \quad (3.171)$$

onde μ é a viscosidade base do fluido. O tensor parcial das tensões é então escrito como:

$$\mathbf{T}_f = -\varepsilon p \mathbf{I} + 2\varepsilon^2 \mu \mathbf{D} \quad (3.172)$$

O conjunto de equações para o constituinte fluido é então escrito como:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{v}_f) = 0 \quad (3.173)$$

$$\varepsilon \rho \frac{D\mathbf{v}_f}{Dt} = -\nabla(\varepsilon p) + \nabla \cdot [\varepsilon^2 \mu (\nabla \mathbf{v}_f + \nabla \mathbf{v}_f^T)] - \frac{\varepsilon^2 \mu}{K} \mathbf{v}_f + \mathbf{b}_f \quad (3.174)$$

3.2.3 Teoria Constitutiva para Fluidos Não-Newtonianos

Taxa de dissipação

Esta abordagem é baseada no conceito de que o corpo material possui diversas “configurações naturais”. Uma maneira de descrever a evolução destas configurações naturais é exigindo que a função taxa de dissipação seja maximizada. Este não é um princípio fundamental e há outras maneiras de descrever o processo. Mudando as formas com a qual a energia é armazenada e as funções taxa de dissipação é possível

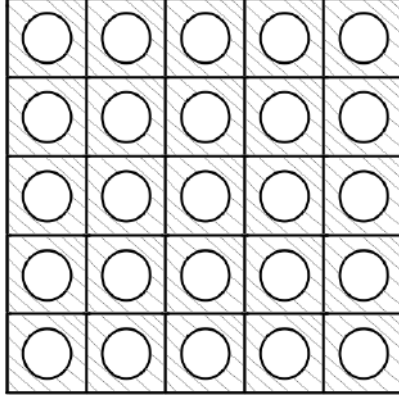


Figura 3.4: Segunda idealização para o meio poroso.

desenvolver modelos que podem descrever vários tipos de resposta com ou sem o requerimento de maximizar a taxa de dissipação. O que será abordado aqui será a escolha de maximizá-la [39]. O desenvolvimento, disponível no apêndice, leva ao termo de interação:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \mathbf{v}_f^n \quad (3.175)$$

De forma análoga ao caso newtoniano, o tensor parcial das tensões para o constituinte fluido pode ser escrito como:

$$\mathbf{T}_f = -\varepsilon p \mathbf{I} + 2\varepsilon \eta(\dot{\gamma}) \mathbf{D}_f \quad (3.176)$$

A equação de conservação de massa:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{v}_f) = 0 \quad (3.177)$$

E o balanço de quantidade de movimento linear:

$$\begin{aligned} \varepsilon \rho \frac{D\mathbf{v}_f}{Dt} = & -\nabla(\varepsilon p) + \nabla \cdot [\varepsilon k (\mathbf{D}_f : \mathbf{D}_f)^{n-1} \mathbf{D}_f] \\ & - \varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \mathbf{v}_f^n + \mathbf{b}_f \end{aligned} \quad (3.178)$$

Meio poroso como canais cilíndricos

Um procedimento semelhante ao da subseção anterior pode ser feito, mas com uma nova hipótese a respeito do meio poroso [5]. Considerando que este agora é formado por um meio sólido composto de canais cilíndricos vazados, conforme a 3.4.

Uma nova relação entre porosidade e permeabilidade será obtida a partir da Lei de Darcy. Para um fluido newtoniano, supondo que o fluido é incompressível, o escoamento é completamente desenvolvido e está em regime estacionário e não

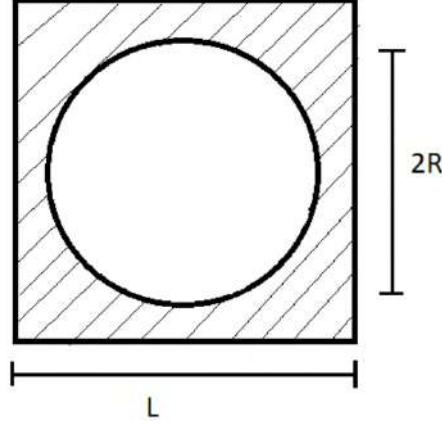


Figura 3.5: Proporções da segunda idealização do meio poroso [5].

há influência de forças de corpo, o balanço de quantidade de movimento linear em coordenadas cilíndricas se resume a:

$$\frac{dp}{dx} = \frac{\mu}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du}{dr} \right) \quad (3.179)$$

onde x é a direção do escoamento e r a direção radial no tubo. Integrando a 3.179:

$$r \frac{du}{dr} = \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} r^2 + c_1 \quad (3.180)$$

$$u(r) = \frac{1}{4\mu} \frac{dp}{dx} r^2 + c_1 \ln(r) + c_2 \quad (3.181)$$

Da condição de contorno de simetria e de não-deslizamento:

$$u(r) = -\frac{1}{4\mu} \frac{dp}{dx} [R^2 - r^2] \quad (3.182)$$

onde R é o raio do tubo. A velocidade média é calculada:

$$\bar{v} = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R u(r) 2\pi r dr = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R -\frac{1}{4\mu} \frac{dp}{dx} [R^2 - r^2] 2\pi r dr \quad (3.183)$$

$$\bar{v} = -\frac{R^2}{8\mu} \frac{dp}{dx} \quad (3.184)$$

Inserindo a 3.184 na Lei de Darcy, 3.160, obtém-se:

$$\frac{K}{\varepsilon} = \frac{R^2}{8} \quad (3.185)$$

onde a porosidade ε é obtida analiticamente a partir da idealização do meio poroso, 3.5:

$$\varepsilon = \frac{\pi R^2}{L^2} \quad (3.186)$$

Para um fluido *power-law*, o balanço de quantidade de movimento linear com as hipóteses do problema se resume a:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r k \left(\frac{du}{dr} \right)^n \right] \quad (3.187)$$

Integrando a 3.187 duas vezes e utilizando as condições de contorno de simetria e de não-deslizamento:

$$u(r) = \left[-\frac{1}{2k} \frac{dp}{dx} \right]^{\frac{1}{n}} \left[\frac{n}{n+1} \right] \left[R^{\frac{n+1}{n}} - r^{\frac{n+1}{n}} \right] \quad (3.188)$$

A velocidade média é obtida:

$$\bar{v} = \frac{1}{\pi R^2} \int_0^R u(r) 2\pi r dr = R^{\frac{n+1}{n}} \left[\frac{n}{3n+1} \right] \left[-\frac{dp}{dx} \frac{1}{2k} \right]^{\frac{1}{n}} \quad (3.189)$$

Utilizando a relação dada pela 3.185:

$$\bar{v} = \left[\frac{n}{3n+1} \right] \left[-\frac{dp}{dx} \frac{1}{2k} \right]^{\frac{1}{n}} \left[\frac{8K}{\varepsilon} \right]^{\frac{n+1}{2n}} \quad (3.190)$$

O termo de interação pode então ser obtido:

$$\varepsilon \frac{dp}{dx} = m_f = -\varepsilon 2k \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{\varepsilon^{\frac{n+1}{2}}}{8K} \bar{v}^n \quad (3.191)$$

A 3.191 pode ser extrapolada para:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon 2k \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{\varepsilon^{\frac{n+1}{2}}}{8K} \mathbf{v}_f^n \quad (3.192)$$

O que leva a um resultado semelhante ao obtido na primeira idealização.

Capítulo 4

Metodologia

4.1 Modelagem Matemática

A teoria que será utilizada para abordar o problema será a Teoria Contínua de Mistura. No caso de fluidos com comportamento reológico complexo, a parte deviatórica do tensor das tensões apresenta não-linearidades que são propagadas na Teoria de Média, gerando diversos termos envolvendo flutuações. Estes termos são de difícil interpretação física, o que torna a Teoria de Mistura mais atrativa para este caso.

Aqui se considera que a mistura é composta por dois constituintes: o constituinte sólido, que é a matriz porosa e o constituinte fluido. É feita a hipótese de que a matriz porosa é indeformável.

4.1.1 Conservação de Massa

O balanço de massa na forma local para um constituinte i é dado pela Equação 3.107:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{v}_i) = d_i \quad (4.1)$$

Para o constituinte fluido denotando pelo subíndice 1, o balanço de massa é escrito como:

$$\frac{\partial \varepsilon \rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_f \mathbf{v}_1) = d_1 \quad (4.2)$$

Onde $\rho_1 = \varepsilon \rho_f$ e o subíndice f denota a fase fluida. Para o constituinte sólido:

$$\frac{\partial (1 - \varepsilon) \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon (1 - \rho_f) \mathbf{v}_2) = d_2 \quad (4.3)$$

Onde $\rho_2 = (1 - \varepsilon) \rho_s$ e o subíndice s denota a fase sólida. Da hipótese de que a matriz porosa é indeformável, $\mathbf{v}_2 = 0$:

$$\frac{\partial(1-\varepsilon)\rho_s}{\partial t} = d_2 \quad (4.4)$$

Como a massa se conserva numa mistura (Eq. 3.108), o balanço de massa para o constituinte sólido é dado por:

$$\frac{\partial(\varepsilon-1)\rho_s}{\partial t} = d_1 \quad (4.5)$$

4.1.2 Balanço de Quantidade de Movimento Linear

Como não há quantidade de movimento para o constituinte sólido, o balanço será feito apenas para o constituinte fluido. Na forma diferencial e conservativa, o balanço é dado por:

$$\frac{\partial(\rho_1 \mathbf{v}_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1) = \nabla \cdot \mathbf{T}_1 + \mathbf{b}_1 + \mathbf{m}_1 \quad (4.6)$$

Utilizando $\rho_1 = \varepsilon \rho_f$ e desprezando as forças de corpo:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_f \mathbf{v}_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_f \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1) = \nabla \cdot \mathbf{T}_1 + \mathbf{m}_1 \quad (4.7)$$

A força de superfície que a fase fluida sofre em um volume elementar representativo devida aos constituintes nos REV's vizinhos pode ser descrita como uma parcela da tensão da mistura correspondente a sua porosidade de área ε_a . Portanto:

$$\mathbf{T}_1 = \varepsilon_a \mathbf{T} \quad (4.8)$$

Por hipótese, será considerada que a porosidade volumétrica ε é igual à porosidade de área ε_a . Além disso, o tensor parcial das tensões é decomposto em uma parcela esférica e outra deviatórica:

$$\mathbf{T}_1 = -\varepsilon p \mathbf{I} + \varepsilon \boldsymbol{\tau} \quad (4.9)$$

O balanço de Q.M.L. para a fase fluida é então:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_f \mathbf{v}_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_f \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1) = -\nabla(\varepsilon p) + \nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{\tau}) + \mathbf{m}_1 \quad (4.10)$$

4.1.3 Balanço de Espécies

A equação de transporte para a concentração volumétrica no constituinte fluido é escrita como:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} C_1) = \nabla \cdot \boldsymbol{\gamma}_1 + h_1 \quad (4.11)$$

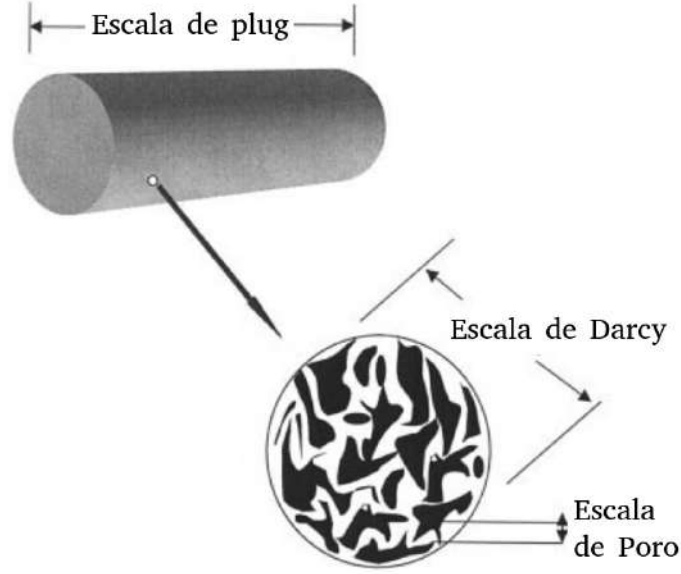


Figura 4.1: As diferentes escalas do problema [6].

Onde os três primeiros termos representam respectivamente o acúmulo, advecção e difusão de concentração. O último termo representa a transferência de espécies da fase fluida para a interface sólido-fluido. Isto é, descreve o quanto de reagente é consumido devido à reação. Este termo depende de mecanismos de reação na escala de poro e o gradiente de porosidade irá ditar o regime de reação.

De forma análoga à massa específica, a concentração do constituinte fluido é dada por $C_1 = \varepsilon C_f$ e inserindo na Equação 4.11:

$$\frac{\partial(\varepsilon C_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \varepsilon C_f) = \nabla \cdot \boldsymbol{\gamma}_1 + h_1 \quad (4.12)$$

Onde C_f é a concentração de mistura.

4.2 Acoplamento entre Escalas

4.2.1 Escalas do Problema

Conforme discutido anteriormente, descrever o problema em sua menor escala - a escala de poro, torna a solução computacionalmente inviável, até mesmo para problemas em domínios relativamente pequenos como é o caso de *plugs*. Uma alternativa é a solução do problema na escala de Darcy, sendo esta uma escala intermediária entre a escala de poro e de *plug*, conforme mostra a Figura 4.1.

A solução do problema na escala de Darcy requer informação proveniente da menor escala. Geralmente, esta informação é fornecida através de modelos de escala de poro, os quais dependem da estrutura da matriz porosa e estas variam com o tempo devido às reações químicas. Descrever tal estrutura e a sua transformação

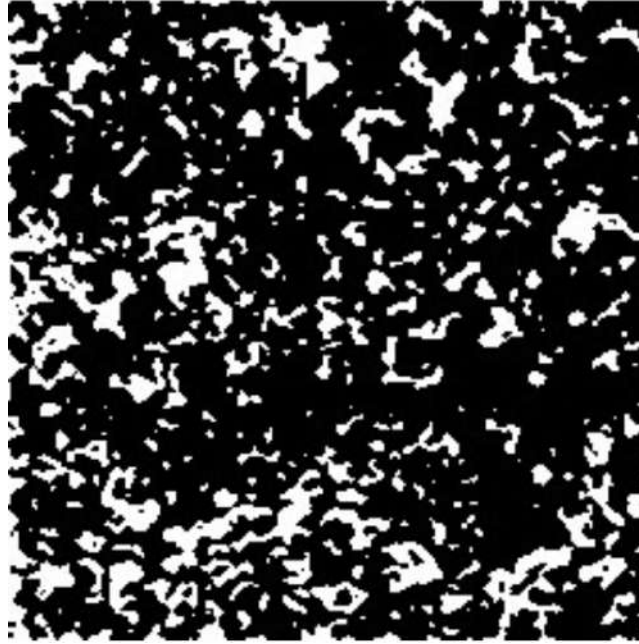


Figura 4.2: Microtomografia de uma rocha carbonática com porosidade média de 0,213. O espaço vazio está representado em branco [7].

não é simples, sendo esta uma desvantagem da modelagem na escala de Darcy.

4.2.2 Termo de Interação

Toda equação de balanço proveniente da Teoria de Mistura envolve pelo menos um termo que computa a influência que um constituinte causa aos demais. Portanto, fica claro que os principais pontos da Teoria de Mistura são: relacionar as propriedades físicas dos constituintes com as propriedades da fase em si, o que no caso de uma mistura sólido-fluido é relativamente simples e descrever da forma mais acurada possível a interação entre os constituintes.

Embora seja possível construir modelos analíticos para descrever o termo de interação \mathbf{m}_1 presente no balanço de quantidade de movimento linear, estes modelos consideram uma série de hipóteses, tais como: modelos simples de fluido; geometria do poro simples e bem definida; escoamento em equilíbrio no interior do poro. Em casos específicos estes modelos geram bons resultados do ponto de vista qualitativo. Entretanto, a fim de generalizar o modelo para *plugs* com geometria de poro complexa ou modelos de fluidos mais avançados, uma nova abordagem deve ser utilizada.

A matriz porosa proveniente de uma rocha carbonática, em escala de poro, possui uma característica tortuosa que faz com o que fluido escoe de maneira complexa, combinando cinemáticas viscométrica e extensional. Um exemplo de meio poroso em escala de poro está na Figura 4.2.

Ao escoar por um poro com geometria diferente da viscométrica clássica, como

no caso do cilindro ou entre placas planas, em que há variação de seção reta, qualquer fluido irá sofrer uma resistência maior pela presença do sólido, ainda que haja equivalência volumétrica entre as geometrias. Isto é esperado devido ao aumento da área de contato, além da influência de forças de pressão junto às forças viscosas.

Quando o fluido é newtoniano, apenas a constante material denominada viscosidade é necessária para definir o fluido. No caso de fluidos não newtonianos simples, puramente viscosos, a viscosidade deixa de ser uma constante e passa ser uma função que depende da taxa de deformação. Com medidas experimentais é possível caracterizar o fluido determinando uma curva de viscosidade. Ou seja, a função viscosidade é definida, a partir de experimentos viscométricos:

$$\eta = \hat{\eta}(\dot{\gamma}) \quad (4.13)$$

Quando o fluido é mais complexo, como é o caso dos viscoelásticos, mais de uma função caracteriza o fluido. São as funções materiais [42]. Nesse caso, além da função viscosidade, estão presentes os coeficientes de tensões normais. Entretanto, para um mesmo fluido, existe um conjunto de funções materiais para cada tipo de escoamento. Isto implica que a resposta do material viscoelástico depende da cinemática do escoamento. A função material de viscosidade para um escoamento livre de cisalhamento é definida como:

$$\eta_e(\dot{\epsilon}) = \frac{\tau_{yy} - \tau_{xx}}{\dot{\epsilon}} \quad (4.14)$$

Onde $\dot{\epsilon}$ é a taxa de alongação. O mesmo fluido pode ter um comportamento *shear-thinning* - em que a viscosidade é reduzida conforme a taxa de deformação aumenta, mas também *extensional-thickening* - em que a viscosidade extensional aumenta com a taxa de alongação.

Portanto, uma geometria representativa com variação de seção reta não apenas é capaz de retratar melhor a microescala a nível de poro como também fazer com que o termo de interação capture efeitos manifestados por fluidos reais e que não seriam levados em consideração nas idealizações viscométricas.

Uma alternativa viável aos modelos analíticos é obter o termo de interação de forma numérica. Neste contexto, o termo de interação pode ser entendido como uma força de arrasto. A presença do meio poroso causa uma resistência ao escoamento. Na microescala, esta resistência é a força das paredes do poro que atua no fluido. Considerando a hipótese de que a força de interação é a mesma em todo o REV [5]:

$$m_1 = \frac{\varepsilon \mathbf{f}}{V} \quad (4.15)$$

Onde \mathbf{f} é a força nas paredes e V o volume do poro. A partir da Equação 4.15, é possível alimentar as equações na escala de Darcy considerando diferentes geometrias

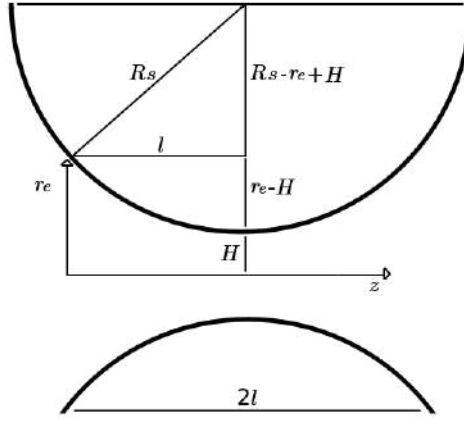


Figura 4.3: Geometria convergente-divergente e seus parâmetros.

representativas de poro e diversos modelos de fluido, sem que haja a necessidade de solução analítica.

4.2.3 Idealização da Geometria de Poro

Dois tipos de geometria idealizada serão utilizadas na obtenção do termo de interação: a geometria cilíndrica e a geometria convergente-divergente. No caso da geometria cilíndrica, esta contempla apenas o escoamento cisalhante, mas permite a avaliar a acurácia dos termos de interação analíticos, bem como gerar resultados para qualquer modelo de fluido. A geometria convergente-divergente contempla cinemática cisalhante e extensional, permitindo que fenômenos presentes em materiais viscoelásticos se manifestem devido a esforços de elongação, além de apresentar maior resistência ao escoamento, aspecto característico de um poro real.

A geometria cilíndrica foi definida a partir de um raio de poro médio tipicamente encontrado em rochas carbonáticas. O comprimento do poro l é proporcional ao raio de poro. Isto é:

$$l = i r_p \quad (4.16)$$

Onde i é um fator pré-determinado.

Em casos convergentes-divergentes, são necessários mais parâmetros para definir a geometria. A Figura 4.3 ilustra o canal convergente-divergente e seus principais parâmetros. Na figura, além do raio da entrada r_e e do comprimento do poro, estão a altura da garganta H e o raio da esfera R_{esf} .

A definição então é dada por um conjunto de três parâmetros: pela altura da garganta, pelo comprimento do poro e pelo raio de entrada. Porém, o canal convergente-divergente também pode ser construído a partir do espaço vazio entre duas esferas sólidas de mesmo raio. Neste caso, o conjunto de parâmetros que definem o canal é: altura da garganta, comprimento e raio da esfera que delimita a superfície do canal.

Logo, há duas maneiras de definir esta geometria. A relação entre o raio de entrada e o raio da esfera é dado pela Equação 4.17:

$$r_e = H + R_{esf} - \sqrt{R_{esf}^2 - l^2} \quad (4.17)$$

O parâmetro adimensional que quantifica o quanto a geometria é extensional é o grau de extensionalidade δ_e , que mede a redução percentual de seção reta na geometria e é dado por:

$$\delta_e = 1 - \frac{H}{r_e} \quad (4.18)$$

O conjunto de simulações realizadas em escala de poro considera cinco graus de extensionalidade: 0%, 20%, 40%, 60% e 80%. É importante ressaltar que o caso com $\delta_e = 0\%$ é o caso cilíndrico, onde não há nenhuma extensionalidade. Outro ponto importante é que não é possível alcançar um grau de extensionalidade de 100%. A comparação entre as geometrias é feita através da equivalência em volume.

Termo de Interação Numérico

Grande parte dos trabalhos que abordam problemas envolvendo meios porosos e aplicam modelos contínuos idealizam a escala de poro como arranjo de geometrias cilíndricas ou disposição de placas, não possuindo variações de seção reta. O escoamento nesses tipos de geometria apresenta caráter puramente viscométrico, o que no caso do escoamento em meios porosos não contempla o tipo de escoamento típico encontrado neste meio.

O escoamento em meios porosos apresenta não somente propriedades de escoamento cisalhante, mas também características extensionais provocadas pelos seguidos esforços de expansão e compressão os quais o fluido é submetido quando escoar nos interstícios dos poros, os quais apresentam variações de seção reta.

A coexistência dos comportamentos cisalhante e extensional confere uma grande complexidade à modelagem. O caráter extensional adiciona ao escoamento efeitos elásticos, surgimento de tensões normais, aumento da resistência ao escoamento entre outros efeitos de grande influência principalmente em fluidos viscoelásticos.

Na grande maioria das aplicações reais nessas condições, o aspecto extensional domina o escoamento [43]. Por isso é importante que a modelagem da escala de poro permita a reprodução de características extensionais de modo que a conseguir mensurar tais efeitos, além de realizar comparações em diferentes níveis de extensão e com o caso de poro cilíndrico. Logicamente, há o interesse principalmente em entender como mudanças na geometria de poro afetam o termo de interação sólido-fluido.

As simulações em escala de poro utilizam além da geometria cilíndrica, canais

convergentes-divergentes, como uma tentativa de contemplar as características extensionais. O modelo para criação dos canais convergente-divergentes é baseado nas seguintes suposições:

1. A geometria cilíndrica é tratada como o caso base. Os canais convergentes-divergentes são obtidos modificando o caso base, variando o raio de seção reta ao longo do comprimento da geometria. Há a diminuição gradual do raio até o centro da geometria e posteriormente um aumento até que se atinja novamente o raio de entrada. Por isso há a denominação de convergente-divergente, uma vez o fluido ao escoar sofre uma compressão seguida de uma expansão.

2. As geometrias convergentes-divergentes possuem o mesmo volume que seu caso cilíndrico correspondente. Ao garantir que a mesma quantidade de fluido escoe em cada geometria, a conservação do volume permite comparar canais convergentes-divergentes de diferentes níveis de extensionalidade e também o caso cilíndrico, medindo sua influência no termo de interação numérico pelos diferentes valores de força nas paredes de cada geometria.

3. Os parâmetros para as geometrias convergentes-divergentes estão ilustrados na (4.3), que mostra um corte longitudinal ao longo do eixo Z. O nível de extensionalidade é mensurado por um parâmetro δ dado pela Equação (4.19). O parâmetro H é o raio de seção reta no centro da geometria na máxima contração, enquanto que r_p é o raio de entrada não da geometria convergente-divergente, mas do cilindro equivalente. O fator δ é responsável pela medida da porcentagem de diminuição do raio de seção reta em relação ao raio da geometria cilíndrica equivalente.

$$\delta = 1 - \frac{H}{r_p} \quad (4.19)$$

Da parametrização obtida na Figura (4.3) é possível obter uma equação para o raio de seção reta ao longo do canal, r , através de relações puramente geométricas dos parâmetros:

$$R_{esf}^2 = (l - z)^2 + (R_{esf} - r + H)^2 \quad (4.20)$$

$$r = H + R_{esf} - \sqrt{R_{esf}^2 - (l - z)^2} \quad (4.21)$$

com R_{esf} o raio de uma circunferência cujo arco define o canal convergente-divergente. O arco é traçado ao longo do comprimento do poro, definido como sendo igual a $2l$.

De posse de uma extensão para o raio de seção reta, é possível obter a expressão para o volume do canal ao integrar a função πr^2 ao longo do comprimento do canal. Considerando a simetria do canal com relação ao seu centro:

$$V = 2 \int_0^l \pi r^2 dz \quad (4.22)$$

$$V = 2\pi l(A + B + C + D) \quad (4.23)$$

com os termos A,B,C e D sendo dados por:

$$A = ((H + R_{esf})^2 + R_{esf}^2) \quad (4.24)$$

$$B = -(H + R_{esf})l\sqrt{R_{esf}^2 - l^2} \quad (4.25)$$

$$C = (H + R_{esf})R_{esf}^2 \operatorname{atan} \left(\frac{l}{\sqrt{R_{esf}^2 - l^2}} \right) \quad (4.26)$$

$$D = -\frac{l^3}{3} \quad (4.27)$$

Da expressão para o volume é possível obter canais convergente-divergentes com diferentes níveis de extensão, conservando o volume de um cilindro equivalente. Em todas as geometrias foi estabelecido como padrão que o comprimento $2l$ do poro é dez vezes o valor do raio do cilindro equivalente.

Desta forma, fixos tanto o volume como o comprimento de poro, os parâmetros a serem determinados para a obtenção do canal convergente-divergente são a altura da seção reta no centro do poro H e o raio da entrada do canal. O primeiro é calculado de acordo com o nível de extensão do canal utilizando a Eq. (4.19), lembrando que r_p é o raio do cilindro. O segundo parâmetro é obtido ao resolver iterativamente a Equação (4.23) obtendo o valor de R_{esf} que atende ao requisito do volume da geometria cilíndrica equivalente. Em seguida, o raio da entrada do canal é obtido ao inserir R_{esf} na Eq. (4.21).

A Figura (4.4) ilustra uma comparação entre as geometrias cilíndrica e convergente-divergente com nível de extensão de 20% ($\delta = 0.2$), desenvolvidas para a escala de poro. É possível observar que os canais possuem o mesmo comprimento $2L$, além de regiões de entrada e saída de comprimento D , com geometria cilíndrica.

As variações da seção reta ao longo do escoamento fazem com que este não atinja o modo de escoamento totalmente desenvolvido e por isso as extensões são implementadas. O comprimento D foi estipulado de modo a permitir que o fluido atinja o escoamento totalmente desenvolvido na entrada e na saída, ajustando assim a condição de contorno das simulações. O valor adotado para todas as geometrias usadas neste trabalho para o comprimento D foi de 50% do comprimento $2L$ da

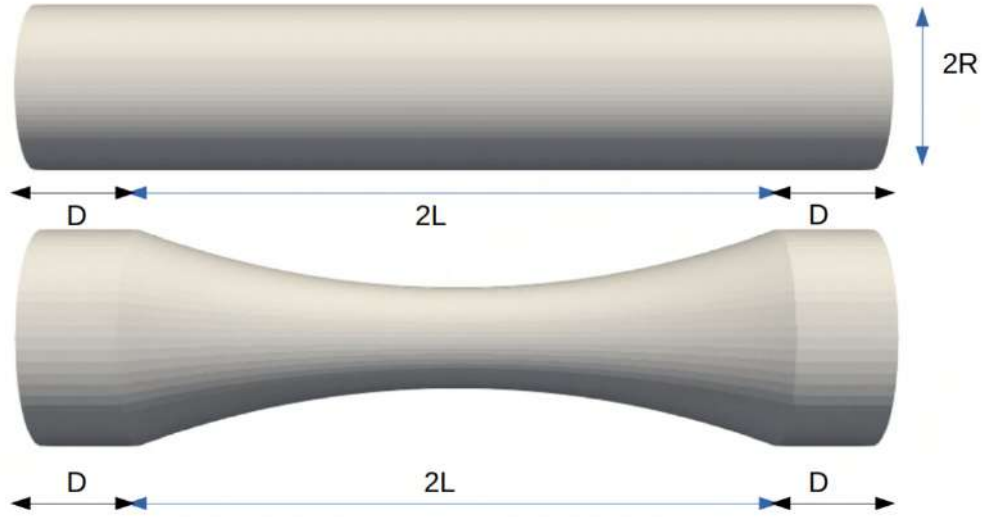


Figura 4.4: Comparação entre geometrias de poro: cilíndrico e convergente-divergente com $\delta = 0.2$.

geometria de poro.

O cálculo da força total nas paredes de geometria obtido das simulações de escala de poro é realizado somente na região que compreende o comprimento $2L$ do canal, não considerando as regiões de extensão de entrada e saída. Alguns testes foram realizados com diferentes extensões de modo a avaliar a influência na força nas paredes da geometria. Foi observado que até comprimentos de extensão de aproximadamente 60%, não há influência significativa no valor de força encontrando, em comparação ao uso de geometrias sem extensão. Dessa forma, a adoção de 50% como comprimento padrão para as extensões configura-se como um critério válido.

A Figura (4.5) mostra seções longitudinais das diferentes arquiteturas de poro usadas para o grupo de simulações realizadas, desde o caso cilíndrico até o nível de extensão mais severa, as quais serão testadas sob diferentes regimes de escoamento e modelos reológicos de interesse.

4.2.4 Relações entre Propriedades e Estrutura do Meio Poroso

Diversas relações entre porosidade e permeabilidade são encontradas na literatura. A mais famosa e amplamente utilizada é a de Carman-Kozeny [44]:

$$K = \frac{g}{k_e S_0^2} \frac{\varepsilon^3}{(1 - \varepsilon)^2} \quad (4.28)$$

Onde g é a aceleração gravitacional, k_e é uma constante experimental e S_0 é a área superficial específica. Esta relação é válida para um conjunto restrito de meios

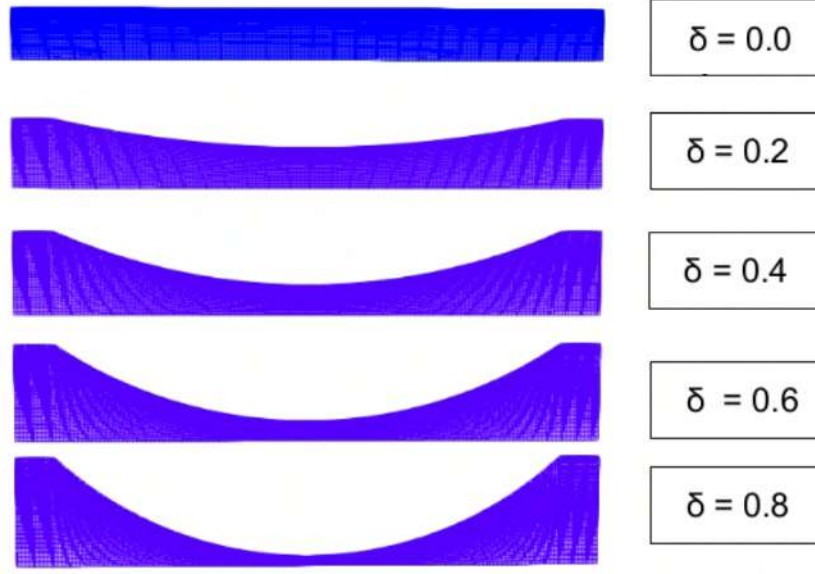


Figura 4.5: Efeito dos níveis de extensionalidade na geometria de poro.

porosos, como areia, solo e argila.

Diversos trabalhos estendem para meios porosos de outra natureza e alguns sugerem novas relações de porosidade e permeabilidade. Estes modelos são construídos para a permeabilidade clássica de Darcy, a qual independe do fluido, do gradiente de pressão ou do tamanho do domínio, apenas da natureza da matriz porosa. Esta hipótese é válida para o caso de fluidos newtonianos. Quando o fluido é não-newtoniano, não é possível desacoplar o fluido do meio, sendo a permeabilidade de fato uma propriedade dependente não só da natureza da rocha como também do fluido. Martins-Costa et al. [45] descreveram a permeabilidade para o caso acoplado de um fluido *power-law* e meio poroso a partir de uma perspectiva de Teoria de Mistura. De fato, ao observar a solução para o termo de interação analítico A.114 para um fluido *power-law*, é possível reescreve-la de forma análoga a solução newtoniana 3.168 utilizando uma permeabilidade modificada \bar{K} :

$$\mathbf{m}_1 = -\frac{\varepsilon^2 k}{\bar{K}} \mathbf{v} \quad (4.29)$$

Conforme ocorre o processo de dissolução, toda a estrutura do meio poroso é alterada, impactando em sua porosidade e permeabilidade. Uma relação derivada de Carman-Kozeny pode ser utilizada para descrever a evolução da permeabilidade [46]:

$$\frac{K}{K_0} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \left(\frac{\varepsilon(1 - \varepsilon_0)}{\varepsilon_0(1 - \varepsilon)} \right)^{2\beta} \quad (4.30)$$

Onde o subíndice 0 denota a propriedade no estado inicial e β é um parâmetro de

ajuste que depende da natureza da matriz porosa. O modelo 4.30 utiliza a hipótese de permeabilidade isotrópica.

Outras duas propriedades importantes que variam durante o processo de dissolução são o raio de poro r_p e a área interfacial disponível para reação a_v :

$$\frac{r_p}{r_0} = \sqrt{\frac{K\varepsilon_0}{K_0\varepsilon}} \quad (4.31)$$

$$\frac{a_v}{a_0} = \frac{\varepsilon r_0}{\varepsilon_0 r_p} \quad (4.32)$$

4.2.5 Coeficiente de Transferência de Massa

Na equação de conservação de espécies 4.12, o termo h_1 referente à transferência de espécies da fase fluida para a interface sólido-fluido deve ser modelado. Uma alternativa é utilizar um coeficiente de transferência de massa k_c . O coeficiente depende da estrutura dos poros, taxa de reação e velocidade do fluido. Para o escoamento desenvolvido em um poro reto de seção reta, uma boa aproximação para o número de Sherwood é [47]:

$$Sh = \frac{2k_c r_p}{D_m} = Sh_\infty + b Re_p^{1/2} Sc^{1/3} \quad (4.33)$$

Onde D_m é a difusividade molecular, Sh_∞ é o número de Sherwood assintótico, Re_p é o número de Reynolds no poro, Sc é o número de Schmidt e b é uma constante que depende da estrutura do meio poroso.

4.2.6 Coeficientes de Dispersão

Para quantificar a difusão de espécies na Equação 4.12, o vetor de fluxo $\boldsymbol{\gamma}_1$ pode ser descrito pela Lei de Fick [48]:

$$\boldsymbol{\gamma}_1 = \mathbf{D}_e \cdot \nabla C_1 \quad (4.34)$$

Onde \mathbf{D}_e é o tensor difusão efetivo. Com a hipótese de um meio poroso homogêneo e isotrópico, o tensor dispersão é caracterizado por duas componentes independentes: o coeficiente de dispersão longitudinal, D_{eX} e o coeficiente de dispersão transversal, D_{eT} [6]. Ambos coeficientes são iguais na ausência de escoamento, quando a dispersão do soluto ocorre apenas devido à difusão molecular:

$$D_{eX} = D_{eT} = \alpha_{os} D_m \quad (4.35)$$

Sendo α_{os} uma constante que depende do meio poroso e D_m o coeficiente de

difusão.

Para uma rede de poros bem conectada e para alguns tipos de meios porosos, um modelo possível é dado pela relação dos coeficientes de dispersão longitudinal e transversal com o número de Péclet no poro Pe_p :

$$D_{eX} = \alpha_{os}D_m + \lambda_X D_m Pe_p \quad (4.36)$$

$$D_{eT} = \alpha_{os}D_m + \lambda_T D_m Pe_p \quad (4.37)$$

Onde λ_X e λ_T são coeficientes que dependem da estrutura do meio poroso e o número de Péclet no poro é definido a partir do diâmetro hidráulico d_h como:

$$Pe_p = \frac{|\mathbf{v}|d_h}{D_m} \quad (4.38)$$

4.2.7 Permeabilidade e Permeabilidade Modificada

Para casos de escoamento puramente viscométrico através de poros idealizados, é possível calcular a viscosidade característica do fluido e partir da mobilidade, obter a permeabilidade clássica. Na Figura [4.6] está a ilustração do volume elementar representativo para o caso de poro constituído por canal cilíndrico.

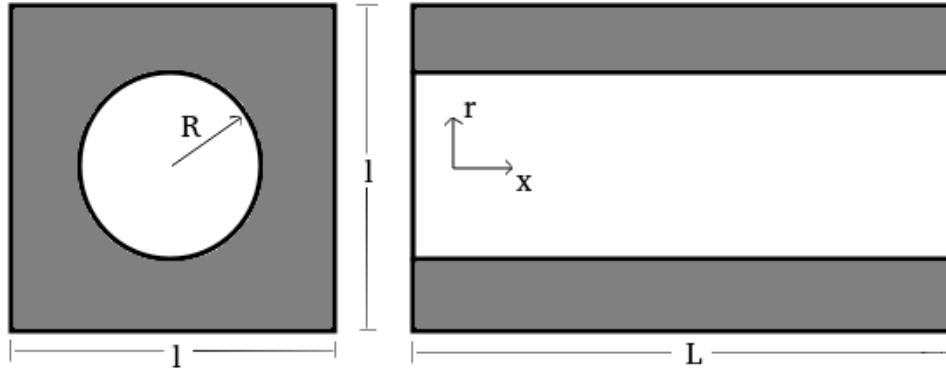


Figura 4.6: Visão frontal e lateral do volume elementar representativo.

A partir da geometria idealizada e seus parâmetros, a porosidade volumétrica é escrita como:

$$\varepsilon_v = \frac{\pi R^2 L}{l^2 L} = \frac{\pi R^2}{l^2} \quad (4.39)$$

Neste caso, a porosidade superficial é igual a volumétrica:

$$\varepsilon_v = \varepsilon_s = \varepsilon \quad (4.40)$$

Para a obtenção do termo de interação \mathbf{m}_f analítico, o balanço de quantidade de movimento linear é reduzido, pela hipótese de equilíbrio no poro, para:

$$\mathbf{m}_f = \varepsilon \nabla p \quad (4.41)$$

Hipótese: a velocidade do fluido u é dada por:

$$u = \frac{Q}{\pi R^2} \quad (4.42)$$

Onde Q é a vazão de fluido. A vazão calculada pela velocidade de Darcy u_s é a mesma calculada pela velocidade do fluido. Portanto:

$$u_s l^2 = u \pi R^2 \quad (4.43)$$

O que leva a:

$$u_s = \varepsilon u \quad (4.44)$$

O que verifica a relação usada anteriormente. A equação de Darcy escrita em função da velocidade do fluido é dada por:

$$\varepsilon \mathbf{u} = -\frac{1}{\eta} \mathbf{K} \cdot \nabla p \quad (4.45)$$

O gradiente de pressão é escrito como:

$$\nabla p = -\varepsilon \eta \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{u} \quad (4.46)$$

A partir da hipótese de equilíbrio no poro e o balanço de Q.M.L. reduzido dado pela Equação [4.41]:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon^2 \eta \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{u} \quad (4.47)$$

O termo de interação obtido pode ser escrito de forma geral como:

$$\mathbf{m}_f = \mathbf{X} \cdot \mathbf{u} \quad (4.48)$$

Onde no caso de fluidos newtonianos, \mathbf{X} não depende de \mathbf{u} .

Para o REV considerado, fluido newtoniano e com a hipótese de escoamento desenvolvido e em regime permanente:

$$v(r) = \frac{1}{4\eta} \frac{dp}{dx} (r^2 - R^2) \quad (4.49)$$

A vazão é dada por:

$$Q = -\frac{\pi R^4}{8\eta} \frac{dp}{dx} \quad (4.50)$$

A velocidade é então:

$$u = \frac{Q}{\pi R^2} = -\frac{R^2}{8\eta} \frac{dp}{dx} \quad (4.51)$$

Reescrevendo em função de $\frac{dp}{dx}$:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{8\eta}{R^2} u \quad (4.52)$$

A partir da Equação [4.41]:

$$m_f = -\varepsilon \frac{8\eta}{R^2} u \quad (4.53)$$

Comparando as equações [4.47] e [4.53], a permeabilidade é obtida:

$$K = \frac{\varepsilon R^2}{8} \quad (4.54)$$

Para casos *power-law*, o balanço de Q.M.L. com a hipótese de equilíbrio no poro [4.41] é válida e o termo de interação escrito de forma geral [4.48] também. Porém, \mathbf{X} pode depender de \mathbf{u} . A equação de Darcy pode ser escrita como:

$$\varepsilon \mathbf{u} = -\mathbf{M} \cdot \nabla p \quad (4.55)$$

Com o gradiente de pressão em evidência:

$$\nabla p = -\varepsilon \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{u} \quad (4.56)$$

A partir do balanço de Q.M.L. com a hipótese de equilíbrio [4.41]:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon^2 \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{u} \quad (4.57)$$

Portanto, neste caso:

$$\mathbf{X} = -\varepsilon^2 \mathbf{M}^{-1} \quad (4.58)$$

A função viscosidade para o fluido *power-law* é:

$$\eta = k \dot{\gamma}^{n-1} \quad (4.59)$$

Considerando no interior do poro escoamento completamente desenvolvido e em regime permanente e considerando $-dp/dx = \Delta p/L$, o perfil de velocidade é:

$$v(r) = \frac{n}{n+1} \left(\frac{1}{2k} \frac{\Delta p}{L} \right)^{\frac{1}{n}} \left(R^{\frac{n+1}{n}} - r^{\frac{n+1}{n}} \right) \quad (4.60)$$

A vazão é então:

$$Q = \pi \frac{n}{3n+1} \left(\frac{1}{2k} \frac{\Delta p}{L} \right)^{\frac{1}{n}} R^{\frac{3n+1}{n}} \quad (4.61)$$

Obtendo a velocidade:

$$u = \frac{Q}{\pi R^2} = \frac{n}{3n+1} \left(\frac{1}{2k} \frac{\Delta p}{L} \right)^{\frac{1}{n}} R^{\frac{n+1}{n}} \quad (4.62)$$

Escrevendo com o gradiente de pressão isolado:

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{3n+1}{n} \frac{1}{R^{n+1}} 2k u^n \quad (4.63)$$

A partir da simplificação do balanço de Q.M.L. [4.41]:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{2k}{R^{n+1}} |\mathbf{u}|^{n-1} \mathbf{u} \quad (4.64)$$

Para o caso de $n = 1$, o caso newtoniano é recuperado:

$$\mathbf{m}_f = \frac{-8\varepsilon k}{R^2} \mathbf{u} \quad (4.65)$$

Assim, \mathbf{X} é obtido:

$$\mathbf{X} = -\varepsilon \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{2k}{R^{n+1}} |\mathbf{u}|^{n-1} \mathbf{I} \quad (4.66)$$

Relacionando com a mobilidade \mathbf{M} [4.58]:

$$\mathbf{M} = -\varepsilon^2 \mathbf{X}^{-1} \quad (4.67)$$

$$\mathbf{M} = \varepsilon \left(\frac{n}{3n+1} \right)^n \frac{R^{n+1}}{2k} \frac{1}{|\mathbf{u}|^{n-1}} = \varepsilon \left(\frac{n}{3n+1} \right)^n \frac{R^2}{2k} \frac{1}{\frac{|\mathbf{u}|^{n-1}}{R^{n-1}}} \quad (4.68)$$

$$\mathbf{M} = \frac{\varepsilon \left(\frac{n}{3n+1} \right)^n \frac{R^2}{2}}{\frac{k|\mathbf{u}|^{n-1}}{R^{n-1}}} = \frac{K}{\eta_c} \quad (4.69)$$

Onde η_c é uma viscosidade característica do poro baseada em sua escala $k \left(\frac{u}{R} \right)^{n-1}$.

A Equação [4.54] pode ser escrita como:

$$R^{n+1} = \left(\frac{8K}{\varepsilon} \right)^{\frac{n+1}{2}} \quad (4.70)$$

Inserindo [4.70] em [4.66]:

$$X = -\varepsilon \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n 2k \left(\frac{\varepsilon}{8K} \right)^{\frac{n+1}{2}} |\mathbf{u}|^{n-1} \quad (4.71)$$

No caso de fluido newtoniano ($n = 1$):

$$X = -\varepsilon^2 \frac{k}{K} \quad (4.72)$$

Inserindo [4.54] em [4.69]:

$$M = \frac{4K \left(\frac{n}{3n+1} \right)^n}{\frac{k|\mathbf{u}|^{n-1}}{R^{n-1}}} = \frac{K}{\frac{1}{4} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n k \left(\frac{u}{R} \right)^{n-1}} \quad (4.73)$$

Portanto, a viscosidade característica é:

$$\eta_c = \frac{1}{4} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n k \left(\frac{u}{R} \right)^{n-1} \quad (4.74)$$

O termo de interação escrito em função da permeabilidade é:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon \left(\frac{\varepsilon}{8K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n k |\mathbf{u}|^{n-1} \mathbf{u} \quad (4.75)$$

Caso Cartesiano

Neste caso, o REV é o indicado na Figura [4.7].

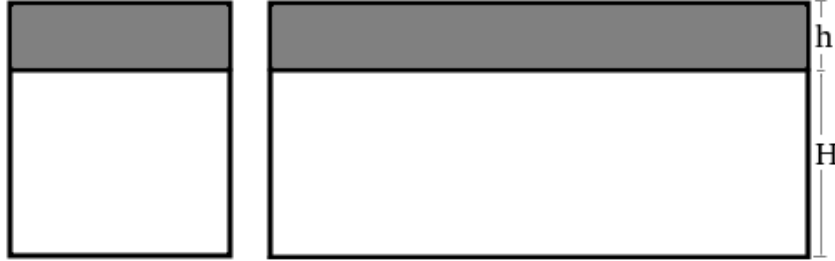


Figura 4.7: Visão frontal e lateral do volume elementar representativo.

A porosidade volumétrica é dada por:

$$\varepsilon = \frac{H}{H+h} \quad (4.76)$$

E a relação permeabilidade-porosidade:

$$\frac{K}{\varepsilon} = \frac{1}{3} \left(\frac{H}{2} \right)^2 \quad (4.77)$$

O termo de interação escrito em função da permeabilidade é:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n k |\mathbf{u}|^{n-1} \mathbf{u} \quad (4.78)$$

A mobilidade é escrita como:

$$M = \frac{K}{\eta_c} \quad (4.79)$$

Onde a viscosidade característica é:

$$\eta_c = \frac{1}{3} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n k \left(\frac{u}{\frac{H}{2}} \right)^{n-1} \quad (4.80)$$

Taxa de Deformação

A partir da permeabilidade calculada na Eq. (4.54), a viscosidade característica para o caso cilíndrico (4.74) e para o caso cartesiano (4.80) podem ser reescritas, respectivamente, como:

$$\eta_c = k \frac{u^{n-1}}{\left[4^{\frac{1}{n-1}} \left(\frac{n}{3n+1} \right)^{\frac{n}{n-1}} \sqrt{\frac{8K}{\varepsilon}} \right]^{n-1}} \quad (4.81)$$

$$\eta_c = k \frac{u^{n-1}}{\left[3^{\frac{1}{n-1}} \left(\frac{n}{2n+1} \right)^{\frac{n}{n-1}} \sqrt{\frac{3K}{\varepsilon}} \right]^{n-1}} \quad (4.82)$$

O modelo de viscosidade *power-law* é dado por:

$$\eta = k(\dot{\gamma})^{n-1} \quad (4.83)$$

A taxa de deformação é explicitada:

$$\dot{\gamma} = \left(\frac{\eta}{k} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (4.84)$$

As equações para a taxa de deformação entre REVs para os casos cilíndrico e cartesiano são então obtidas respectivamente, inserindo (4.81) e (4.82) em (4.84):

$$\dot{\gamma}_{\text{cilindro}} = \frac{u}{4^{\frac{1}{n-1}} \left(\frac{n}{3n+1} \right)^{\frac{n}{n-1}} \sqrt{\frac{8K}{\varepsilon}}} \quad (4.85)$$

$$\dot{\gamma}_{\text{cartesiano}} = \frac{u}{3^{\frac{1}{n-1}} \left(\frac{n}{2n+1} \right)^{\frac{n}{n-1}} \sqrt{\frac{3K}{\varepsilon}}} \quad (4.86)$$

4.3 Modelo na Forma Adimensional para um Fluido *Power-Law*

4.3.1 Variáveis e Equações Adimensionais

Considerando que o termo de interação é obtido de forma analítica com as devidas hipóteses, dado pela Equação A.114 e desconsiderando forças de corpo, o balanço de quantidade de movimento linear é:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\varepsilon\rho_f\mathbf{v}_1)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_f\mathbf{v}_1\mathbf{v}_1) = & -\nabla(\varepsilon p) + \nabla \cdot [\varepsilon k(\mathbf{D}_1 : \mathbf{D}_1)^{n-1}\mathbf{D}_1] \\ & - \varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \mathbf{v}_1^n \end{aligned} \quad (4.87)$$

A taxa de reação $R(C_s)$ é escrita em função do coeficiente de transferência de massa k_c :

$$R(C_s) = k_c(C_f - C_s) \quad (4.88)$$

Onde C_s é a concentração de ácido na interface sólido-fluido. A equação de conservação de espécies é então dada por:

$$\frac{\partial(\varepsilon C_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\varepsilon C_f) = \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{D}_e \cdot \nabla C_f) - k_c a_v (C_f - C_s) \quad (4.89)$$

Para o caso de cinética de primeira ordem, C_s é função de C_f [6]:

$$C_s = \frac{C_f}{\left(1 + \frac{k_s}{k_c}\right)} \quad (4.90)$$

Sendo k_s a constante da taxa de reação superficial. A partir da taxa de reação e do poder de dissolução do ácido, α , é obtido o termo de transferência de massa para o balanço de massa do sólido:

$$\frac{\partial[(\varepsilon - 1)\rho_s]}{\partial t} = d_1 = R(C_s)a_v\alpha = k_c a_v \alpha (C_f - C_s) \quad (4.91)$$

Considerando que a massa específica do sólido é constante:

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} = \frac{d_1}{\rho_s} = \frac{R(C_s)a_v\alpha}{\rho_s} \quad (4.92)$$

Para o balanço de massa para o fluido:

$$\frac{\partial\varepsilon\rho_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho_f\mathbf{v}_1) = d_1 = R(C_s)a_v\alpha \quad (4.93)$$

Considerando que massa específica do fluido é constante:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{v}_1) = \frac{d_1}{\rho_f} = \frac{R(C_s)a_v\alpha}{\rho_f} \quad (4.94)$$

Inserindo 4.92 em 4.94:

$$\frac{R(C_s)a_v\alpha}{\rho_s} + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{v}_1) = \frac{R(C_s)a_v\alpha}{\rho_f} \quad (4.95)$$

Por fim, a Equação 4.95 é reescrita como:

$$R(C_s)a_v\alpha \left(\frac{1}{\rho_s} - \frac{1}{\rho_f} \right) + \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{v}_1) = 0 \quad (4.96)$$

Introduzindo as variáveis adimensionais:

$$v^* = \frac{v}{v_0} \quad \rho^* = \frac{\rho}{\rho_0} \quad t^* = \frac{t}{\dot{\gamma}_c} = \frac{t}{\frac{r_0}{v_0}} \quad K^* = \frac{K}{K_0} \quad g^* = \frac{g}{g_0} \quad (4.97)$$

$$p^* = \frac{p - p_e}{\frac{\eta_c v_0 r_0}{K_0}} \quad \tau^* = \frac{\tau}{\frac{\eta_c v_0 r_0}{K_0}} \quad \nabla^* = r_0 \nabla \quad C_f^* = \frac{C_f}{C_0} \quad C_s^* = \frac{C_s}{C_0} \quad (4.98)$$

$$a_v^* = \frac{a_v}{a_0} \quad r_p^* = \frac{r_p}{r_0} \quad \rho_s^* = \frac{\rho_s}{\rho_{0s}} \quad x^* = \frac{x}{L} \quad y^* = \frac{y}{H} \quad (4.99)$$

Onde v_0 é a velocidade na entrada do domínio, ρ_0 é a massa específica de referência para o fluido, $\dot{\gamma}_c$ é a taxa de deformação característica, K_0 é a permeabilidade inicial, g_0 é a aceleração gravitacional de referência, η_c é a viscosidade característica, p_e é a pressão na saída do domínio, r_0 é o raio de poro inicial médio, C_0 é a concentração de ácido na entrada do domínio, a_0 é a área interfacial disponível para reação inicial média, ρ_{0s} é a massa específica de referência para o sólido, L é o comprimento do *plug* e H é a altura.

Inserindo as variáveis adimensionais na equação de conservação de massa 4.96:

$$k_c a_0 \alpha C_0 a_v^* (C_f^* - C_s^*) \left(\frac{1}{\rho_{0s} \rho_s^*} - \frac{1}{\rho_0 \rho_f} \right) + \frac{\nabla^*}{r_0} (\varepsilon v^* v_0) = 0 \quad (4.100)$$

Multiplicando a Equação 4.100 por $\frac{r_0}{v_0}$ e rearranjando:

$$\frac{r_0 k_c a_0 \alpha C_0}{v_0 \rho_{0s}} \frac{a_v^* (C_f^* - C_s^*)}{\rho_s^*} - \frac{r_0 k_c a_0 \alpha C_0}{v_0 \rho_0} \frac{a_v^* (C_f^* - C_s^*)}{\rho^*} + \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{v}^*) = 0 \quad (4.101)$$

Definindo os números adimensionais:

$$N_{ac} = \frac{\alpha C_0}{\rho_{0s}} \quad (4.102)$$

$$N_{ac_b} = \frac{\alpha C_0}{\rho_0} \quad (4.103)$$

$$Da = \frac{r_0 k_c a_0}{v_0} \quad (4.104)$$

Onde N_{ac} é o número de capacidade de ácido, N_{ac_b} é o número de capacidade de ácido modificado e Da é o número de Damköhler. Inserindo 4.102,4.103,4.104 em 4.101:

$$N_{ac} Da_b \frac{a_v^*(C_f^* - C_s^*)}{\rho_s^*} - N_{ac_b} Da_b \frac{a_v^*(C_f^* - C_s^*)}{\rho_s^*} + \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{v}^*) = 0 \quad (4.105)$$

A viscosidade característica η_c é definida como:

$$\eta_c = k \dot{\gamma}_c^n = k \left(\frac{v_0}{r_0} \right)^{n-1} \quad (4.106)$$

Inserindo as variáveis adimensionais no balanço de quantidade de movimento linear 4.87 na forma não-conservativa:

$$\begin{aligned} \varepsilon \rho_0 \rho \left[\frac{\partial(v^* v_0)}{\partial t^* \dot{\gamma}_c} + \frac{\nabla^*}{r_0} \cdot (v^* v_0 v^* v_0) \right] &= -\frac{\nabla^*}{r_0} \left(\varepsilon p^* \frac{\eta_c v_0 r_0}{K_0} \right) + \\ \frac{\nabla^*}{r_0} \cdot \left(\varepsilon \boldsymbol{\tau}^* \frac{\eta_c v_0 r_0}{K_0} \right) - \varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3K_0} \right)^{\frac{n+1}{2}} &|\mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^*|^{\frac{(n-1)}{2}} |\mathbf{v}^*|^{\frac{n-1}{2}} v_0^n \mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^* + \varepsilon g_0 \rho_0 \rho^* \mathbf{g}^* \end{aligned} \quad (4.107)$$

Reescrevendo:

$$\begin{aligned} \varepsilon \rho_0 \rho \left[\frac{\partial v^*}{\partial t^*} \left(\frac{v_0^2}{r_0} \right) + \nabla^* \cdot (v^* v^*) \left(\frac{v_0^2}{r_0} \right) \right] &= -\nabla^* \left(\varepsilon p^* \frac{\eta_c v_0}{K_0} \right) + \\ \nabla^* \cdot \left(\varepsilon \boldsymbol{\tau}^* \frac{\eta_c v_0}{K_0} \right) - \varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3} \right)^{\frac{n+1}{2}} &|\mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^*|^{\frac{n-1}{2}} |\mathbf{v}^*|^{\frac{n-1}{2}} \mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^* \left(\frac{k v_0^n}{K_0^{\frac{n+1}{2}}} \right) + \varepsilon \rho^* \mathbf{g}^* g_0 \rho_0 \end{aligned} \quad (4.108)$$

Multiplicando a equação anterior por $\frac{r_0}{\rho_0 v_0^2}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon \rho \left[\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (v^* v^*) \right] &= -\nabla^* \left(\varepsilon p^* \frac{\eta_c r_0}{\rho_0 v_0 K_0} \right) + \nabla^* \cdot \left(\varepsilon \boldsymbol{\tau}^* \frac{\eta_c r_0}{\rho_0 v_0 K_0} \right) \\ - \varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3} \right)^{\frac{n+1}{2}} &|\mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^*|^{\frac{n-1}{2}} |\mathbf{v}^*|^{\frac{n-1}{2}} \mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^* \left(\frac{k v_0^{n-2} r_0}{\rho_0 K_0^{\frac{n+1}{2}}} \right) + \varepsilon \rho^* \mathbf{g}^* \frac{g_0 r_0}{v_0^2} \end{aligned} \quad (4.109)$$

Definindo os números adimensionais:

$$Fr = \frac{v_0}{\sqrt{g_0 L}} \quad Re = \frac{\rho_0 v_0 K_0}{\eta_c r_0} = \frac{\rho_0 v_0^{2-n} K_0}{k r_0^{2-n}} \quad N_m = \frac{\rho_0 v_0^{2-n} K_0^{\frac{n+1}{2}}}{k r_0} \quad (4.110)$$

Onde Fr é o número de Froude, Re é o número de Reynolds e N_m é o número de interação. A equação na forma adimensional é finalmente escrita como:

$$\begin{aligned} \varepsilon \rho \left[\frac{\partial v^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (v^* v^*) \right] &= -\nabla^* (\varepsilon p^*) \left(\frac{1}{Re} \right) + \nabla^* \cdot (\varepsilon \boldsymbol{\tau}^*) \left(\frac{1}{Re} \right) \\ &- \varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3} \right)^{\frac{n+1}{2}} |\mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^*|^{\frac{n-1}{2}} |\mathbf{v}^*|^{\frac{n-1}{2}} \mathbf{K}^{*-1} \cdot \mathbf{v}^* \left(\frac{1}{N_m} \right) + \varepsilon \rho^* \mathbf{g}^* \frac{1}{Fr^2} \end{aligned} \quad (4.111)$$

Inserindo as variáveis adimensionais na equação de conservação de espécies 4.89 e usando a relação entre C_f e C_s 4.90:

$$\begin{aligned} \frac{v_0 C_0}{r_0} \frac{\partial (\varepsilon C_f^*)}{\partial t^*} + \frac{v_0 C_0}{r_0} \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{v}^* C_f^*) &= \frac{C_0}{r_0^2} \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{D}_e \cdot \nabla C_f^*) + \\ &- k_c a_v^* a_0 C_0 \left(\frac{\left(1 + \frac{k_s}{k_c} \right) C_f^* - C_f^*}{1 + \frac{k_s}{k_c}} \right) \end{aligned} \quad (4.112)$$

Multiplicando a Equação 4.112 por $\frac{r_0}{v_0 C_0}$:

$$\frac{\partial (\varepsilon C_f^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{v}^* C_f^*) = \frac{1}{v_0 r_0} \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{D}_e \cdot \nabla C_f^*) - \frac{k_c a_v^* a_0 r_0}{v_0} \left(\frac{\frac{k_s}{k_c} C_f^*}{1 + \frac{k_s}{k_c}} \right) \quad (4.113)$$

Definindo os números adimensionais:

$$\Phi^2 = \frac{2k_s r_0}{D_m} \quad (4.114)$$

$$Sh = \frac{2k_c r_p}{D_m} \quad (4.115)$$

Onde Φ^2 é o módulo de Thiele e Sh é o número de Sherwood. A Equação 4.113 pode ser reescrita:

$$\frac{\partial (\varepsilon C_f^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{v}^* C_f^*) = \frac{1}{v_0 r_0} \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{D}_e \cdot \nabla C_f^*) - \frac{Da C_f^* a_v^*}{\left(1 + \frac{\Phi^2 r_p^*}{Sh} \right)} \quad (4.116)$$

Os modelos para os coeficientes de dispersão 4.36 e 4.37 podem ser generalizados na forma:

$$(\mathbf{D}_e)_{ii} = D_m(\alpha_{os} + \lambda_{ii}Pe_p) \quad (4.117)$$

Inserindo 4.117 em 4.116:

$$\frac{\partial(\varepsilon C_f^*)}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\varepsilon \mathbf{v}^* C_f^*) = \nabla^* \cdot \left[\varepsilon \frac{D_m(\alpha_{os} + \lambda_{ii}Pe_p)}{v_0 r_0} \nabla C_f^* \right] - \frac{Da C_f^* a_v^*}{\left(1 + \frac{\Phi_p^{2*}}{Sh}\right)} \quad (4.118)$$

4.3.2 Condições de Contorno

As seguintes condições de contorno se aplicam:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^* &= 1 \quad \text{em } x^* = 0 \\ \nabla^* \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{n}^* &= 0 \quad \text{em } x^* = 1 \\ \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{n}^* &= 0 \quad \text{em } y^* = 0, y^* = 1 \end{aligned} \quad (4.119)$$

$$\begin{aligned} \nabla^* p^* \cdot \mathbf{n}^* &= 0 \quad \text{em } x^* = 0, y^* = 0, y^* = 1 \\ p^* &= 0 \quad \text{em } x^* = 1 \end{aligned} \quad (4.120)$$

$$\begin{aligned} C_f^* &= 1 \quad \text{em } x^* = 0 \\ \nabla^* C_f^* \cdot \mathbf{n}^* &= 0 \quad \text{em } x^* = 1 \\ C_f^* &= 0 \quad \text{em } y^* = 0, y^* = 1 \end{aligned} \quad (4.121)$$

Onde \mathbf{n}^* é o vetor normal adimensional.

4.4 Influência do pH no Comportamento do Fluido

4.4.1 Influência do pH na Viscosidade

Nos modelos de Fluidos Newtonianos Generalizados, a viscosidade é uma função da taxa de deformação, isto é, depende das tensões de cisalhamento aplicadas sobre o fluido. São modelos puramente mecânicos. Nos problemas que envolvem acidificação, o fluido não apenas é submetido a tensões como também reações químicas, que podem provocar mudanças em suas propriedades.

Conforme discutido anteriormente, em muitos casos é de interesse que fluidos utilizados no tratamento de matrizes por acidificação apresentem um comportamento na viscosidade que dependa inversamente do pH no meio, a fim de obter melhores resultados quanto ao ganho na permeabilidade.

Fluidos reais que têm o seu comportamento reológico alterado devido à mudança do pH são viscoelásticos. Porém, para simplificar o modelo matemático e mimetizar

comportamentos de interesse, geralmente são combinados modelos de fluidos newtonianos generalizados com modelos específicos para a influência do pH. Em 2013, Ratnakar et al. [49] realizaram um estudo para desenvolver um modelo reológico que seja capaz de descrever a variação de viscosidade em ácidos, em função do pH, taxa de deformação e temperatura. A parcela do modelo que descreve o incremento na viscosidade pelo pH é baseada em dados experimentais e a expressão matemática é dada por:

$$\eta(pH) = \eta_0 \left[1 + (\eta_m - 1) e^{-\frac{a(pH - pH_m)^2}{pH(7 - pH)}} \right] \quad (4.122)$$

Onde η_0 é a viscosidade base, η_m é o máximo incremento na viscosidade, pH_m é o valor de pH que corresponde à viscosidade máxima e a é um parâmetro inversamente proporcional à variância do perfil viscosidade versus pH.

Com a finalidade de computar a viscosidade aparente resultante, cada efeito é descrito por uma parcela e o modelo completo que envolve todos é o produto de cada um. Como o modelo de viscosidade em função da taxa de cisalhamento utilizado pelos autores é o de fluido *power-law*, a viscosidade é dada por:

$$\eta(\dot{\gamma}, pH, \theta) = \eta_0 \dot{\gamma}^{n-1} \left(1 - \frac{\alpha_T(\theta - \theta_0)}{\theta_0} \right) \left[1 + (\eta_m - 1) e^{-\frac{a(pH - pH_m)^2}{pH(7 - pH)}} \right] \quad (4.123)$$

θ é a temperatura, θ_0 a temperatura inicial e α_T é a difusividade térmica. Todos os casos analisados são isotérmicos, portanto a parcela referente à temperatura não contribui. Então, a função viscosidade é simplificada para:

$$\eta(\dot{\gamma}, pH) = \eta_0 \dot{\gamma}^{n-1} \left[1 + (\eta_m - 1) e^{-\frac{a(pH - pH_m)^2}{pH(7 - pH)}} \right] \quad (4.124)$$

4.4.2 Concentração em função do pH

Como uma primeira tentativa de se obter resultados numéricos que contabilizem um campo para o pH que dependa da concentração de ácido C_f , foi proposto um modelo simples de proporcionalidade que envolve dois parâmetros, dado pela Equação 4.122. É usada a hipótese que o meio é ácido ou neutro e o pH da rocha é neutro.

$$pH(C_f) = \frac{k_{p1}}{k_{p2}C_f + \frac{k_{p1}}{7}} \quad (4.125)$$

Onde k_{p1} é a constante de proporcionalidade e k_{p2} é uma constante que permite aprimorar a acurácia do modelo. Devido a falta de experimentos para propor um modelo mais realista, este foi usado nas simulações preliminares. Embora sem validação, o modelo é capaz de prever resultados esperados e reportados em literatura.

tura, tais como o efeito de desvio de caminhos preferenciais observados em ácidos divergentes.

4.5 Modelo de Fluido Carreau

O modelo de Carreau é um tipo de fluido newtoniano generalizado. A função viscosidade depende apenas da taxa de deformação $\dot{\gamma}$ através da seguinte equação:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \eta_{\infty} + (\eta_0 - \eta_{\infty}) \left(1 + (\lambda \dot{\gamma}^2)\right)^{\frac{n-1}{2}} \quad (4.126)$$

onde η_{∞} é a viscosidade a altas taxas de deformação, η_0 é a viscosidade a baixas taxas de deformação, λ é o tempo característico do material e n é o índice *power-law*. Na Figura (4.8) é possível notar o comportamento da função viscosidade para diferentes valores de n . Em todos os casos, há um comportamento *shear-thinning*, onde a viscosidade diminui com o aumento da taxa de deformação. Quando $n = 1$, o caso newtoniano é recuperado.

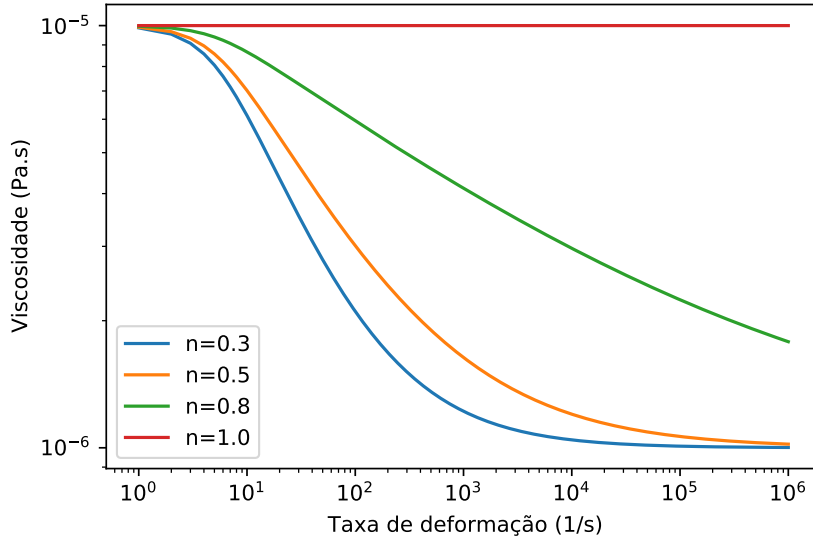


Figura 4.8: Curvas de viscosidade para modelo de Carreau e diferentes valores de n . $\eta_0 = 10^{-5} Pa.s$, $\eta_{\infty} = 10^{-6} Pa.s$, $\lambda = 0.2s$.

A motivação para o estudo de casos envolvendo este modelo de fluido reside na aplicação de ácidos com reologia complexa no processo de acidificação de matriz. Muitos ácidos são viscoelásticos e podem até mesmo apresentar mudança na viscosidade aparente em função do pH. Quanto à influência da taxa de deformação na reologia desses fluidos, em muitos casos, o comportamento é bem descrito pelo modelo de Carreau, que contempla não apenas a região com comportamento *power-law*

como também a região de baixas e altas taxas de deformação, onde a viscosidade não varia.

Naturalmente surgem dificuldades ao aplicar este modelo de fluido no modelo tradicional de duas escalas. A principal é o fato de que não há solução analítica para o perfil de velocidade de um escoamento totalmente desenvolvido para fluido Carreau. Foram feitas duas abordagens: uma combinação do termo de interação newtoniano e *power-law* e a criação de um banco de dados de simulações em escala de poro para que o termo de interação numérico possa ser aplicado.

O termo de interação analítico, que cobre as regiões com comportamento newtoniano e *power-law* é dado por:

$$\mathbf{m}_f = \begin{cases} -\varepsilon^2 \eta_0 K^{-1} \mathbf{u}, & \text{se } \dot{\gamma} < \dot{\gamma}_c \\ -2\varepsilon \eta_0 (\lambda)^{n-1} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{\varepsilon}{8K}^{\frac{n+1}{2}} |\mathbf{u}|^{n-1} \mathbf{u}, & \text{se } \dot{\gamma} \geq \dot{\gamma}_c \end{cases}$$

onde $\dot{\gamma}_c$ é a taxa de deformação crítica e é o ponto na curva de viscosidade onde ocorre a transição do comportamento newtoniano para o *power-law*. Esta modelagem se aplica para o caso de fluido Carreau modificado ($\eta_\infty = 0$). É importante notar que a taxa de deformação a ser comparada com a taxa de deformação crítica é a taxa de deformação entre os volumes elementares representativos. A taxa de deformação entre os REVs pode ser obtida a partir da mobilidade, explicitando a viscosidade característica do fluido.

4.6 Volume Elementar Representativo com Distribuição de Poros

O meio poroso, quando idealizado por um conjunto de cilindros passantes, representa um cenário de permeabilidade otimista. Na realidade, os meios porosos apresentam poros com variações bruscas de seção reta, além de um alto nível de interconectividade e tortuosidade. Portanto, é esperado que quando o modelo de poro cilíndrico seja aplicado, a pressão prevista para manter a vazão de entrada seja baixa.

Porém, ainda assim, há casos em que a pressão obtida por experimentos é menor do que a prevista em simulações. Canella et al. [50] sugerem que a interconectividade entre os poros mais largos é mais importante, pois são canais que oferecem maior permeabilidade, consequentemente gerando um caminho preferencial para o fluido, enquanto que canais mais finos tendem a concentrar pouca vazão. A seguir, é calculada a mobilidade considerando um volume elementar representativo (REV) composto por poros cilíndricos com diferentes raios, conforme ilustrado na Figura (4.9).

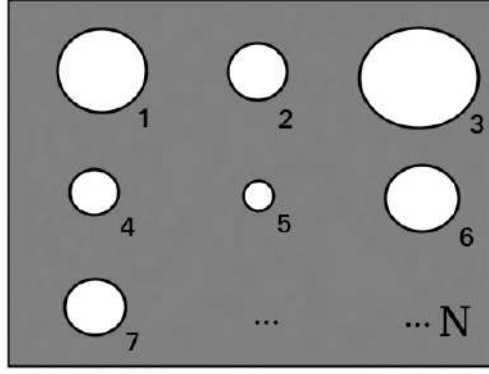


Figura 4.9: REV com distribuição não-uniforme de raio de poros.

4.6.1 Mobilidade para REV com Distribuição de Poros

O termo de interação é dado pela densidade volumétrica da força de arrasto nos poros,

$$\mathbf{m}_f = \frac{\mathbf{f}_t}{V_{REV}}. \quad (4.127)$$

Onde \mathbf{f}_t é a força total de arrasto nos poros. Isto é, $\mathbf{f}_t = \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_i$. V_{REV} é o volume total do REV.

O perfil de velocidade em regime permanente para um fluido *power-law* num poro qualquer i em função da velocidade média v_m é dado por:

$$v = v_m \frac{3n+1}{n+1} \left(1 + \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right). \quad (4.128)$$

A tensão na parede é dada por:

$$\tau_w = -\eta(\dot{\gamma}) \left(\frac{dv}{dr} \right) \Big|_{r=R} \quad (4.129)$$

A função viscosidade para um fluido *power-law*:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \alpha \left(\frac{dv}{dr} \right)^{n-1} \quad (4.130)$$

Inserindo a Eq. (4.130) na Eq. (4.129):

$$\tau_w = -\alpha \left(\frac{dv}{dr} \right)^n \Big|_{r=R} \quad (4.131)$$

$$\tau_w = -\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{v_m^n}{R^n} \quad (4.132)$$

Para o caso cilíndrico, a força na parede pode ser obtida através da tensão na parede relacionando a tensão com a área da superfície de contato a_s :

$$f = \tau_w a_s = -\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{v_m^n}{R^n} 2\pi R L \quad (4.133)$$

A força obtida corresponde à um único poro i , com comprimento L .

$$f_i = -2\pi L \alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n R_i^{1-n} v_{mi}^n \quad (4.134)$$

Extrapolando a equação anterior para a forma vetorial:

$$\mathbf{f}_i = -2\pi L \alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n R_i^{1-n} |\mathbf{v}_{fi}|^{n-1} \mathbf{v}_{fi} \quad (4.135)$$

A força total no REV é:

$$\mathbf{f}_t = \sum_{i=1}^N f_i = -2\pi L \alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N R_i^{1-n} |\mathbf{v}_{fi}|^{n-1} \mathbf{v}_{fi} \quad (4.136)$$

O volume de um único poro i é:

$$V_i = \pi R_i^2 L \quad (4.137)$$

O volume total de poros no REV é dado por:

$$V_{tp} = \pi L \sum_{i=1}^N R_i^2 \quad (4.138)$$

E o volume do REV:

$$V_{REV} = \frac{\pi L}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N R_i^2 \quad (4.139)$$

A partir da Eq. (4.127), o termo de interação é dado por:

$$\mathbf{m}_f = -2\varepsilon \alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N R_i^{1-n} |\mathbf{v}_{fi}|^{n-1} \mathbf{v}_{fi}}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (4.140)$$

O termo de interação também pode ser escrito em função da mobilidade \mathbf{M} :

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon^2 \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{v}_m \quad (4.141)$$

onde \mathbf{v}_m é a velocidade média no REV. Comparando as equações (4.140) e (4.141):

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{2\alpha}{\varepsilon} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N R_i^{1-n} |\mathbf{v}_{fi}|^n}{\sum_{i=1}^N R_i^2 |\mathbf{v}_m|} \mathbf{I} \quad (4.142)$$

Quando o REV é composto por apenas um poro representativo, o somatório se

resume a um único termo e obtém-se:

$$\mathbf{m}_f = -\frac{2\varepsilon\alpha}{R^{n+1}} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n |\mathbf{v}_f|^{n-1} \mathbf{v}_f \quad (4.143)$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{2\alpha}{\varepsilon R^{n+1}} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n |\mathbf{v}_f|^{n-1} \mathbf{I} \quad (4.144)$$

sendo $\mathbf{v}_f = \mathbf{v}_m$. O termo de interação e o inverso da mobilidade calculados para um REV com um único poro são recuperados.

Calculando a velocidade nos poros

A velocidade média num determinado poro é dada por:

$$v_{f_i} = R_i^{\frac{n+1}{n}} \frac{n}{3n+1} \left[- \left(\frac{dp}{dx} \right)_i \frac{1}{2\alpha} \right]^{\frac{1}{n}} \quad (4.145)$$

É feita a hipótese de que o gradiente de pressão é o mesmo em cada poro. Assim:

$$v_{f_i} = R_i^{\frac{n+1}{n}} \frac{n}{3n+1} \left[- \left(\frac{dp}{dx} \right) \frac{1}{2\alpha} \right]^{\frac{1}{n}} \quad (4.146)$$

A vazão total no REV é:

$$Q = v_m A_{total} = v_m \sum_{i=1}^N \pi R_i^2 \quad (4.147)$$

Ainda, a vazão no REV pode ser descrita como o somatório das vazões em cada poro:

$$Q = \sum_{i=1}^N q_i = \sum_{i=1}^N \pi v_i R_i^2 \quad (4.148)$$

Comparando (4.147) e (4.148), a velocidade média no REV pode ser escrita como:

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^N v_i R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (4.149)$$

Inserindo (4.146) em (4.149):

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \frac{n}{3n+1} \left[- \left(\frac{dp}{dx} \right) \frac{1}{2\alpha} \right]^{\frac{1}{n}} \quad (4.150)$$

O gradiente de pressão é então:

$$\frac{dp}{dx} = -2\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} \right]^n v_m^n \quad (4.151)$$

A velocidade em cada poro é então dada por:

$$v_{f_i} = R_i^{\frac{n+1}{n}} \frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} v_m \quad (4.152)$$

O termo de interação pode ser escrito na forma não vetorial como:

$$m_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N R_i^{1-n} v_{f_i}^n}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (4.153)$$

Inserindo (4.152) em (4.153):

$$m_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N R_i^2 \left[\sum_{i=1}^N R_i^2 \right]^n}{\sum_{i=1}^N R_i^2 \left[\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}} \right]^n} v_m^n \quad (4.154)$$

$$m_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} \right]^n v_m^n \quad (4.155)$$

Extrapolando a Equação (4.155) para a forma vetorial:

$$\mathbf{m}_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} \right]^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{v}_m \quad (4.156)$$

O inverso do tensor mobilidade é então:

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{2\alpha}{\varepsilon} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} \right]^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{I} \quad (4.157)$$

A razão entre a mobilidade do REV com raios diferentes e a mobilidade do REV com um único poro de raio R é dada por:

$$f_M = \frac{\left(\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}} \right)^n}{\left(\sum_{i=1}^N R_i^2 \right)^n R^{n+1}} \quad (4.158)$$

4.6.2 Caso Carreau

Para os casos com fluido Carreau, a combinação dos termos de interação para fluido newtoniano e *power-law* pode ser novamente aplicada, desta vez considerando a distribuição de poros:

$$\mathbf{m}_f = \begin{cases} -8\varepsilon \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^4} \right) \mathbf{v}, & \text{se } \dot{\gamma} < \dot{\gamma}_c \\ -2\varepsilon\eta_0\lambda^{n-1} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} \right]^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{v}_m, & \text{se } \dot{\gamma} \geq \dot{\gamma}_c \end{cases}$$

4.6.3 Viscosidade aparente e taxa de deformação

A viscosidade aparente pode ser obtida através da equação de Darcy:

$$\mu_{app} = \frac{1}{\varepsilon |\mathbf{v}|} K_{eff} |\nabla p| \quad (4.159)$$

onde μ_{app} é a viscosidade aparente, K_{eff} é a permeabilidade efetiva, ε é a porosidade média do *plug*, u é a velocidade de entrada e ∇p é o gradiente de pressão. A permeabilidade efetiva pode ser obtida através de um caso newtoniano de teste. Para um dado *plug* com uma dada porosidade média e o escoamento de um fluido newtoniano cuja viscosidade é μ_t , a permeabilidade efetiva pode ser obtida através da equação de Darcy:

$$K_{eff} = \mu_t \varepsilon |\mathbf{v}| |\nabla p|^{-1} \quad (4.160)$$

A permeabilidade local de um REV idealizado por um conjunto uniforme de poros cilíndricos de raio r é dada pela Eq. (4.54). Usando a função viscosidade para um fluido *power-law* e a viscosidade característica, a taxa de deformação característica, $\dot{\gamma}_c$, é dada por:

$$\dot{\gamma}_c = \left(\frac{1}{4} \right)^{\frac{1}{n-1}} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^{\frac{n}{n-1}} \left(\frac{v}{R} \right) \quad (4.161)$$

O desenvolvimento do caso cartesiano com distribuição não-uniforme de poros está disponível no apêndice.

4.6.4 Modelo Herschel-Bulkley

O desenvolvimento para o termo de interação para um fluido viscoplástico que segue o modelo de Bingham e considerando distribuição não-uniforme de poros está disponível no apêndice.

A equação constitutiva para o modelo de Herschel-Bulkley é dada por:

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= 0, \text{ se } \tau \leq \tau_0 \\ \tau &= \tau_0 + \alpha \dot{\gamma}^n, \text{ se } \tau > \tau_0 \end{aligned}$$

Considerando um REV feito de um arranjo de cilindros passantes com diferentes raios. O termo de interação é dado pela densidade volumétrica da força de arrasto nos poros.

$$\mathbf{m}_f = \frac{\mathbf{f}_t}{V_{REV}}. \quad (4.162)$$

O perfil de velocidade em regime permanente para um fluido Herschel-Bulkley em um poro, considerando escoamento laminar, completamente desenvolvido e em regime estacionário é dado por:

$$v = \begin{cases} \frac{nR}{(n+1)} \left(\frac{\tau_w}{\alpha} \right)^{\frac{1}{n}} (1 - \phi)^{\frac{n+1}{n}}, & 0 \leq r \leq R_p \\ \frac{nR}{(n+1)} \left(\frac{\tau_w}{\alpha} \right)^{\frac{1}{n}} \left\{ (1 - \phi)^{\frac{n+1}{n}} - \left(\frac{r}{R} - \phi \right)^{\frac{n+1}{n}} \right\}, & R_p < r \leq R \end{cases}$$

onde R_p é o raio do plug, τ_w é a tensão na parede e $\phi = \tau_0/\tau_w$. Um balanço de forças na direção do escoamento num elemento de fluido a uma distância r é dado por:

$$\tau_{rz} = -\frac{\Delta p}{L} \frac{r}{2} \quad (4.163)$$

No raio do plug R_p , a Equação (4.163) se aplica:

$$\tau_0 = -\frac{\Delta p}{L} \frac{R_p}{2} \quad (4.164)$$

A equação também se aplica a tensão na parede:

$$\tau_w = -\frac{\Delta p}{L} \frac{R}{2} \quad (4.165)$$

A razão τ_0/τ_w é então dada por:

$$\frac{\tau_0}{\tau_w} = \frac{R_p}{R} \quad (4.166)$$

A vazão Q é dada por:

$$Q = \pi R^3 n \left(\frac{\tau_w}{\alpha} \right)^{\frac{1}{n}} (1 - \phi)^{\frac{n+1}{n}} \left\{ \frac{(1 - \phi)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi(1 - \phi)}{2n + 1} + \frac{\phi^2}{n + 1} \right\} \quad (4.167)$$

A velocidade média é:

$$v_m = \frac{Q}{A} = R n \left(\frac{\tau_w}{\alpha} \right)^{\frac{1}{n}} (1 - \phi)^{\frac{n+1}{n}} \left\{ \frac{(1 - \phi)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi(1 - \phi)}{2n + 1} + \frac{\phi^2}{n + 1} \right\} \quad (4.168)$$

Então, o perfil de velocidade pode ser escrito em função da velocidade média como:

$$v = \frac{v_m}{n+1} \left\{ \frac{(1-\phi)^2}{3n+1} + \frac{2\phi(1-\phi)}{2n+1} + \frac{\phi^2}{n+1} \right\}^{-1} \left[1 - \left(\frac{r/R - \phi}{1-\phi} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right] \quad (4.169)$$

Equação (4.169) é válida para $R_p < r \leq R$.

A tensão na parede é:

$$\tau_w = \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}|_{r=R} \quad (4.170)$$

A função viscosidade para um fluido Herschel-Bulkley ($\eta = \tau/\dot{\gamma}$) quando $\tau > \tau_0$ é dada por:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \tau_0 \dot{\gamma}^{-1} + \alpha \dot{\gamma}^{n-1} \quad (4.171)$$

Inserindo (4.171) em (4.170):

$$\tau_w = (\tau_0 + \alpha \dot{\gamma}^n)|_{r=R} = \left[\tau_0 + \alpha \left(\frac{dv}{dr} \right)^n \right] \Big|_{r=R} \quad (4.172)$$

Inserindo Eq. (4.169) em (4.172):

$$\tau_w = \tau_0 - \alpha \left(\frac{v_m}{n} \right)^n \left\{ \frac{(1-\phi)^2}{3n+1} + \frac{2\phi(1-\phi)}{2n+1} + \frac{\phi^2}{n+1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{R(1-\phi)} \right)^n \quad (4.173)$$

Para o caso cilíndrico, a força na parede pode ser obtida da tensão na parede, relacionando com a área superficial de contato a_s :

$$f = \tau_w a_s = 2\pi R L \left[\tau_0 - \alpha \left(\frac{v_m}{n} \right)^n \left\{ \frac{(1-\phi)^2}{3n+1} + \frac{2\phi(1-\phi)}{2n+1} + \frac{\phi^2}{n+1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{R(1-\phi)} \right)^n \right] \quad (4.174)$$

A força obtida corresponde a um único poro i , com comprimento L .

$$f_i = 2\pi R_i L \left[\tau_0 - \alpha \left(\frac{v_{mi}}{n} \right)^n \left\{ \frac{(1-\phi_i)^2}{3n+1} + \frac{2\phi_i(1-\phi_i)}{2n+1} + \frac{\phi_i^2}{n+1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{R_i(1-\phi_i)} \right)^n \right] \quad (4.175)$$

Extrapolando a equação anterior para a forma vetorial:

$$\mathbf{f}_i = \left[2\pi R_i L \tau_0 |\mathbf{v}_{mi}|^{-1} - 2\pi R_i L \alpha \left(\frac{1}{n} \right)^n \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{R_i(1 - \phi_i)} \right)^n |\mathbf{v}_{mi}|^{n-1} \right] \mathbf{v}_{mi} \quad (4.176)$$

A força total no REV é:

$$\mathbf{f}_t = \sum_{i=1}^N f_i = \left[2\pi L \tau_0 \sum_{i=1}^N R_i |\mathbf{v}_{mi}|^{-1} - 2\pi L \alpha \left(\frac{1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{(1 - \phi_i)} \right)^n R_i^{1-n} |\mathbf{v}_{mi}|^{n-1} \right] \mathbf{v}_{mi} \quad (4.177)$$

O volume de um único poro i é:

$$V_i = \pi R_i^2 L \quad (4.178)$$

O volume total de poros no REV é dado por:

$$V_{tp} = \pi L \sum_{i=1}^N R_i^2 \quad (4.179)$$

E o volume do REV:

$$V_{REV} = \frac{\pi L}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N R_i^2 \quad (4.180)$$

Da Eq. (4.127), o termo de interação é dado por:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon \tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_{mi}|^{-1} - 2\varepsilon \alpha \left(\frac{1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{(1 - \phi_i)} \right)^n \frac{R_i^{1-n}}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_{mi}|^{n-1} \right] \mathbf{v}_{mi} \quad (4.181)$$

O termo de interação também pode ser escrito em função da mobilidade \mathbf{M} :

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon^2 \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{v}_m \quad (4.182)$$

onde \mathbf{v}_m é a velocidade média no REV. Comparando equações (4.140) e (4.141):

$$\mathbf{M}^{-1} = \left[-\frac{2\tau_0}{\varepsilon} \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2 |\mathbf{v}_m|} + \frac{2\alpha}{\varepsilon} \left(\frac{1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{(1-\phi_i)^2}{3n+1} + \frac{2\phi_i(1-\phi_i)}{2n+1} + \frac{\phi_i^2}{n+1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{(1-\phi_i)} \right)^n \frac{R_i^{1-n} |\mathbf{v}_{mi}|^n}{\sum_{i=1}^N R_i^2 |\mathbf{v}_m|} \right] \mathbf{I} \quad (4.183)$$

Quando o REV é modelado por um único poro representativo, o somatório se resume a um único termo e temos:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{1}{R} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 2\varepsilon\alpha \left(\frac{1}{n} \right)^n \left\{ \frac{(1-\phi)^2}{3n+1} + \frac{2\phi(1-\phi)}{2n+1} + \frac{\phi^2}{n+1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{(1-\phi)} \right)^n \frac{1}{R^{1+n}} |\mathbf{v}_m|^{n-1} \right] \mathbf{v}_m \quad (4.184)$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \left[-\frac{2\tau_0}{\varepsilon} \frac{1}{R |\mathbf{v}_m|} + \frac{2\alpha}{\varepsilon} \left(\frac{1}{n} \right)^n \left\{ \frac{(1-\phi)^2}{3n+1} + \frac{2\phi(1-\phi)}{2n+1} + \frac{\phi^2}{n+1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{(1-\phi)} \right)^n \frac{1}{R^{1+n}} |\mathbf{v}_m|^{n-1} \right] \mathbf{I} \quad (4.185)$$

onde $\mathbf{v}_f = \mathbf{v}_m$.

Se $\tau_0 = 0$:

$$\mathbf{m}_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{1}{R^{1+n}} |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{v}_m \quad (4.186)$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{2\alpha}{\varepsilon} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \frac{1}{R^{1+n}} |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{I} \quad (4.187)$$

E a solução para fluido *power-law* considerando REV com poro representativo é recuperada. De maneira alternativa, se $n = 1$:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{1}{R} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 2\varepsilon\alpha \left\{ \frac{(1-\phi)^2}{4} + \frac{2\phi(1-\phi)}{3} + \frac{\phi^2}{2} \right\}^{-1} \left(\frac{1}{(1-\phi)} \right) \frac{1}{R^2} \right] \mathbf{v}_m \quad (4.188)$$

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{1}{R} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 24\varepsilon\alpha \frac{1}{(3-\phi-\phi^2-\phi^3)} \frac{1}{R^2} \right] \mathbf{v}_m \quad (4.189)$$

Então, a solução para modelo de Bingham considerando REV com poro representativo é recuperada.

A velocidade média em um dado poro é:

$$v_{fi} = nR_i \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha} \right)^{1/n} (1 - \phi_i)^{\frac{n+1}{n}} \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\} \quad (4.190)$$

A vazão total no REV é:

$$Q = v_m A_{total} = v_m \sum_{i=1}^N \pi R_i^2 \quad (4.191)$$

Ainda, a vazão no REV pode ser descrita como somatório de vazões em cada poro:

$$Q = \sum_{i=1}^N q_i = \sum_{i=1}^N \pi v_i R_i^2 \quad (4.192)$$

Comparando (4.191) e (4.192), a velocidade média no REV pode ser escrita como:

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^N v_i R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (4.193)$$

Inserindo (4.190) em (4.193):

$$v_m = n \frac{1}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha} \right)^{1/n} R_i^3 (1 - \phi_i)^{\frac{n+1}{n}} \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\} \quad (4.194)$$

A velocidade em cada poro é então dada por:

$$v_{fi} = R_i \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha} \right)^{1/n} (1 - \phi_i)^{\frac{n+1}{n}} \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\} \frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha} \right)^{1/n} R_i^3 (1 - \phi_i)^{\frac{n+1}{n}} \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\}} v_m \quad (4.195)$$

O termo de interação é escrito na forma escalar como:

$$m_f = 2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} - 2\varepsilon\alpha \left(\frac{1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{(1 - \phi_i)^2}{3n + 1} + \frac{2\phi_i(1 - \phi_i)}{2n + 1} + \frac{\phi_i^2}{n + 1} \right\}^{-n} \left(\frac{1}{(1 - \phi_i)} \right)^n \frac{R_i^{1-n}}{\sum_{i=1}^N R_i^2} v_{fi}^n \quad (4.196)$$

Inserindo (4.195) em (4.196):

$$m_f = 2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} - 2\varepsilon\alpha \left(\frac{1}{n}\right)^n \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{(1-\phi_i)}\right)^n \frac{R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right) (1-\phi_i)^{n+1} \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right)^{1/n} R_i^3 (1-\phi_i)^{\frac{n+1}{n}} \left\{\frac{(1-\phi_i)^2}{3n+1} + \frac{2\phi_i(1-\phi_i)}{2n+1} + \frac{\phi_i^2}{n+1}\right\}}}\right)^n v_m^n \quad (4.197)$$

Extrapolando Equação (4.197) para a forma vetorial:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 2\varepsilon\alpha \left(\frac{1}{n}\right)^n \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{(1-\phi_i)}\right)^n \frac{R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right) (1-\phi_i)^{n+1} \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right)^{1/n} R_i^3 (1-\phi_i)^{\frac{n+1}{n}} \left\{\frac{(1-\phi_i)^2}{3n+1} + \frac{2\phi_i(1-\phi_i)}{2n+1} + \frac{\phi_i^2}{n+1}\right\}}}\right)^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \right] \mathbf{v}_m \quad (4.198)$$

Então, o inverso do tensor mobilidade é:

$$\mathbf{M}^{-1} = \left[-2\frac{\tau_0}{\varepsilon} \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2 |\mathbf{v}_m|} + 2\frac{\alpha}{\varepsilon} \left(\frac{1}{n}\right)^n \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{(1-\phi_i)}\right)^n \frac{R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right) (1-\phi_i)^{n+1} \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right)^{1/n} R_i^3 (1-\phi_i)^{\frac{n+1}{n}} \left\{\frac{(1-\phi_i)^2}{3n+1} + \frac{2\phi_i(1-\phi_i)}{2n+1} + \frac{\phi_i^2}{n+1}\right\}}}\right)^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \right] \mathbf{I} \quad (4.199)$$

Se $\tau_0 = 0$:

$$m_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n}\right)^n \sum_{i=1}^N \frac{R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right) \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha}\right)^{1/n} R_i^3}\right)^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{v}_m \quad (4.200)$$

Usando a hipótese de que o gradiente de pressão é o mesmo para todos os poros:

$$m_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n}\right)^n \sum_{i=1}^N \left(\frac{dp/dx}{2\alpha}\right) \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{dp/dx}{2\alpha}\right)^{1/n} R_i^{\frac{3n+1}{n}}}\right)^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{v}_m \quad (4.201)$$

$$m_f = -2\varepsilon\alpha \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} \right)^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{v}_m \quad (4.202)$$

E o inverso do tensor mobilidade:

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{2\alpha}{\varepsilon} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} \right)^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{I} \quad (4.203)$$

Então, os resultados *power-law* são recuperados. De maneira alternativa, se $n = 1$:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 2\varepsilon\alpha \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{(1-\phi_i)} \right) \frac{R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha} \right) (1-\phi_i)^2 \right. \\ \left. \left(\frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\tau_{wi}}{\alpha} \right) R_i^3 (1-\phi_i)^2 \left\{ \frac{(1-\phi_i)^2}{4} + \frac{2\phi_i(1-\phi_i)}{3} + \frac{\phi_i^2}{2} \right\}} \right) \right] \mathbf{v}_m \quad (4.204)$$

Com a hipótese de que o gradiente de pressão é o mesmo para todos os poros:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_{mi}|^{-1} - 2\varepsilon\alpha \sum_{i=1}^N \left(\frac{R_i^2(1-\phi_i)}{\sum_{i=1}^N R_i^4(1-\phi_i)^2 \left\{ \frac{(1-\phi_i)^2}{4} + \frac{2\phi_i(1-\phi_i)}{3} + \frac{\phi_i^2}{2} \right\}} \right) \right] \mathbf{v}_m \quad (4.205)$$

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_{mi}|^{-1} - 8\varepsilon\alpha \sum_{i=1}^N \left(\frac{(1-\phi_i)R_i^2}{\sum_{i=1}^N (1-\frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4)R_i^4} \right) \right] \mathbf{v}_m \quad (4.206)$$

O inverso do tensor mobilidade é:

$$\mathbf{M}_f = \left[-\frac{2\tau_0}{\varepsilon} \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2 |\mathbf{v}_m|} + \frac{8\alpha}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N \left(\frac{(1-\phi_i)R_i^2}{\sum_{i=1}^N (1-\frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4)R_i^4} \right) \right] \mathbf{I} \quad (4.207)$$

Então, os resultados Bingham são recuperados.

4.6.5 Modelo com Distribuição de Poros e Extensionalidade

A metodologia do banco de dados, que considera não somente poros com geometria viscométrica, como também extensional, pode ser aplicada à abordagem do volume

elementar representativo com distribuição não-uniforme de poros. O termo de interação é escrito de maneira geral como a densidade volumétrica da força total nas paredes dos poros do REV:

$$m_f = \frac{m_f t}{V_{REV}} \quad (4.208)$$

A vazão total escrita em função da velocidade média é:

$$Q = v_m A_{total} = v_m \sum_{i=1}^N \pi R_i^2 \quad (4.209)$$

A vazão também pode ser escrita como o somatório da contribuição de cada poro:

$$Q = \sum_{i=1}^N q_i = \sum_{i=1}^N \pi v_i R_i^2 \quad (4.210)$$

Assim, a velocidade média é escrita como:

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^N v_i R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (4.211)$$

Para que seja feito uso do banco de dados, é necessário computar o número de Reynolds em cada poro. Informações do fluido e da geometria são conhecidas. Porém, ainda é necessário calcular a velocidade média do escoamento em cada poro. Na construção do banco de dados, é utilizado como caso base o caso cilíndrico e os casos com geometria convergente-divergente são baseados no caso cilíndrico. Isto é, equivalentes em volume e, portanto, mantêm a mesma porosidade. Ainda, neste estudo, são considerados apenas casos *power-law*. Então, é feita a hipótese de que a Equação (4.152) pode ser aplicada:

$$v_{f_i} = R_i^{\frac{n+1}{n}} \frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^{\frac{3n+1}{n}}} v_m \quad (4.212)$$

O que permite que o número de Reynolds no poro seja calculado. Para o volume do REV, é assumido que:

$$V_{REV} = N \frac{V_{med,poro}}{\varepsilon} = \frac{\pi L}{\varepsilon} R_{med}^2 N \quad (4.213)$$

Desta forma, é possível estimar a quantidade de poros em cada REV. Para cada poro sorteado, a velocidade é calculada a partir da Eq. (4.152). A partir da velocidade, é obtido o número de Reynolds. Em seguida, o banco de dados é acessado e a força adimensional correspondente é fornecida. A força é então convertida para a forma dimensional. O termo de interação total no REV é então dado por:

$$m_f = \varepsilon \frac{\sum_{i=1}^N f_i}{\sum_{i=1}^N V_i} \quad (4.214)$$

4.7 Escoamento Reativo de Fluidos Viscoelásticos em Plug

Com o objetivo de modelar de forma mais fidedigna a reologia de ácidos complexos, que apresentam elasticidade, os modelos de materiais viscoelásticos são adequados. Modelos mais sofisticados não possuem solução para o perfil de velocidade mesmo em geometrias viscométricas, o que novamente torna o uso do banco de dados necessário. Nos casos simulados, é utilizado o modelo de Giesekus, que é um modelo não-linear e confere a característica *shear-thinning* ao material. Na equação constitutiva, a tensão é decomposta em duas parcelas: uma referente ao solvente newtoniano e outra ao polímero, que são dadas respectivamente por:

$$\boldsymbol{\tau}_s = \eta_s \dot{\boldsymbol{\gamma}} \quad (4.215)$$

$$\boldsymbol{\tau}_p + \lambda \nabla \boldsymbol{\tau}_p + \alpha \frac{\lambda}{\eta_p} (\boldsymbol{\tau}_p \cdot \boldsymbol{\tau}_p) = \eta (\dot{\boldsymbol{\gamma}}) \dot{\boldsymbol{\gamma}} \quad (4.216)$$

onde τ_p é a tensão do polímero, λ é o tempo de relaxação do material e α é o parâmetro responsável por conferir o comportamento *shear-thinning* ao modelo. Quando $\alpha = 0$, o modelo Oldroyd-B é recuperado. A viscosidade em cisalhamento η é dada por [42]:

$$\frac{\eta}{\eta_0} = \frac{\lambda_2}{\lambda} + \left(1 - \frac{\lambda_2}{\lambda}\right) \frac{(1-f)^2}{1 + (1-2\alpha)f} \quad (4.217)$$

onde

$$\eta_0 = \eta_p + \eta_s \quad (4.218)$$

$$\lambda_2 = \lambda \frac{\eta_s}{\eta_0} \quad (4.219)$$

$$f = \frac{1 - \chi}{1 + (1 - 2\alpha)\chi} \quad (4.220)$$

$$\chi^2 = \frac{(1 + 16\alpha(1 - \alpha)(\lambda\dot{\gamma})^2)^{\frac{1}{2}} - 1}{8\alpha(1 - \alpha)(\lambda\dot{\gamma})^2} \quad (4.221)$$

O número de Weissenberg é calculado por:

$$Wi = \lambda \dot{\gamma}_c \quad (4.222)$$

onde $\dot{\gamma}_c$ é a taxa de deformação característica:

$$\dot{\gamma}_c = \frac{u_c}{r_p} \quad (4.223)$$

e o número de Re:

$$Re = \frac{\rho u_c (2r_p)}{\eta_c} \quad (4.224)$$

A viscosidade característica η_c é a função viscosidade em cisalhamento, dada pela Equação (4.217), avaliada na taxa de deformação característica (4.223). O banco de dados pode então ser utilizado para fornecer a força adimensional para cada número de Re e Wi, em diferentes geometrias de poro.

4.8 OpenFOAM

4.8.1 O *software* OpenFOAM

A adoção da Fluidodinâmica Computacional é crescente nos mais diversos ramos da engenharia. Usualmente, análises estruturais são dominadas pelo método numérico de elementos finitos, enquanto fenômenos de transporte geralmente são tratados pelo método de volumes finitos. Os softwares contam com cada uma robustez e acurácia cada vez maiores, incluindo diversos efeitos físicos e modelos. As configurações e resultados podem ser visualizados em uma interface gráfica. A simulação envolve algumas etapas, dentre elas: geração da malha, definição das propriedades dos materiais, condições iniciais e de contorno, definição dos modelos a serem utilizados, aplicação de um solver para realizar o processamento e por fim o pós processamento.

De acordo com Jasak [51], o OpenFOAM (*Open Field Operation and Manipulation*) é uma biblioteca orientada a objeto para Mecânica do Contínuo Computacional, que busca facilidade de implementação de novos modelos, para que os mesmos possam ser validados experimentalmente e sua performance avaliada em aplicações industriais. O OpenFOAM implementa componentes de manipulação de malha, sistemas lineares, suporte para *solvers*, operadores de discretização e modelos físicos na forma de biblioteca, que pode ser acessada por diversos *solvers*. Além disso, são contempladas ferramentas de pré-processamento, aquisição de dados e manipulação de malha.

O OpenFOAM conta com cinco objetos principais:

- Espaço e tempo – a dimensão temporal é dividida em passos de tempo finitos,

definidos para que seja suficiente a descrição do problema. O OpenFOAM utiliza malhas poliédricas, onde uma célula é descrita como uma lista de faces fechadas, formando o seu volume. Uma face é uma lista ordenada de pontos e pontos são listas ordenadas de coordenadas cartesianas, armazenadas na forma de vetor;

- Variável de campo – é comum na mecânica do contínuo o envolvimento de entidades escalares, vetoriais e tensoriais, cada qual sendo aproximada por uma lista de valores em pontos pré-definidos na malha;
- Método de discretização – operam em operadores diferenciais e os transforma numa forma matricial esparsa, que se constitui em um sistema linear, resolvido por um solver linear;
- Bibliotecas de modelagem física – contém diversos modelos para abordar cada problema da maneira mais conveniente, como por exemplo no caso de modelos de turbulência;
- Solver – cada solver é uma ferramenta separada e manipula um conjunto limitado de físicas.

As principais vantagens e diferenciais do *software* OpenFOAM englobam:

- É um *software* de código aberto, que além de permitir que o usuário faça alterações, não requer investimentos financeiros;
- É escrito em linguagem C++, que é bastante difundida, além de ser orientada a objetos;
- Abrange várias físicas e vários problemas da ciência e engenharia;
- Possui uma gama muito ampla de *solvers*, equações, modelos e métodos de discretização;
- Permite paralelização, otimizando o tempo das simulações;
- Inclui ferramentas para manipulação de malha e pós processamento.

4.8.2 Estrutura do *solver* utilizado

O OpenFOAM não possui de forma nativa um *solver* capaz de lidar com o escoamento de fluidos reativos não-newtonianos em meios porosos, sendo necessário a sua implementação. Foi desenvolvido um programa capaz de atender a estas necessidades, considerando:

- Escoamento isotérmico e incompressível;
- Comportamento reológico complexo, envolvendo modelos de fluidos newtonianos generalizados e também viscoelásticos;
- Regime transiente;
- Fluido reativo, com regimes de reação tanto controlado por massa quanto por cinética;
- Cálculo e influência do pH na viscosidade do fluido.

Diversos modelos de fluidos newtonianos generalizados já se encontram implementados nativamente no OpenFOAM, tais como: *power-law*, Carreau, Herschel-Bulkley dentre outros. O programa obtém os modelos através de bibliotecas, objetos pertencentes à classe de modelos reológicos do OpenFOAM. No caso de fluidos viscoelásticos, não há modelos implementados de forma nativa na versão padrão do OpenFOAM. Entretanto, na versão *extend* é possível encontrar tais bibliotecas.

O *solver* proposto, denominado `reactiveComplexRheologyPorousPimpleFoam` tem seu código fonte organizado da seguinte maneira:

- `reactiveComplexRheologyPorousPimpleFoam.C` - é o arquivo principal. Inclui cabeçalhos nativos do OpenFOAM, equações e variáveis, bem como outros referentes ao implementados, tais como o termo de interação presente na Teoria de Mistura ou o modelo de pH. Engloba os *loops* internos e temporais.
- `UEqn.H` - cabeçalho que contém o código para discretizar e resolver o balanço de quantidade de movimento. Obtém o tensor parcial das tensões e o termo de interação através de objetos. Faz a predição de *momentum* caso o usuário configure no dicionário apropriado do caso a ser simulado.
- `pEqn.H` - arquivo que contém o algoritmo de acoplamento pressão-velocidade. Calcula um campo de pressão de forma que este gere velocidades que satisfaçam a equação de conservação de massa.
- `CfEqn.H` - contém modelos para o tensor dispersão, raio de poro, área interfacial disponível para reação no poro, bem como o coeficiente de transferência de massa. Resolve a equação de conservação de espécies.
- `pHEqn.H` - resolve a equação para o cálculo de pH.
- `createFields.H` - cria objetos que representam as variáveis na escala de Darcy.
- `createPoreScaleFields.H` - cria objetos que representam as variáveis e parâmetros na escala de poro.

- `createPorousFields.H` - cria objetos exclusivamente atrelados à matriz porosa.
- `correctPorousProperties.H` - corrige propriedades da matriz porosa, como porosidade e permeabilidade.
- `continuityErrs.H` - contém código que faz com que o programa calcule e informe ao usuário em tempo de execução o erro na equação de continuidade.

As bibliotecas com os modelos reológicos, de pH e do termo de interação possuem estrutura de código mais simples que não será detalhada aqui.

Capítulo 5

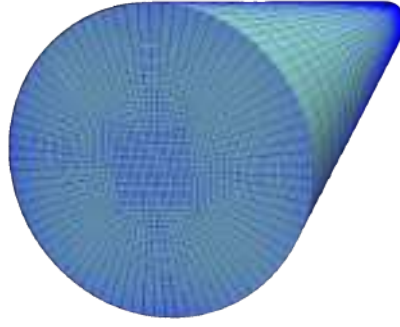
Resultados

5.1 Simulações em Escala de Poro

5.1.1 Validação Numérica

Para construir um banco de dados que seja capaz de fornecer o termo de interação de forma numérica para o *solver* na escala de Darcy, primeiramente foram realizados diversos testes numéricos para averiguar a confiabilidade dos resultados obtidos pelas simulações na escala de poro, considerando a geometria representativa descrita no Capítulo 4.

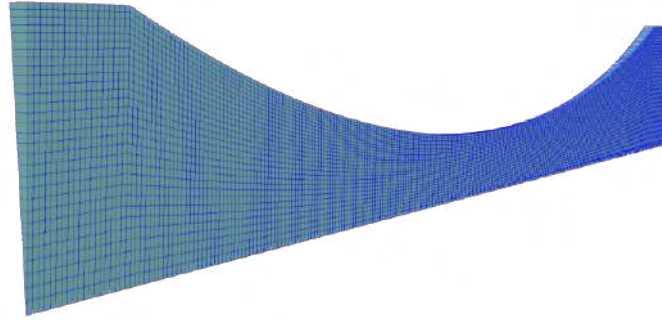
Devido à grande quantidade de simulações que devem ser feitas para cobrir uma gama prática de casos, é desejável que os *setups* de todos os casos tenham o menor custo computacional possível. Tal otimização foi realizada graças a utilização de uma malha axissimétrica, que simula apenas uma fatia do canal. Na Figura 5.1 é possível visualizar a malha completa e a axissimétrica, respectivamente. Ambas simulam o mesmo domínio físico.



(a) Malha completa para os casos de poro cilíndrico.



(b) Malha axissimétrica para os casos de poro cilíndrico.



(c) Malha axissimétrica para os casos de poro convergente-divergente com $\delta = 0.4$.

Figura 5.1: Três tipos de malhas empregadas nas simulações. (a) completa; (b) axissimétrica sem extensão; (c) axissimétrica convergente-divergente.

Pelo fato da malha axissimétrica ser constituída de uma fatia de 5 graus do tubo completo, isso faz com que a mesma seja 72 vezes menor, diminuindo drasticamente o número de células no domínio computacional. Portanto, o tempo necessário para realizar cada simulação é significativamente menor. É esperado que a malha axissimétrica forneça os mesmos resultados, através de condições de contorno específicas pré-implementadas no OpenFOAM.

A convergência de malha e da força nas paredes foi analisada primeiramente para casos cilíndricos newtonianos e *power-law* pois estes apresentam solução analítica. A tabela 5.1 lista as características das malhas utilizadas. As condições de contorno estão na tabela 5.2. O solver utilizado foi o `simpleFoam`.

Fluido Newtoniano

Para o número de Reynolds analisado de 0.00333, as forças na parede obtida estão na tabela 5.3 , bem como o erro relativo ao resultado analítico.

ID	Tipo	Elementos Radiais	Elementos	Total Elementos
1	Axissimétrico	10	1998	143856
2	Axissimétrico	20	4218	303696
3	Axissimétrico	30	6438	463536
4	Axissimétrico	40	8658	623376
5	Completo	n/d	216000	216000
6	Completo	n/d	513000	513000

Tabela 5.1: Malhas para os casos de validação cilíndricos.

Contorno	Axissimétrico	Completo
Entrada/Saída	cíclico	cíclico
Parede (p)	$\nabla p \cdot \mathbf{n}$	$\nabla p \cdot \mathbf{n}$
Parede (U)	$\mathbf{u} = 0$	$\mathbf{u} = 0$
Paredes frontal e traseira	simetria	não possui

Tabela 5.2: Condições de contorno para os casos de validação cilíndricos.

ID	Caso	Numérico (N)	Analítico (N)	Erro
1	Axi/10	3,95157e-9	3,92699e-9	0,63 %
2	Axi/20	3,96432e-9	3,92699e-9	0,95 %
3	Axi/30	3,96673e-9	3,92699e-9	1,01 %
4	Axi/40	3,96757e-9	3,92699e-9	1,03 %
5	Tubo	2,83164e-7	2,82743e-7	0,15 %
6	Tubo Maior	2,82987e-7	2,82743e-7	0,09 %

Tabela 5.3: Comparação entre os dados obtidos numericamente com os dados analíticos.

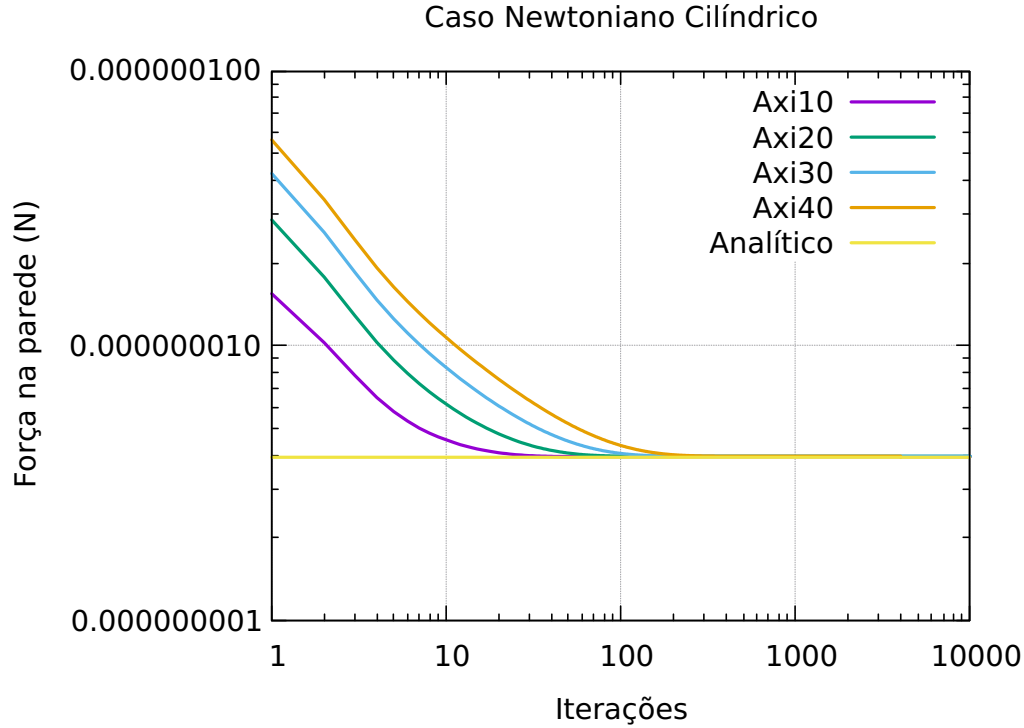


Figura 5.2: Convergência da força para o caso das malhas axissimétricas em geometria cilíndrica. Casos newtonianos.

ID	Caso	Numérico (N)	Analítico (N)	Erro
7	Axi/10	1,32265e-9	1,31407e-9	0,65 %
8	Axi/20	1,32648e-9	1,31407e-9	0,94 %
9	Axi/30	1,32719e-9	1,31407e-9	1,00 %
10	Axi/40	1,32744e-9	1,31407e-9	1,02 %
11	Tubo	9,47247e-8	9,46133e-8	0,12 %

Tabela 5.4: Comparação entre os dados obtidos numericamente com os dados analíticos.

Todos os casos apresentaram erros consideravelmente baixos. As malhas axissimétricas com maior quantidade de elementos apresentaram erro relativo maior. Isto ocorreu devido ao número máximo de iterações estipulado. Apesar de teoricamente serem capazes de fornecer um resultado mais acurado, seria necessário um número maior de iterações para reduzir o erro. Este efeito pode ser visualizado na Figura 5.2. A convergência da força na parede para os casos de malha completa está na Figura 5.3.

Fluido *Power-Law*

Para o número de Reynolds analisado de $3,96 \times 10^{-9}$, as forças na parede obtida estão na tabela 5.4 , bem como o erro relativo ao resultado analítico.

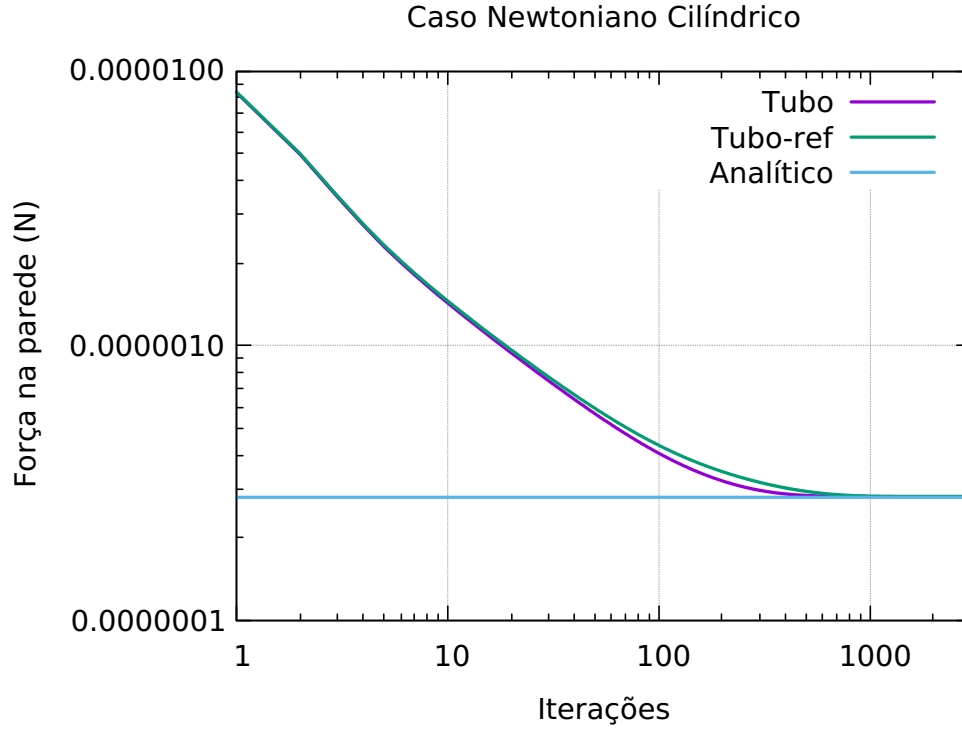


Figura 5.3: Convergência da força para o caso das malhas completas em geometria cilíndrica. Casos newtonianos.

Esses casos também apresentaram erro relativo baixo e é notado o mesmo comportamento dos casos newtonianos a respeito da resposta das malhas maiores. Este efeito para os casos *power-law* pode ser visualizado na Figura 5.4. A convergência da força na parede para os casos de malha completa está na Figura 5.5.

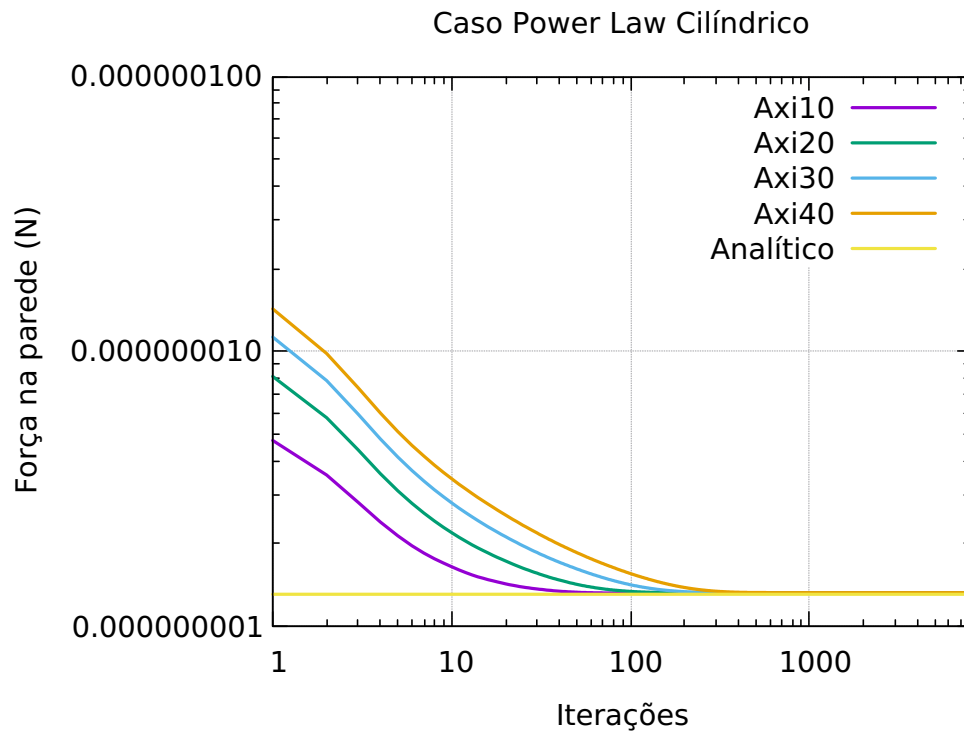


Figura 5.4: Convergência da força para o caso das malhas axissimétrica em geometria cilíndrica. Casos *power-law*.

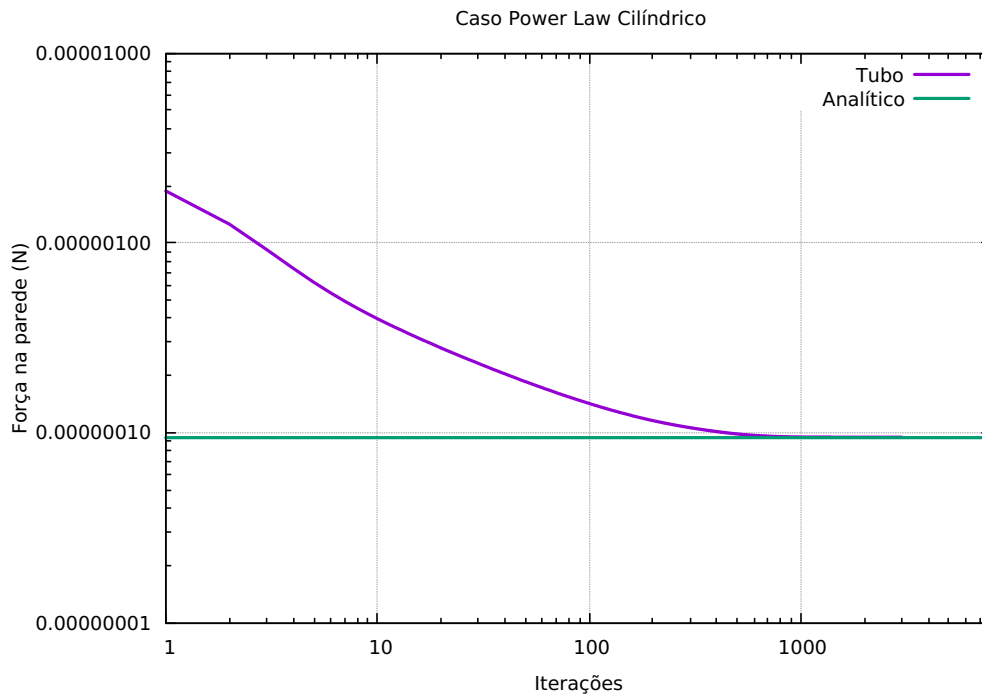
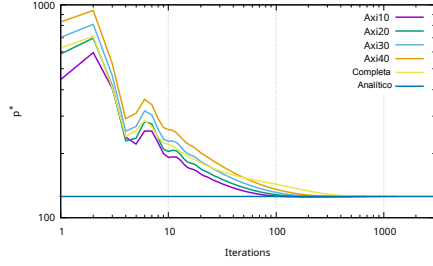
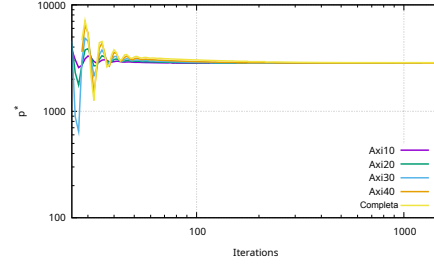


Figura 5.5: Convergência da força para o caso da malha completa em geometria cilíndrica. Caso *power-law*.

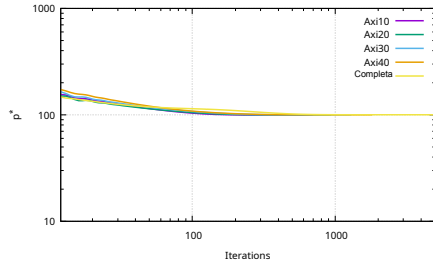
Fluido Carreau



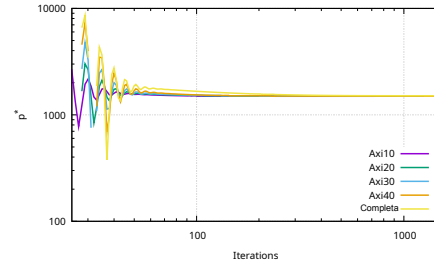
(a) Newtoniano. Poro cilíndrico



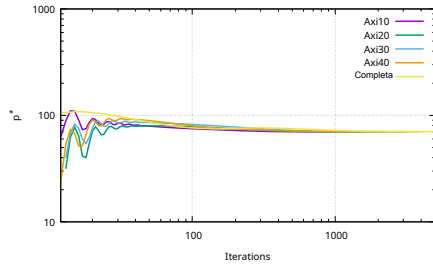
(b) Newtoniano. $\delta=0,4$.



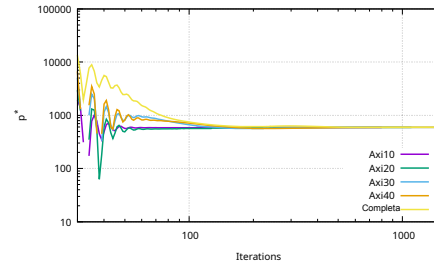
(c) Carreau, $n=0,8$. Poro cilíndrico



(d) Carreau, $n=0,8$. $\delta=0,4$.



(e) Carreau, $n=0,5$. Poro cilíndrico



(f) Carreau, $n=0,5$. $\delta=0,4$.

Figura 5.6: Convergência de malha para a força adimensional. Casos Carreau. $Re = 1$.

A Figura 5.6 mostra a convergência da força adimensional para casos cilíndricos e convergente-divergente, com $Re = 1$, para casos Carreau. São comparados resultados da malha axissimétrica com a malha completa de referência. Todas as malhas apresentaram boa convergência. Para fins de obter boa precisão aliada a baixo custo computacional, foi escolhida a malha axissimétrica com 30 elementos na direção radial.

5.1.2 Casos para Base de Dados

Os parâmetros avaliados para a construção da base de dados estão listados na tabela 5.5.

Os valores para o raio de poro r_p se referem ao caso cilíndrico ($\delta_e = 0$), que foram

r_p (m)	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	-	-
Re	10^{-6}	10^{-4}	10^{-2}	1	10
δ_e	0	0.2	0.4	0.6	0.8
n	1	0.5	0.8	1.2	-

Tabela 5.5: Parâmetros considerados para as simulações em escala de poro.

considerados os casos base. Os casos com extensionalidade foram derivados destes. Para cada modelo de fluido e seus parâmetros, é necessário especificar a geometria através do raio de poro e do grau de extensionalidade. Por fim, são avaliados os resultados em função do número de Reynolds.

Fluido Newtoniano

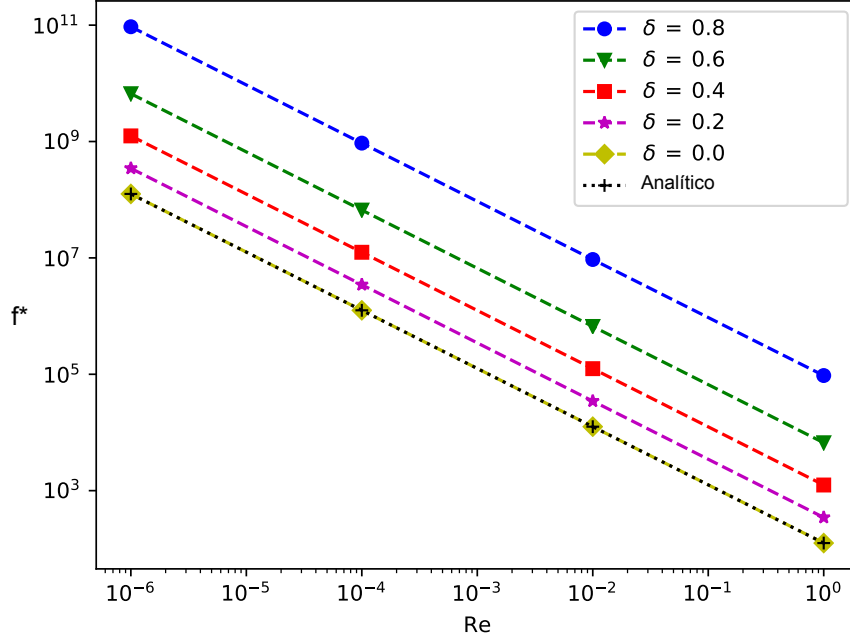


Figura 5.7: Força adimensional viscosa para caso newtoniano com raio de poro de $1\mu m$.

Para todos os casos da Figura 5.7, foi observado um comportamento linear da força adimensional em relação ao inverso do número de Reynolds. Os casos com valor de extensão nula não apresentaram valores nulas para a força de pressão, conforme esperado, pois estes são os casos de tubo cilíndrico. Outro resultado esperado é o fato de não haver mudança nas curvas para diferentes raios de poro, pois o número de Reynolds entre estes casos foi mantido. Também, há boa concordância com o caso analítico, existente para o caso de canal cilíndrico.

Fluido *Power-Law Shear-thinning*

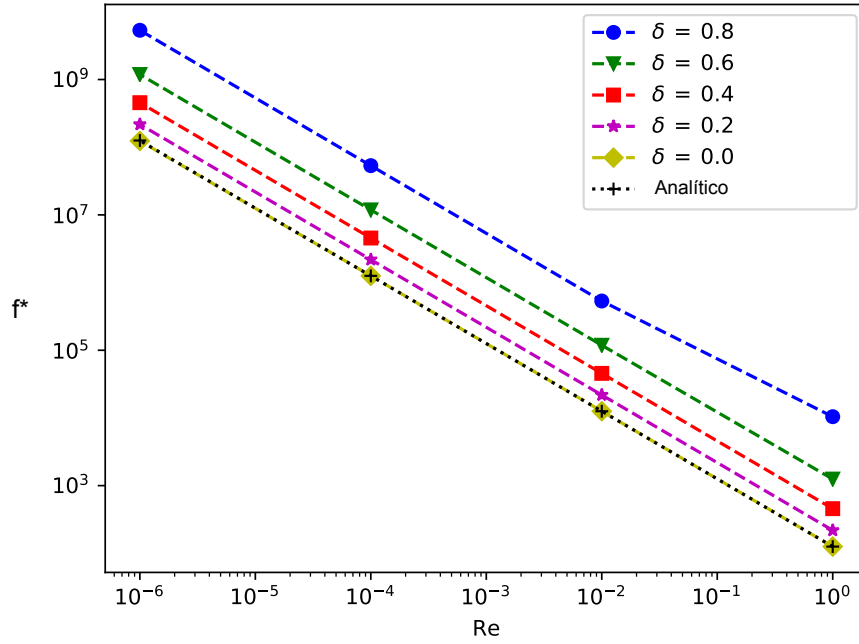


Figura 5.8: Força adimensional viscosa para caso $n = 0.5$ com raio de poro de $1\mu m$.

Nos resultados *power-law shear-thinning*, na Figura 5.8 foi observada a mesma tendência linear, embora os casos cilíndricos estejam mais afastados dos casos convergente-divergente. Novamente, não há força de pressão para os casos com extensão nula e não há mudança entre casos com diferentes raios de poro. Os resultados com tendência linear são esperados [5]. Alguns desvios são notados, principalmente no caso extremo de maior grau de extensionalidade e maior número de Reynolds.

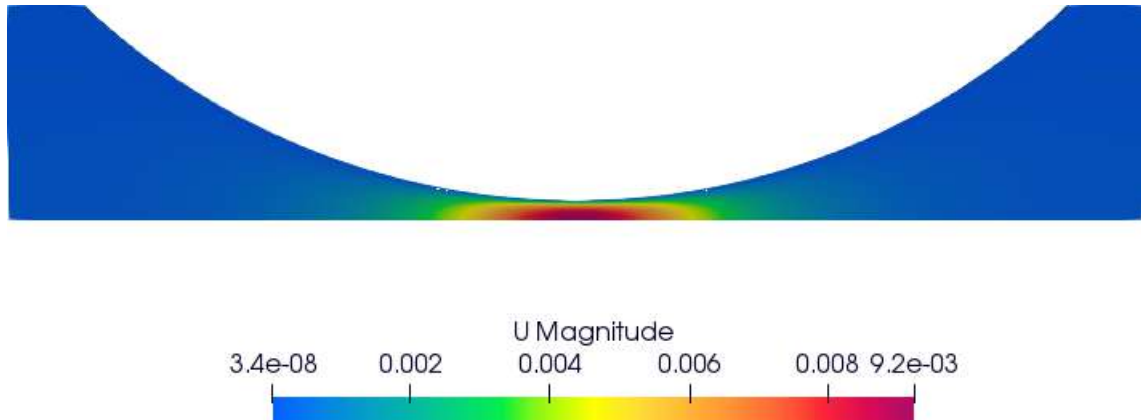


Figura 5.9: Campo de velocidade para o caso *shear-thinning* ($n=0.50$), raio de poro de $1\mu m$, grau de extensionalidade de 0.8 e número de Reynolds de 0.01.

O campo de velocidade para um dos casos *shear-thinning* está na Figura 5.9. O escoamento é incompressível e, portanto, é esperado que a velocidade seja maior na região com menor raio. A simetria do perfil também é esperada, pelo fato da geometria ser simétrica. As linhas de corrente para outro caso *shear-thinning* estão na Figura 5.10. Neste caso, não há recirculação.

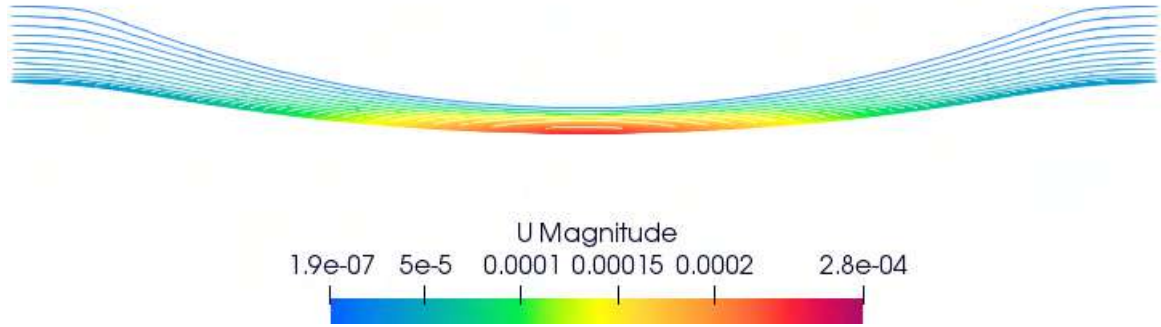


Figura 5.10: Linhas de corrente para o caso *shear-thinning* ($n=0.50$), raio de poro de $10\mu m$, grau de extensionalidade de 0.4 e número de Reynolds de 0.01.

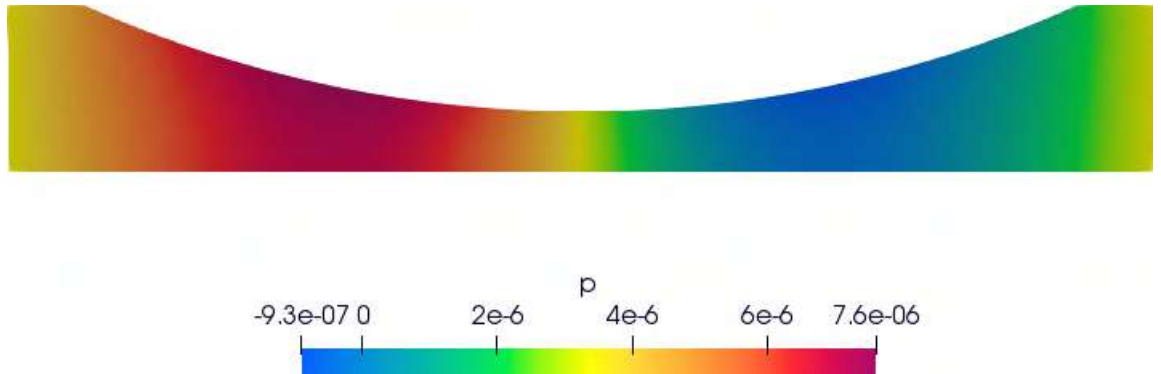


Figura 5.11: Campo de pressão para o caso *shear-thinning* ($n=0.50$), raio de poro de $10\mu m$, grau de extensionalidade de 0.4 e número de Reynolds de 0.01.

Fluido *Power-Law Shear-thickening*

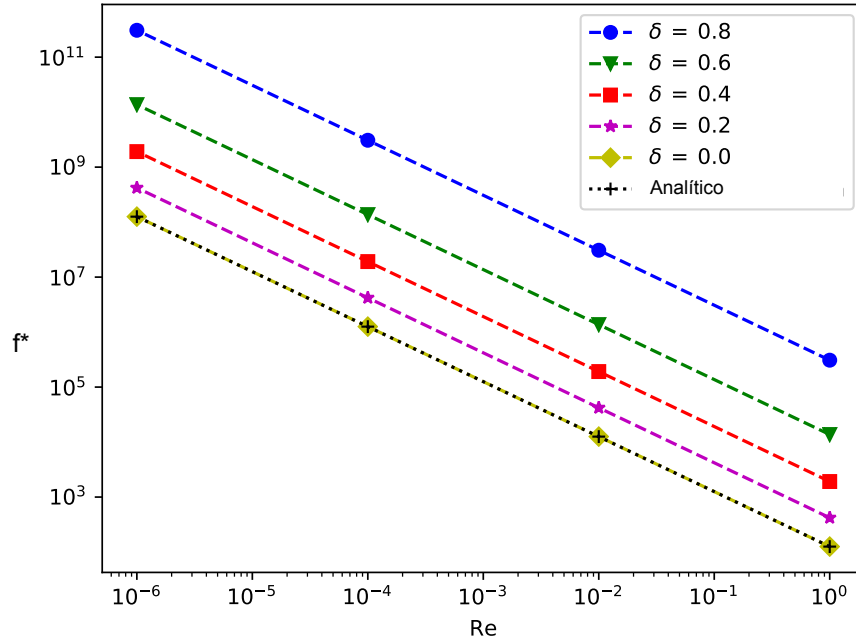


Figura 5.12: Força adimensional viscosa para caso $n = 1.2$ com raio de poro de $1\mu m$.

Nos casos *power-law shear-thickening*, na Figura 5.12, a tendência continua sendo linear, tendo alguns desvios na inclinação da reta, porém menos que nos casos *shear-thinning*. Os resultados para o caso cilíndrico apresentaram boa concordância com o caso analítico.

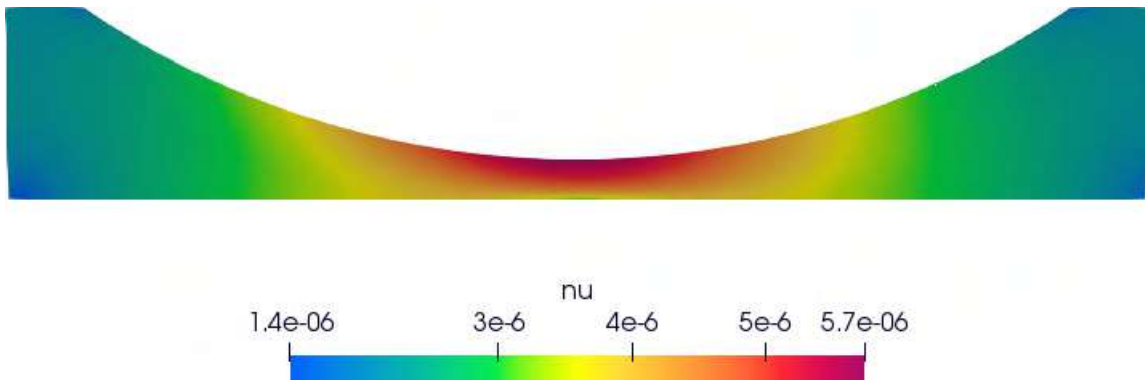


Figura 5.13: Campo de viscosidade cinemática para o caso *shear-thickening* ($n=1.20$), raio de poro de $1\mu m$, grau de extensionalidade de 0.6 e número de Reynolds de 1.

Na Figura 5.13 está o campo de viscosidade cinemática para um dos casos simulados. Por ser referente a um caso *shear-thickening*, é esperado que a viscosidade seja maior onde há maiores taxas de deformação, estando estas presentes próximas

à garganta do canal, onde a velocidade é maior devido a redução de seção reta característica da geometria convergente-divergente. Na Figura 5.14 está o campo de taxa de deformação para um caso com menor grau de extensão e menor número de Reynolds, mas que também concentra as maiores taxas junto ao meio do canal onde a altura é menor.

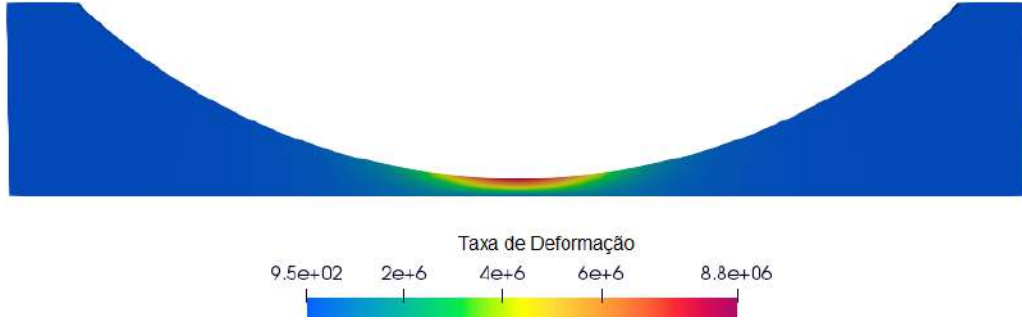


Figura 5.14: Taxa de deformação para caso $n = 1.2$ com raio de poro de $1\mu m$, $\delta = 0.8$ e $Re = 0.01$.

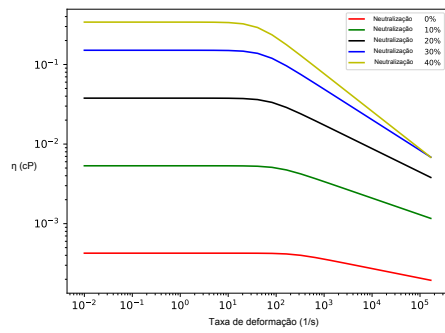
Fluido Carreau

Para a parte do banco de dados composta pelo modelo de fluido de Carreau, foram utilizados dados fornecidos quanto ao comportamento de ácidos usados em campo, em diferentes níveis de neutralização. A Figura (5.15) mostra as curvas de viscosidade para os níveis de neutralização considerados, além da variação dos parâmetros do modelo em função da neutralização. Como não há informação na curva de viscosidade sobre o comportamento do fluido para altas taxas de deformação, foi considerado $\eta_\infty = 0$.

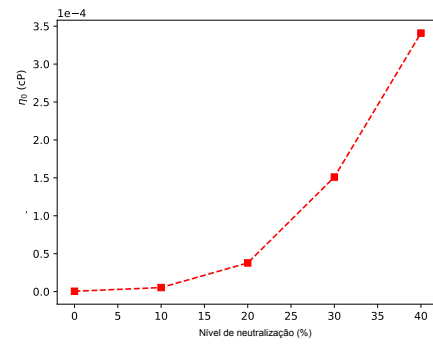
A Figura (5.16) mostra campos de pressão e velocidade para os casos Carreau em dois níveis de extensão, para o mesmo número de Reynolds. Ao comparar os dois campos de pressão, fica claro que a pressão calculada pelas simulações na região de entrada é maior no caso com maior extensão, o que é esperado pelo fato do poro com maior extensão oferecer maior resistência ao escoamento.

Para os casos com $n = 0.5$ e 0.8 , são apresentados os resultados da força adimensional em função do número de Reynolds na Figura (5.17). Assim como nos casos newtoniano e *power-law*, o comportamento linear da força adimensional em função do número de Reynolds é mantido. Também há a mesma tendência esperada de que quanto maior o nível de extensão, maior a força adimensional. Neste caso, não há caso analítico a ser comparado no caso de poro cilíndrico.

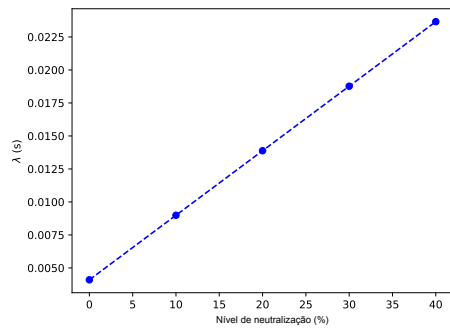
O efeito do fluido, visto na Figura (5.18), também é qualitativamente semelhante aos casos newtoniano e *power-law*, onde há proximidade entre as curvas para o caso de poro sem geometria extensional e quanto maior o valor de δ , maior o afastamento das curvas para os diferentes casos.



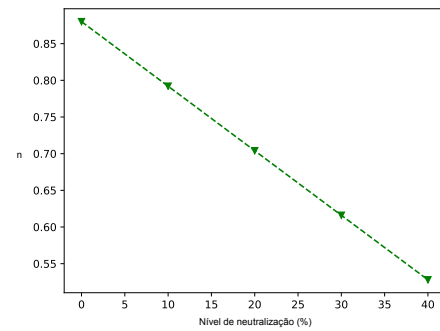
(a) Curvas de viscosidade.



(b) Parâmetro η_0 .

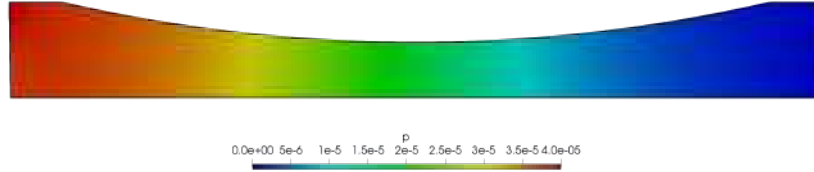


(c) Parâmetro λ .

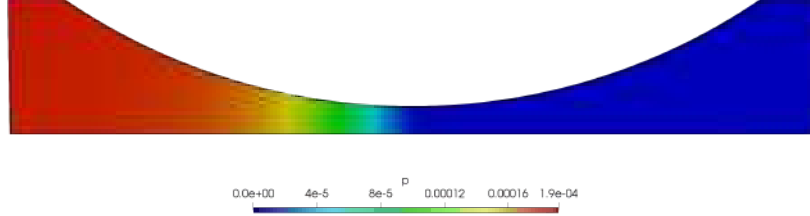


(d) Parâmetro n .

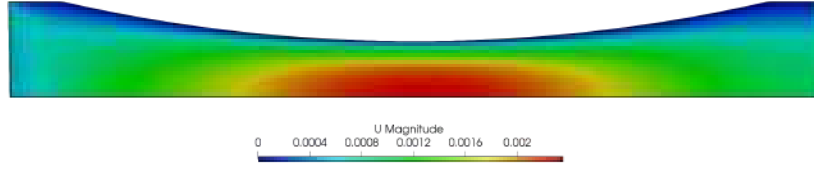
Figura 5.15: Curvas de viscosidade e comportamento dos parâmetros para os fluidos Carreau analisados.



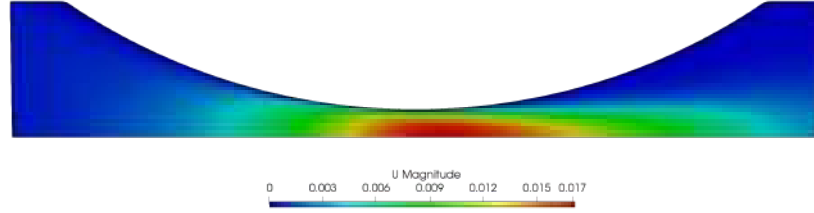
(a) Campo de pressão para caso Carreau com $\delta = 0.2$.



(b) Campo de pressão para caso Carreau com $\delta = 0.6$.



(c) Campo de velocidade para caso Carreau com $\delta = 0.2$.



(d) Campo de velocidade para caso Carreau com $\delta = 0.6$.

Figura 5.16: Casos Carreau com $n = 0.5$. $Re = 1$.

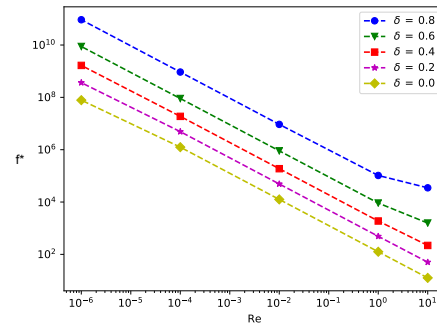
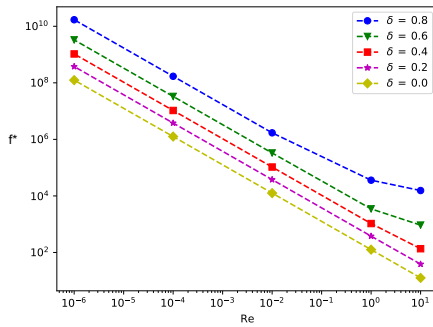
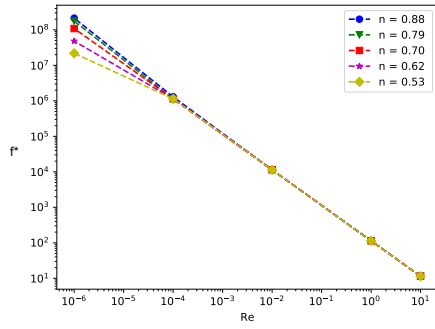
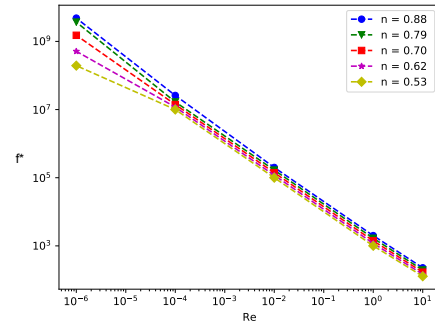


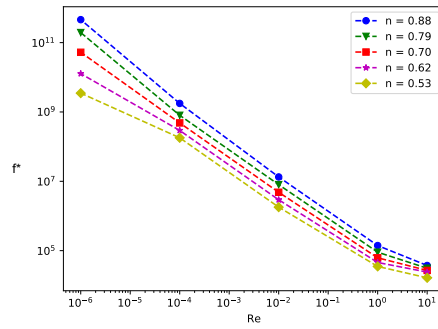
Figura 5.17: Força adimensional para casos Carreau com $n = 0.50$ e $n = 0.80$



(a) $\delta = 0$.



(b) $\delta = 0,4$.



(c) $\delta = 0,8$.

Figura 5.18: Forças adimensionais para fluido Carreau. Geometria de poro convergente-divergente com $\delta = 0.0, 0.4$ e 0.8 .

Efeito do Modelo Reológico

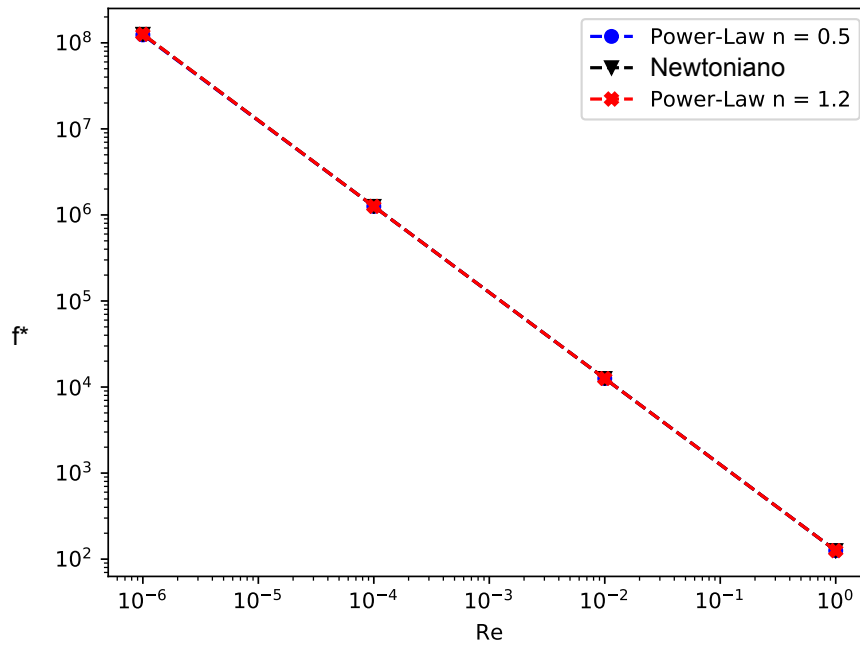


Figura 5.19: Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.0$.

Para os modelos de fluido analisados, não houve mudança na força adimensional para o caso de grau de extensão nula, correspondente ao caso cilíndrico, conforme verificado na Figura 5.19.

Quando um pequeno grau de extensão é inserido, como de 0.2 na Figura 5.20, ocorre um pequeno afastamento das curvas, sendo que quanto maior o valor de n , maior a força e a tendência se mantém para maiores graus de extensão.

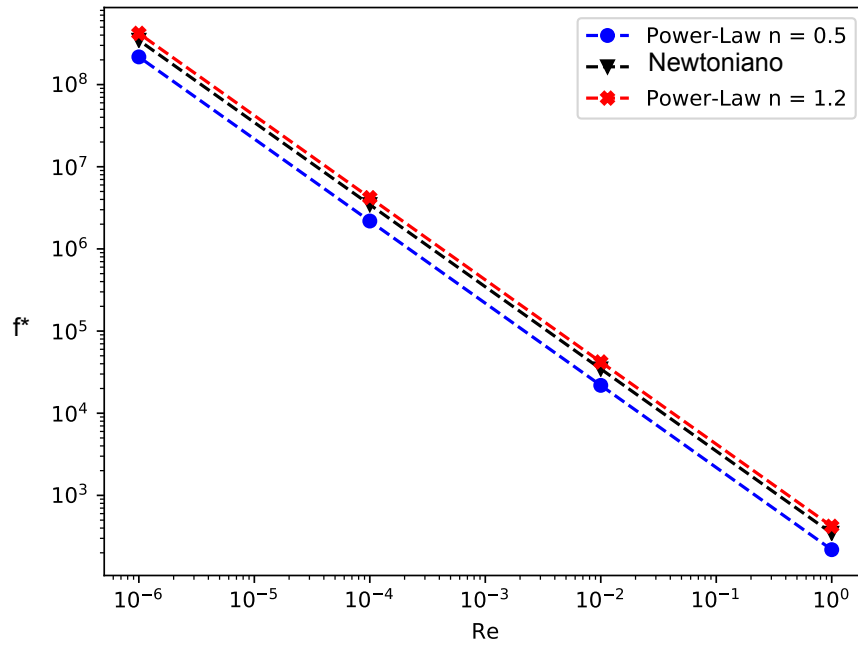


Figura 5.20: Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.2$.

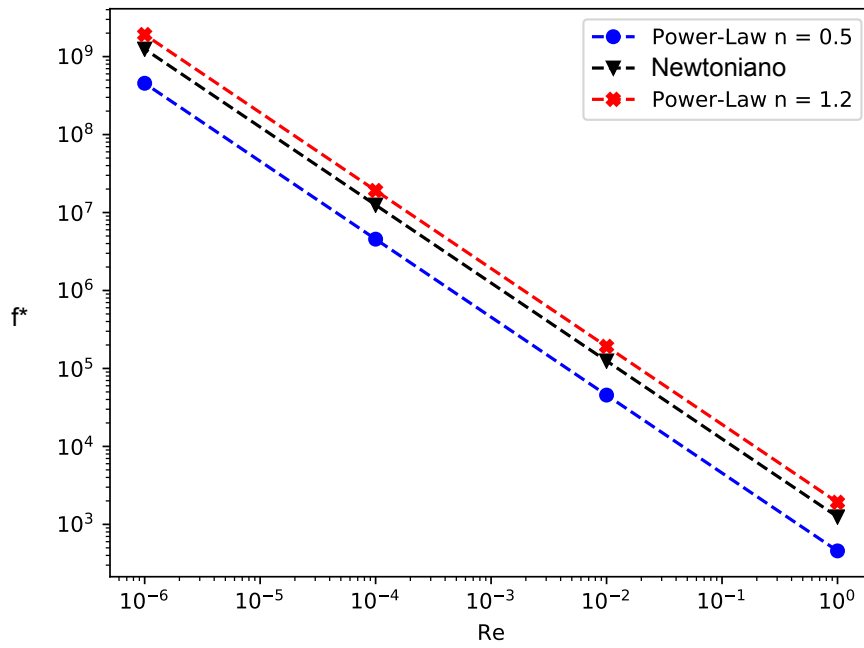


Figura 5.21: Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.4$.

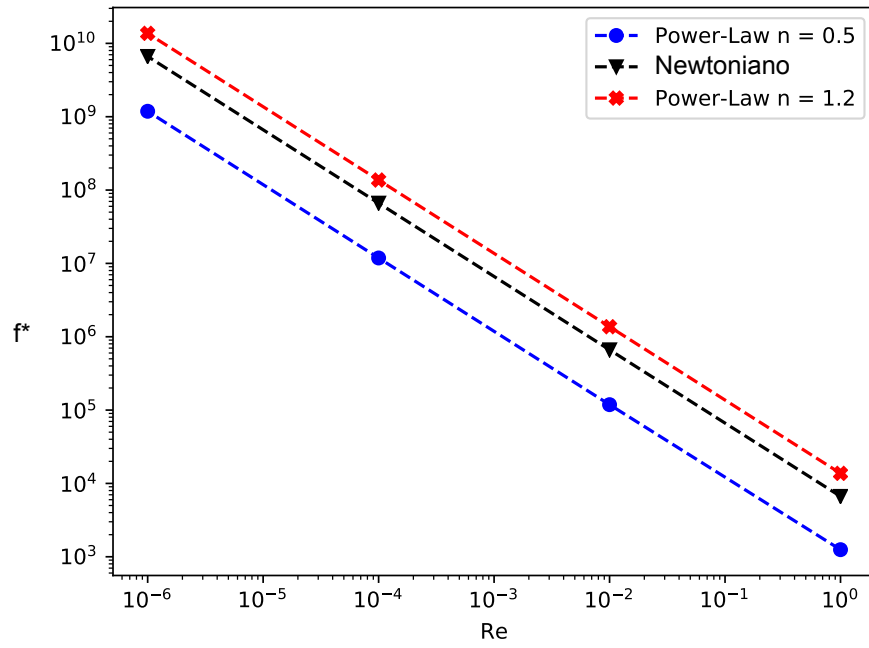


Figura 5.22: Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.6$.

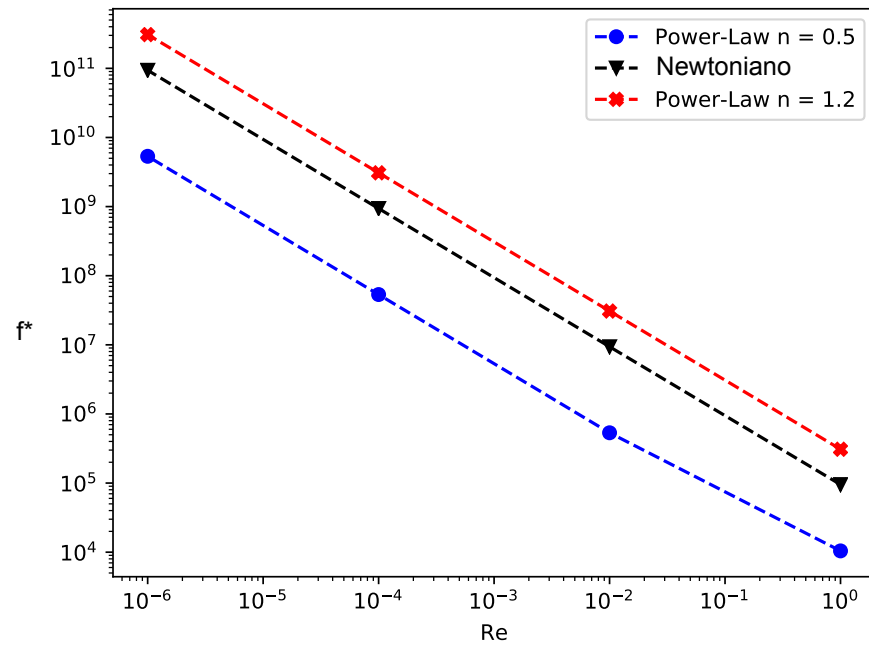


Figura 5.23: Força adimensional para os fluidos testados com $\delta = 0.8$.

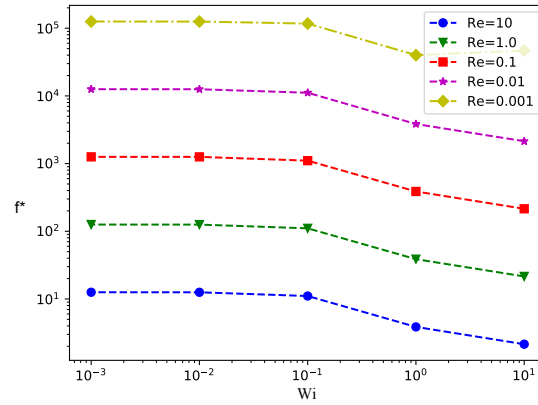


Figura 5.24: Força adimensional em função de Wi para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.15$.

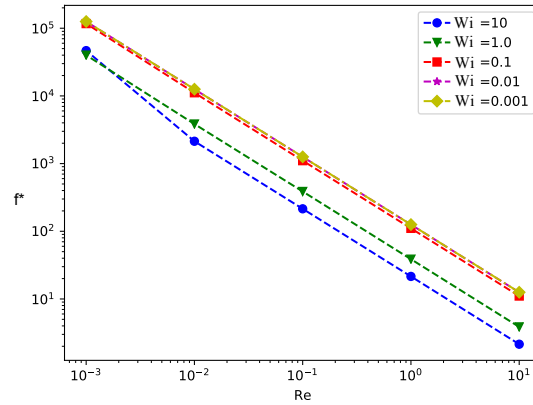


Figura 5.25: Força adimensional em função de Re para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.15$.

Modelo Giesekus

Para obter resultados em escala de *plug* para um fluido com reologia complexa, usando o modelo de Giesekus, é necessária a aplicação do banco de dados, mesmo para poros com geometria viscométrica. Pela natureza viscoelástica do material, é necessário ter informação da escala de poro não apenas em função do número de Reynolds como também do número de Weissenberg. Na Figura (5.24) estão as forças adimensional em função do número de Wi para diferentes valores de Re e $\alpha = 0.15$. A força adimensional diminui conforme Wi aumenta, isto é, a medida que mais efeito elástico é conferido ao modelo.

Os resultados também são plotados em função do número de Reynolds, na Figura (5.25). Os resultados mostram um comportamento semelhante ao que foi observado no caso dos fluidos newtonianos generalizados, para todos os números de Wi analisados.

Na Figura (5.26) estão as forças adimensionais em função do número de Reynolds para casos com $\alpha = 0.3$. Os resultados são análogos aos obtidos para os casos

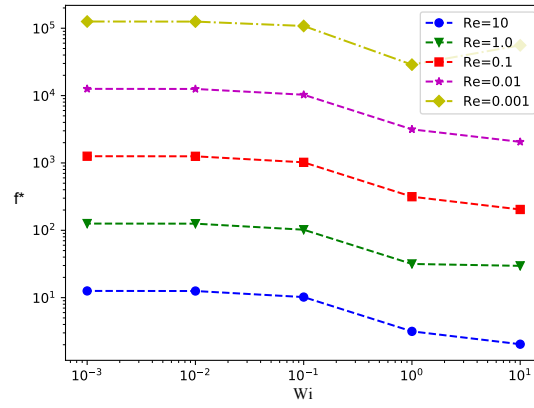


Figura 5.26: Força adimensional em função de Wi para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.30$.

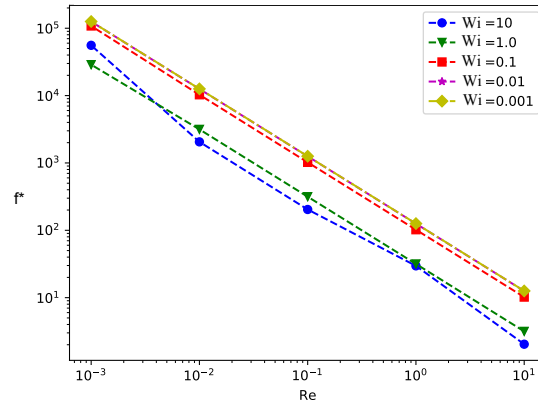


Figura 5.27: Força adimensional em função de Re para $\delta = 0$ e $\alpha = 0.30$.

$\alpha = 0.15$. Isso permanece evidente nas forças em função do número de Reynolds, na Figura (5.27).

5.2 Simulações em Escala de Darcy

5.2.1 Condições Iniciais e de Contorno

Com o objetivo de avaliar a influência do modelo *power-law* em relação ao newtoniano, bem como o efeito do modelo proposto de influência do pH, todos os casos foram inicializados com o mesmo campo de porosidade e permeabilidade. Os campos iniciais estão, respectivamente, nas Figuras 5.28 e 5.29.

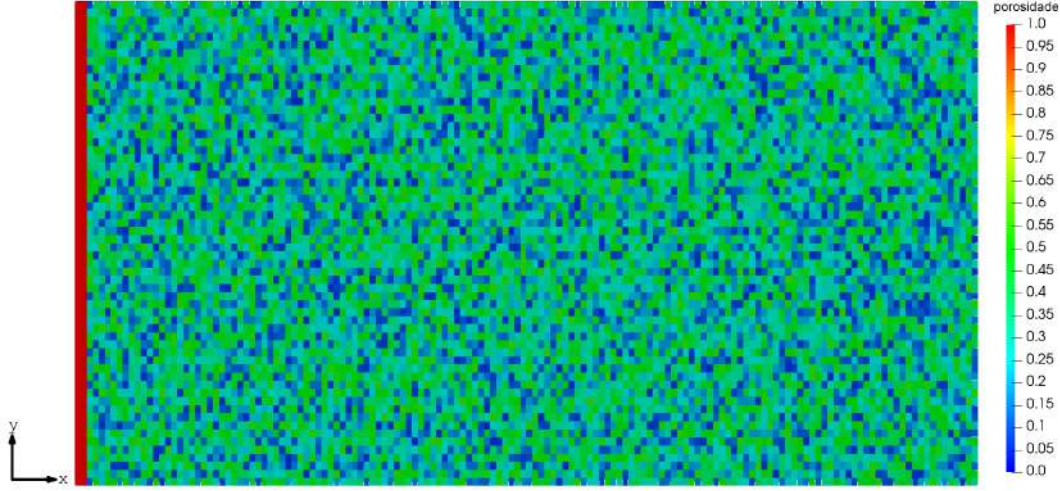


Figura 5.28: Campo de porosidade inicial para todos os casos avaliados.

O campo inicial de porosidade foi gerado de forma aleatória com o valor de porosidade média estipulado em 0.4 e desvio de 0.25. Na região próxima a entrada do *plug*, há uma faixa de porosidade com valor unitário. Isto permite que o perfil de velocidade na entrada do meio poroso seja consistente com a permeabilidade do meio.

Variável	Cond. Inicial	Entrada	Saída	Paredes
\mathbf{v}	$\mathbf{v} = 0$	$\mathbf{v} = \hat{f}(Da)$	$\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$	<i>slip</i>
p	$p = 0$	$\nabla p \cdot \mathbf{n} = 0$	$p = 0$	$\nabla p \cdot \mathbf{n} = 0$
Ca	$Ca = 0$	$Ca = 135$	$\nabla Ca \cdot \mathbf{n} = 0$	<i>slip</i>
pH	$pH = 7$	$\nabla pH \cdot \mathbf{n} = 0$	$\nabla pH \cdot \mathbf{n} = 0$	$\nabla pH \cdot \mathbf{n} = 0$
ε	0.4 ± 0.25	$\nabla \varepsilon \cdot \mathbf{n} = 0$	$\nabla \varepsilon \cdot \mathbf{n} = 0$	$\nabla \varepsilon \cdot \mathbf{n} = 0$
\mathbf{K}	$\mathbf{K} = \hat{f}(\varepsilon)$	$\nabla \mathbf{K} \cdot \mathbf{n} = 0$	$\nabla \mathbf{K} \cdot \mathbf{n} = 0$	$\nabla \mathbf{K} \cdot \mathbf{n} = 0$

Tabela 5.6: Condições iniciais e de contorno para todos os casos.

As condições iniciais e de contorno para todas as variáveis estão na tabela 5.6.

A permeabilidade no instante inicial da simulação é gerada a partir de um modelo de escala de poro, que é função apenas da porosidade, como na Eq. 4.28. Na Figura 5.29 percebe-se que a distribuição é altamente heterogênea, assim como a distribuição de porosidade.

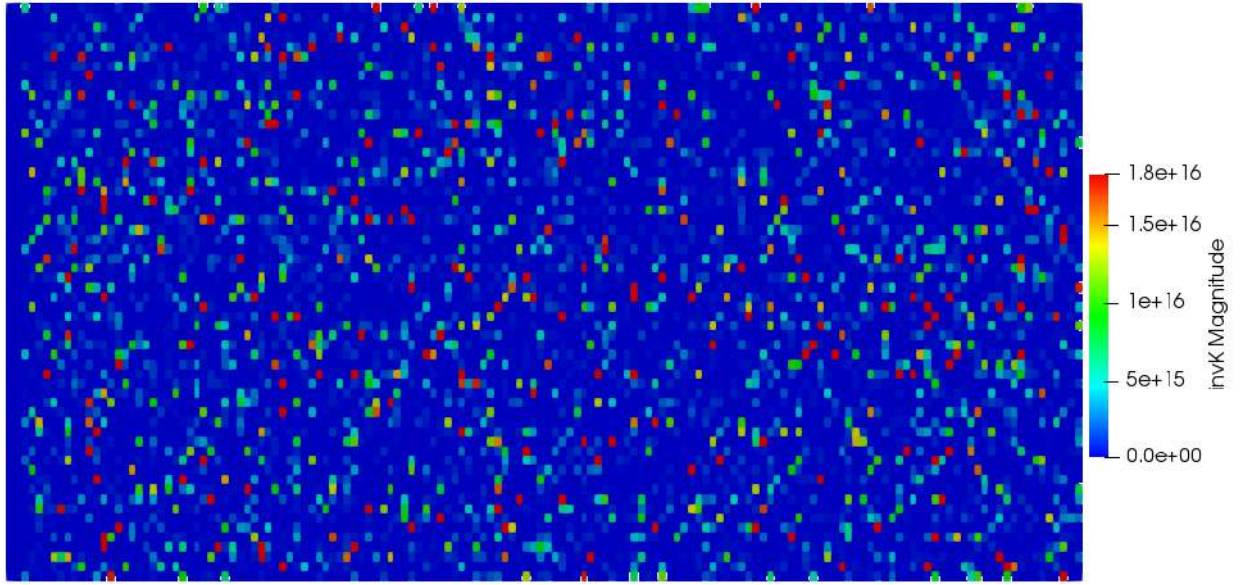


Figura 5.29: Distribuição inicial do inverso da permeabilidade para todos os casos avaliados.

Foi utilizada uma malha estruturada hexaédrica em todas as simulações. As dimensões do *plug*, bem como a malha estão na Figura 5.30. A malha é composta por 9000 elementos.

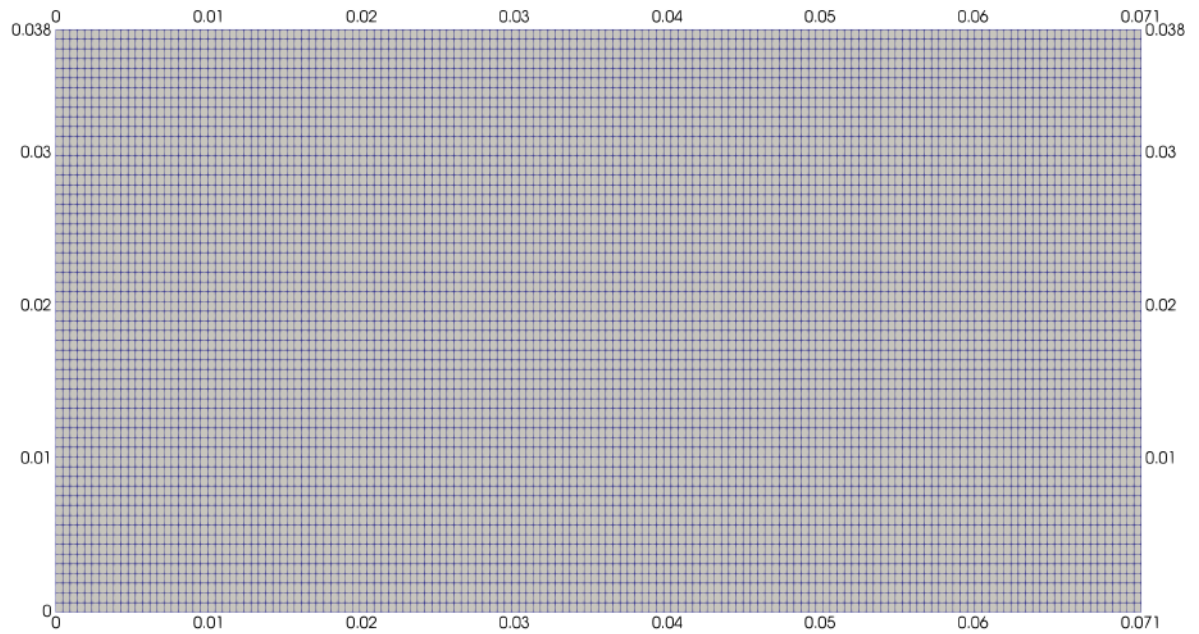


Figura 5.30: Malha usada nas simulações e as dimensões do domínio, em metros.

5.2.2 Padrões de Dissolução

Nesta seção são apresentados os resultados para os campos obtidos com as simulações, principalmente os campos de porosidade, que caracterizam os perfis de disso-

lução obtidos no processo de acidificação. Em todos os casos, $pH = 2.2$ quando a concentração de ácido é igual a concentração de entrada. Quando a concentração é nula, $pH = 0$, de acordo com a equação 4.125.

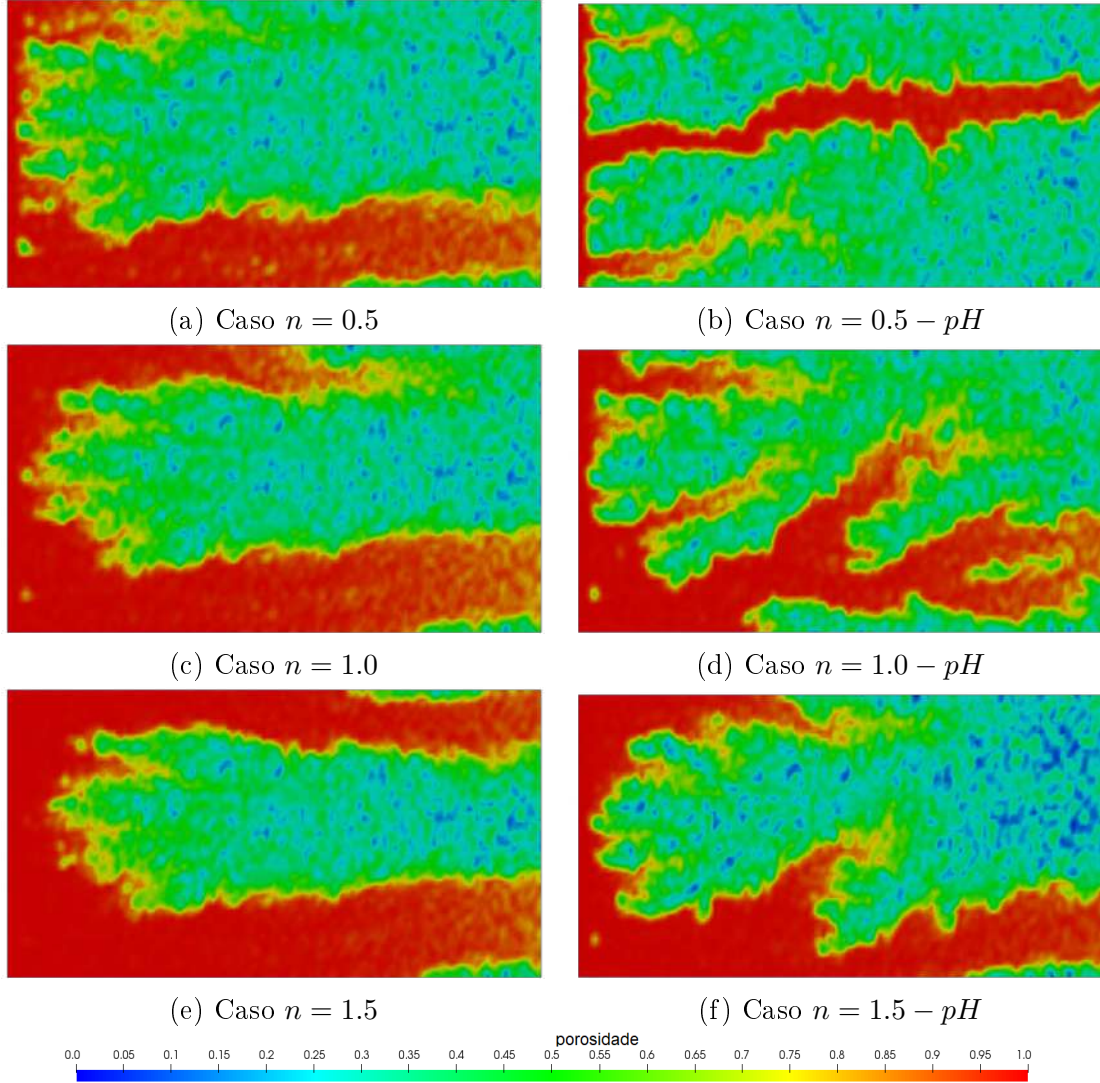


Figura 5.31: Perfis de porosidade para casos newtoniano e *power-law* com $Da = 10$. Figura a: tempo de breakthrough em 1100 s; b: 1100 s; c: 1300 s; d: 1300 s; e: 1600 s; f: 1400 s.

Na Figura 5.31, estão os perfis de porosidade para os casos com número de Damköhler igual a 10. Para o caso newtoniano (c), há a transição do padrão de dissolução uniforme, encontrado em números menores de Da , para o padrão ramificado. A ramificação superior no domínio é bem pronunciada, porém o *breakthrough* é alcançado pelo canal inferior. Para o caso *shear-thinning* (a), o mesmo padrão foi obtido, porém a ramificação superior foi menor. No caso *shear-thickening*, a ramificação evoluiu e formou um segundo canal na parte superior do domínio, aumentando significativamente a permeabilidade no *plug*.

No caso com menor valor de n e influência do pH, ocorreu o efeito de divergência

na formação do canal, pois este se desenvolveu na parte superior. Nos casos (a,c,e), a tendência observada foi do canal se formar na parte inferior do domínio. Apenas no caso com $n = 0.5$ o impacto do pH na viscosidade do fluido foi suficiente para causar o efeito de divergência. Nos casos newtoniano e *shear-thickening* (c, e) houve a formação de mais ramificações. Os casos com $n = 0.5$ apresentaram melhor performance pois o *breakthrough* foi atingido em menor tempo, além do benefício do caso (b) ter acidificado uma região menos propensa.

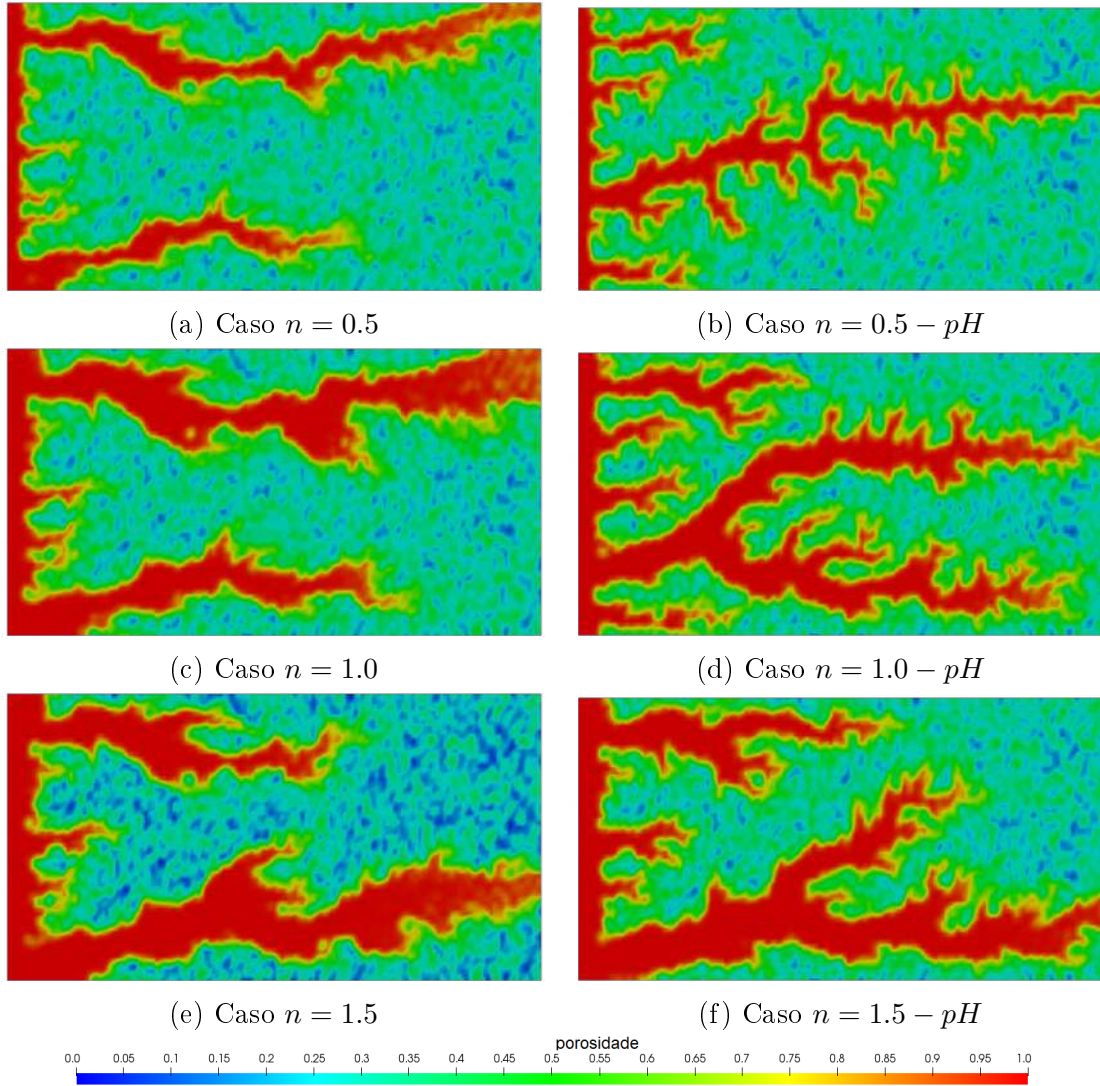


Figura 5.32: Perfis de porosidade para casos newtoniano e *power-law* com $Da = 50$. Figura a: tempo de breakthrough em 2600 s; b: 3000 s; c: 3900 s; d: 4500 s; e: 4200 s; f: 4800 s.

Para os casos de $Da = 50$, vistos na Figura 5.32, houve uma tendência de formação do canal na parte superior do domínio. O padrão de dissolução é majoritariamente ramificado. Os casos newtoniano (c) e $n = 0.50$ (a) apresentaram padrões semelhantes, porém o caso com menor valor de n atingiu o *breakthrough* num tempo significativamente menor. O caso (e) apresentou o maior tempo para completar a

acidificação, porém a ramificação inferior se desenvolveu completamente, ao contrário dos casos (a) e (c). Neste caso, o aumento local na viscosidade teve um efeito divergente. No caso (d), a ramificação inferior se desenvolveu mas gerou outra ramificação. Os demais casos também desenvolveram a ramificação inferior, porém no caso *shear-thinning* (b) o *breakthrough* ocorreu na parte superior do domínio. Já no caso *shear-thickening* (f), na parte inferior.

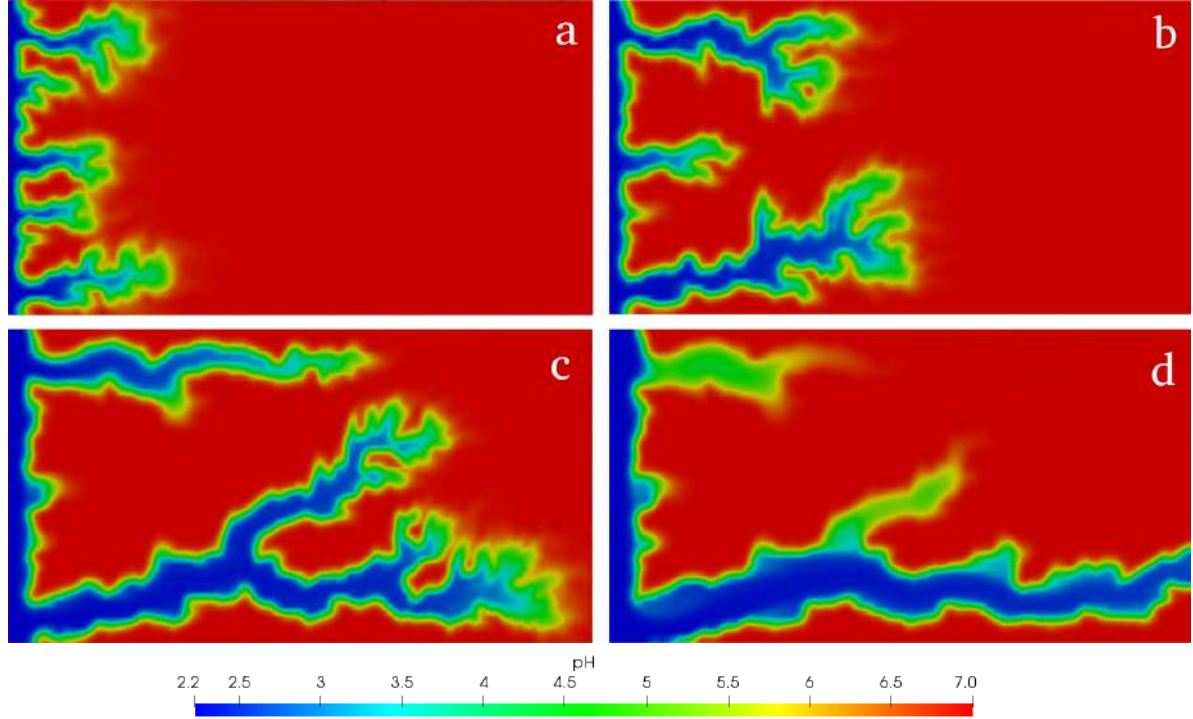


Figura 5.33: Evolução de campo de pH para o caso com $Da = 50$ e $n = 1.50$. Em a: Tempo simulado de 600 s; b: 1700 s; c: 3600 s; d: 4800 s.

A Figura 5.33 mostra a evolução do campo de pH para o caso *shear-thickening* com $n = 1.50$ e $Da = 50$ (Figura 5.32-c). No começo da simulação em (a), o ácido penetra por várias ramificações, com avanço semelhante. Em seguida (c), apenas as ramificações nos dois extremos verticais do domínio sofrem o avanço do ácido. O avanço do ácido segue preferencialmente na ramificação inferior (c), possivelmente formando uma nova ramificação. No instante final (d), é possível notar que o avanço pela ramificação nova não evoluiu e o escoamento seguiu pela ramificação inferior. Assim, nota-se que mesmo nos casos em que o perfil de porosidade não apresentou sub-ramificações, existe essa tendência nos casos analisados e a evolução das ramificações depende do modelo de fluido. Na Figura 5.32, os casos (b, d, f) mostram as três possibilidades: em (b), apenas a ramificação derivada da inferior evoluiu; em (d), ambas evoluíram; em (f), apenas a ramificação inferior evoluiu, assim como no caso $n = 1.50$ sem influência do pH (c), mas houve um pronunciamento maior da ramificação derivada.

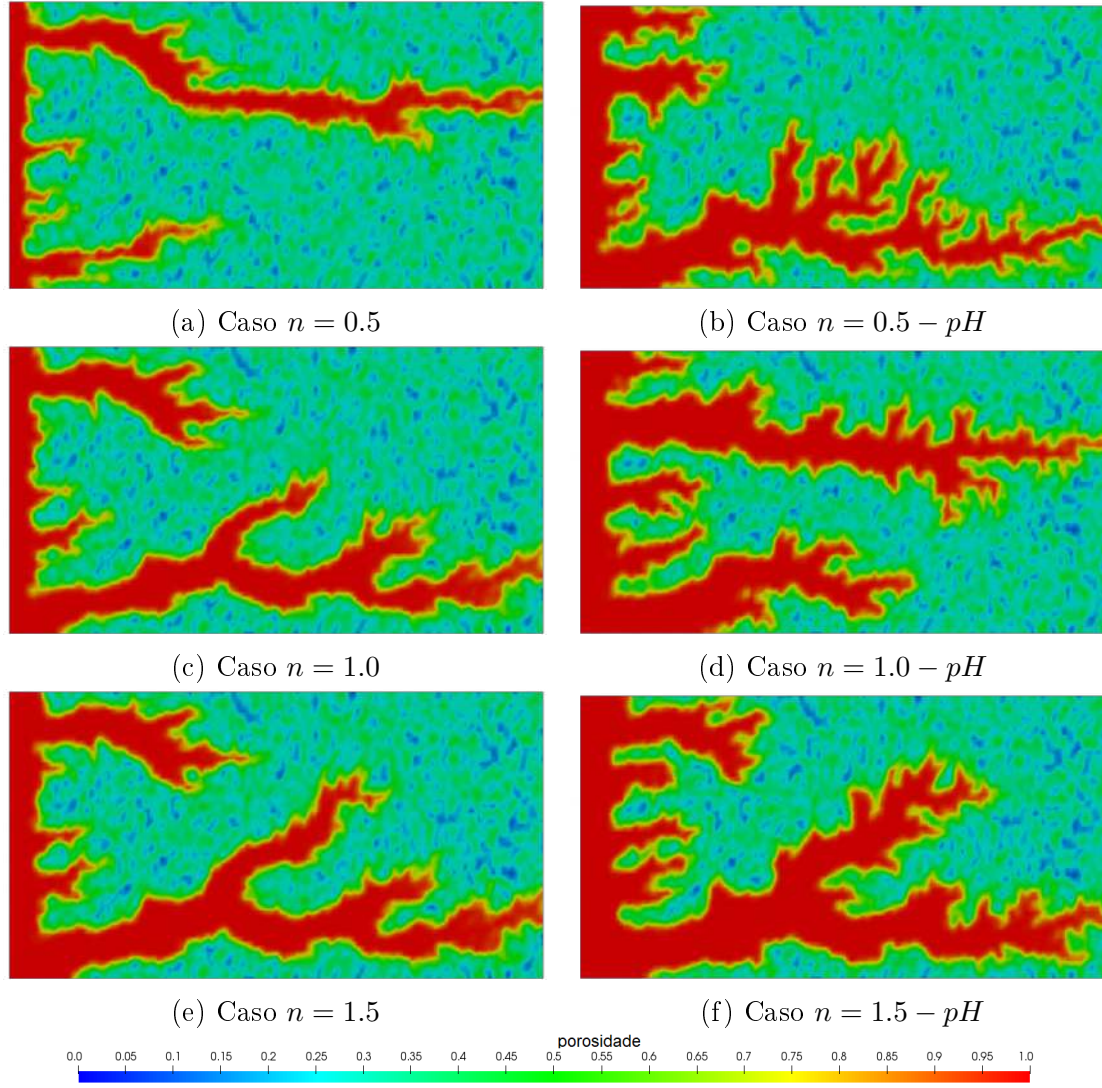


Figura 5.34: Perfis de porosidade para casos newtoniano e *power-law* com $Da = 100$. Figura a: tempo de breakthrough em 4300 s; b: 7200 s; c: 6300 s; d: 8300 s; e: 7300 s; f: 9100 s.

Casos com $Da = 100$ estão na Figura 5.34. Novamente, o caso com menor valor de n e sem influência do pH (a) apresentou o menor tempo de *breakthrough* e, portanto, apresentando o menor PVbt. O padrão de dissolução de *wormhole* é obtido neste caso. Nos demais casos sem influência do pH (c) e (e), é observado um padrão de dissolução de transição entre o ramificado e *wormhole*. Nos casos (b), (d) e (f) o padrão de dissolução ainda é ramificado. Os casos newtoniano (c) e *shear-thickening* (e) resultaram em campos de porosidade semelhantes, porém o newtoniano foi atingido em menor tempo. No caso newtoniano com influência do pH (d), houve a formação do canal na parte superior do domínio, ao contrário dos demais casos com exceção do caso (a). O tempo final de cada caso varia muito, apenas pela consideração de um modelo reológico diferente. O caso (f) apresenta o tempo final 211% maior que o caso (a), o que impacta diretamente no PVbt e na

otimização do processo de acidificação.

O caso (a) foi o único a formar um *wormhole* na parte superior do domínio. O caso newtoniano com influência do pH (d) formou um canal na parte superior, porém com padrão ramificado, além da ramificação inferior ter evoluído consideravelmente.

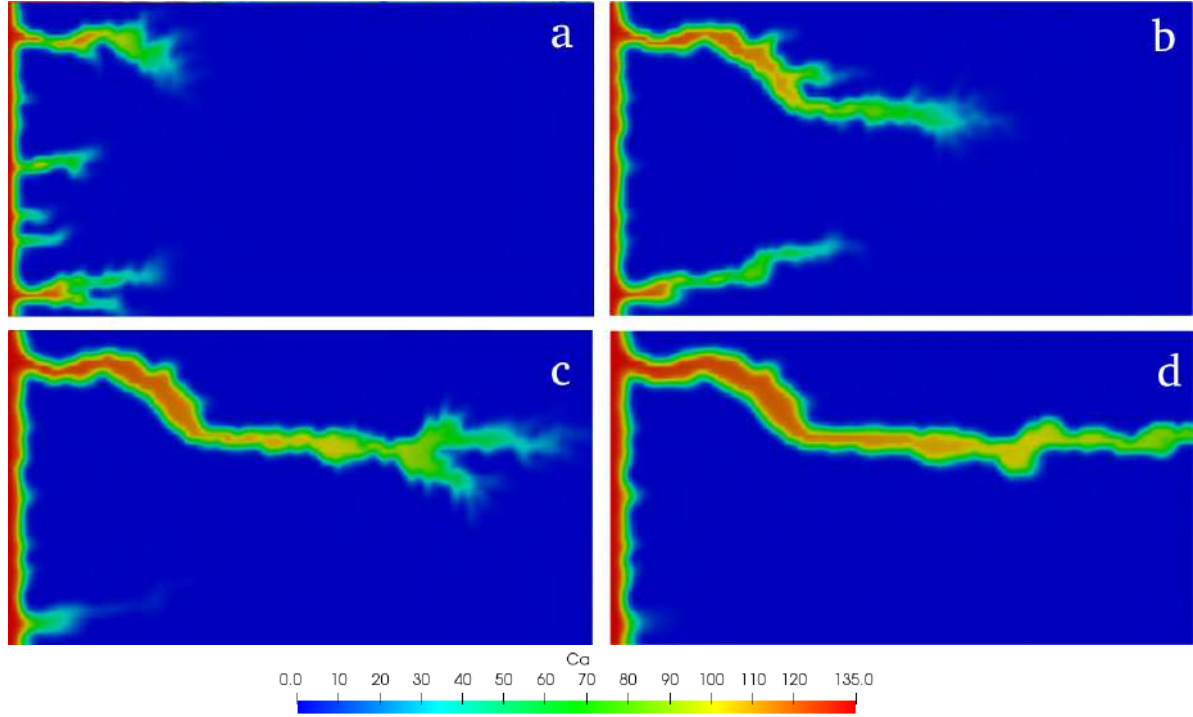


Figura 5.35: Evolução de concentração para o caso com $Da = 100$ e $n = 0.50$. Em a: Tempo simulado de 1000 s; b: 2200 s; c: 3200 s; d: 4300 s.

A Figura 5.35 mostra a evolução do campo de concentração para o caso com $Da = 100$ e $n = 0.50$ (Figura 5.34-a). Na Figura com menor instante de tempo (a), o ácido avançou apenas por duas ramificações. No segundo instante, em (b), o avanço já é predominante pela ramificação superior. No instante seguinte (c) até o final da acidificação (d), o ácido abandona completamente a ramificação inferior e avança apenas pela superior. Neste caso, portanto, a formação do *wormhole* seguiu majoritariamente uma região preferencial, ao contrário dos demais casos em que houve sub-ramificações ou a formação do canal em outra região do domínio. Tal efeito permitiu a formação mais rápida do canal neste caso, o que levou a um tempo de *breakthrough* menor e, consequentemente, um menor PVbt.

Outro aspecto importante é o fato de que no canal que se formou para o caso da Figura 5.35, o ácido permaneceu com alta concentração na entrada do canal durante praticamente todo o processo de acidificação o que levou ao perfil da Figura 5.34-a em que o canal é mais largo próximo à entrada e mais estreito próximo a saída, conferindo um aspecto cônico, apesar da formação tortuosa.

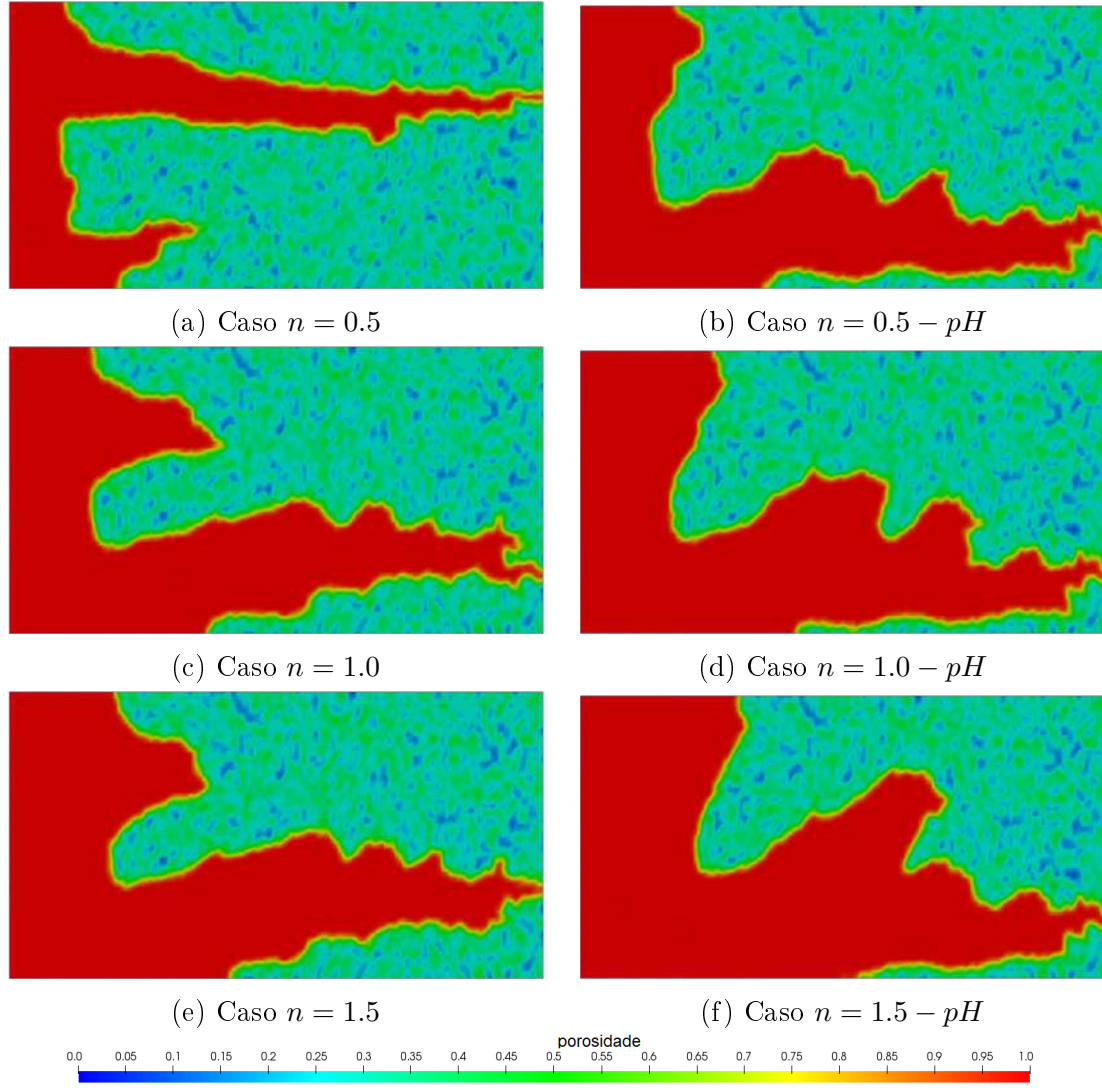


Figura 5.36: Perfis de porosidade para casos newtoniano e *power-law* com $Da = 1000$. Figura a: tempo de breakthrough em 56500 s; b: 84000 s; c: 89000 s; d: 100500 s; e: 99000 s; f: 115500 s.

Os campos de porosidade para os casos com $Da = 1000$ estão na Figura 5.36. Estes casos com alto número de Damköhler apresentaram majoritariamente o padrão de dissolução cônico, apesar de algumas ramificações, principalmente em (d) e (f). Conforme o valor para o número de Da aumenta, a velocidade de injeção na entrada do domínio diminui. Isto faz com que as taxas de deformação no fluido sejam menores e, consequentemente, o impacto da reologia do fluido seja menor, o que leva a padrões de dissolução semelhantes e um intervalo de tempo muito maior que o necessário nos casos anteriores para atingir o *breakthrough*. Apesar disso, o caso *shear-thinning* sem influência do pH (a) seguiu a tendência do caso (a) para $Da = 100$ e o canal foi formado na parte superior do domínio, sendo este o único caso a apresentar tal comportamento.

Nos casos (b), (d) e (f), o aumento local de viscosidade não foi o suficiente

para fazer com o que o ácido divergisse, apenas reduziu a mobilidade do fluido, criando uma resistência na formação do canal, o que levou a uma evolução maior das ramificações e também um maior tempo de *breakthrough* quando comparado com os casos (a), (c) e (e).

Para o número de $Da = 10000$, as velocidades são as mais baixas, causando taxas de deformação ainda menores. Nestes casos, não houve diferença significativa entre os padrões de dissolução e nem entre os tempos de *breakthrough*.

5.2.3 Curvas de PVbt

Nesta seção são plotadas as curvas de PVbt para todos os casos simulados, listados na tabela 5.7. Todos os casos foram analisados com e sem a influência do modelo reológico de pH.

n	0.5	0.7	0.8	1.0	1.2	1.3	1.5
Da	1	10	50	100	1000	10000	-

Tabela 5.7: Valores do índice *power-law* e números de Damköhler analisados.

Além dos casos que estão presentes na seção anterior, foram avaliados mais dois valores de n correspondentes ao modelo de fluido *power-law shear-thinning* e mais dois *shear-thickening*. Outros números de Da também foram avaliados. Assim como não há diferença significativa nos tempos de *breakthrough* e nos padrões de dissolução entre os casos para $Da = 10000$, também não há diferença notável entre os casos com $Da = 1$, sendo este último referente a altas taxas de injeção, em que a rocha é consumida rapidamente e a reologia tem pouco impacto. Estes são casos extremos para o problema: abaixo de 1, os padrões de dissolução se mantêm em regime uniforme; já acima de 10000, o padrão de dissolução de face se mantém. Portanto, é esperado que o ponto ótimo esteja entre este intervalo para o número de Da .

As curvas de PVbt para os casos newtoniano e *power-law* estão na Figura 5.37. É possível notar a tendência da redução do PVbt com a redução no valor de n . Também há a tendência do PVbt ser maior conforme o valor de n cresce. Esse comportamento já era esperado pelos resultados referentes aos padrões de dissolução, pois os com $n = 0.50$ apresentaram o menores tempos para o canal atravessar o *plug*, enquanto os casos com $n = 1.50$ apresentaram os maiores tempos e os casos newtonianos apresentaram tempos intermediários. Todas as curvas apresentaram o comportamento clássico previsto na literatura de ter um único ponto mínimo. A maioria das curvas teve o ponto ótimo para o mesmo valor de $Da = 100$, exceto para o caso de $n = 0.70$ em que o ponto ótimo se refere ao caso de $Da = 1000$.

O gráfico da Figura 5.38 compara as curvas de PVbt para os casos newtoniano, newtoniano-pH, $n = 0.50$, $n = 0.50$ -pH, $n = 1.50$ e $n = 1.50$ -pH. Novamente, as

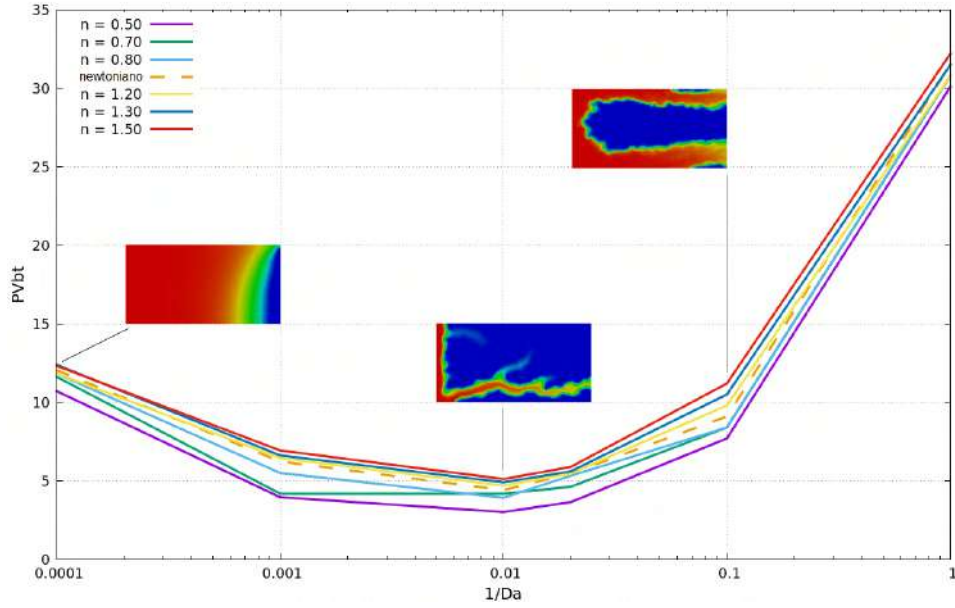


Figura 5.37: Curvas de PVbt para os casos sem influência do pH.

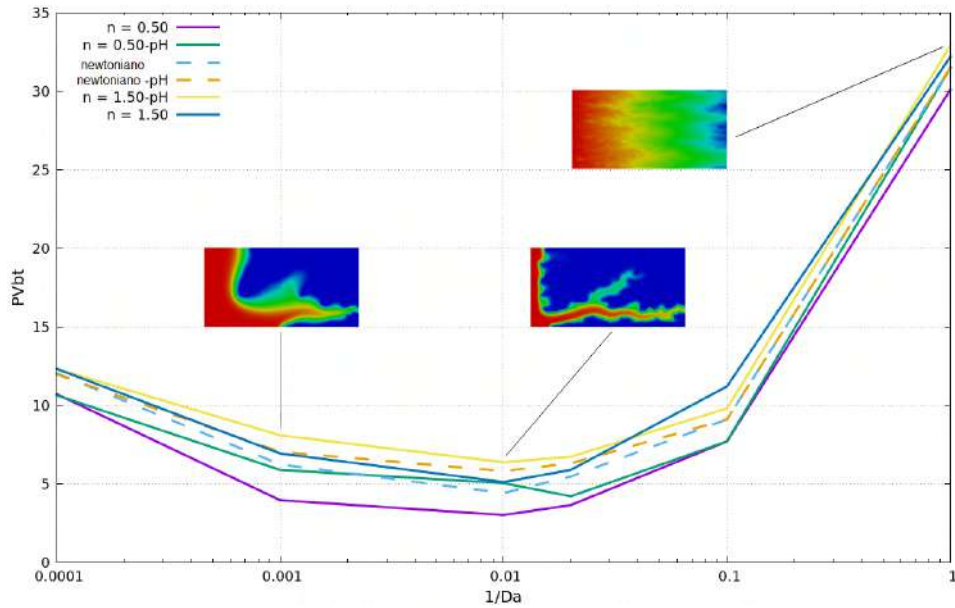
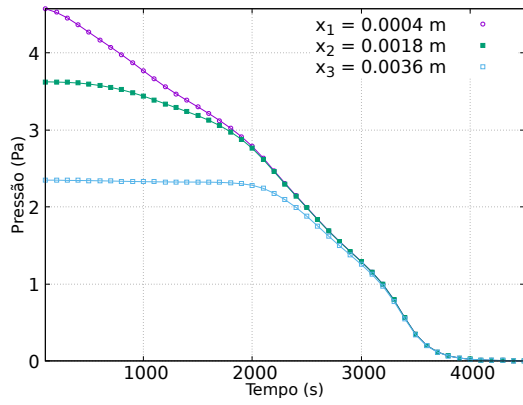


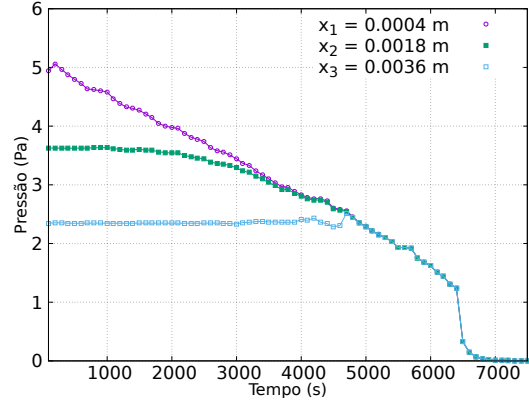
Figura 5.38: Curvas de PVbt para casos com e sem influência do pH.

curvas possuem um único ponto de mínimo. A partir desse gráfico, é possível concluir que a influência do pH na viscosidade do fluido, apesar da possibilidade de causar um efeito divergente, tende a aumentar o PVbt. Todos os casos que consideram o modelo de pH tiveram a curva de PVbt em geral deslocada para cima, quando comparado com o caso equivalente que desconsidera o modelo de pH, principalmente no ponto ótimo, apesar de haver um cruzamento nos casos com $n = 1.5$ a partir de $Da = 10$. A maioria dos casos teve o ponto ótimo em $Da = 100$, exceto pelo caso $n = 0.50$ -pH.

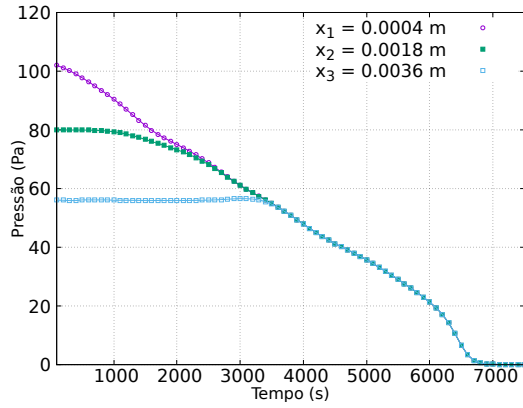
5.2.4 Curvas de Pressão



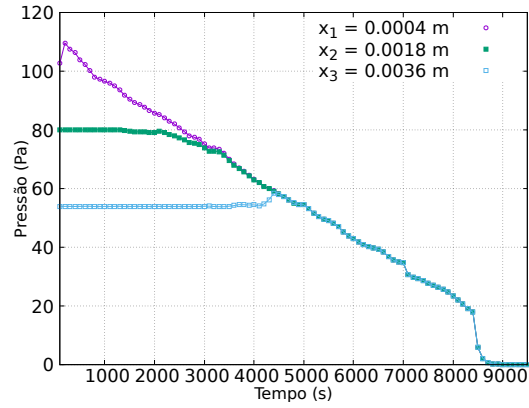
(a) Caso $n = 0.5$



(b) Caso $n = 0.5 - pH$



(c) Caso $n = 1.5$



(d) Caso $n = 1.5 - pH$

Figura 5.39: Curvas de pressão para casos *shear-thinning* e *shear-thickening*.

Para o caso de ácidos não-divergentes, a permeabilidade aumenta gradualmente durante o processo de dissolução, aumentando também a mobilidade e consequentemente ocorre uma queda de pressão monotônica ao longo do tempo. Quando o ácido é divergente, a resistência temporária criada pelo aumento da viscosidade reduz a mobilidade, criando um pico de pressão antes que ocorra novamente a queda até que seja atingido o *breakthrough*, conforme verificado por MaGee, Buijse e Pongratz em 1997 [52].

Nos gráficos da Figura 5.39, apenas nos casos que consideram o efeito do pH, isto é, modelam um fluido divergente, a queda não é monotônica. Porém, nestes casos, o pico de pressão foi mantido por um tempo relativamente pequeno, o que causou uma redução de mobilidade curta, mas que ainda assim em alguns casos foi suficiente para que o canal não fosse formado na região preferencial, conforme visto nos resultados para os campos de porosidade. As medidas foram obtidas nos pontos indicados nos gráficos, na metade da altura do *plug*.

5.2.5 Validação do Banco de Dados

Uma forma de validar a metodologia proposta da implementação do banco de dados em escala de poro é elaborar casos em *plug*, sem reação, considerando poros cilíndricos. Como é possível calcular a permeabilidade de forma analítica nestes casos, é feita uma comparação com a permeabilidade calculada nas simulações. Na Figura (5.40), está a comparação para 3 casos newtonianos, correspondentes a 3 vazões na entrada diferentes. No mosaico, cada linha representa uma vazão, enquanto cada coluna representa a forma com que a permeabilidade foi obtida. Na primeira coluna, está a permeabilidade calculada analiticamente para o caso cilíndrico. Na segunda coluna, a permeabilidade foi obtida como um pós-processamento da simulação em *plug* que usou o banco de dados, a partir da Eq. de Darcy. Na terceira coluna, a permeabilidade foi obtida também como um pós-processamento, mas através da comparação dos termos de interação numérico e analítico.

Quando são comparadas as permeabilidades obtidas pelo pós-processamento com o caso analítico, nota-se que os campos são praticamente idênticos, mostrando um excelente resultado do banco de dados nestes casos. Na Figura (5.41), estão os campos de velocidade para os mesmos casos. A primeira coluna contém os resultados da simulação quando o termo de interação analítico newtoniano é aplicado. A segunda coluna contém os resultados referentes aos casos que utilizam o termo de interação numérico alimentado pelo banco de dados. Assim como na verificação feita através da permeabilidade, os campos são praticamente idênticos, mostrando total compatibilidade entre as metodologias empregadas.

A comparação de permeabilidades para o caso *power-law shear-thinning* com $n = 0.5$ está na Figura (5.42). Neste caso não há a coluna referente à permeabilidade calculada pela Equação de Darcy pois esta só se aplica a fluidos newtonianos. Porém, ainda é possível calcular a permeabilidade neste caso fazendo a comparação com o termo de interação analítico. Novamente, os resultados mostram plena compatibilidade entre as metodologias. Isso se confirma também na comparação de permeabilidade para o caso *power-law shear-thickening* com $n = 1.2$, na Figura (5.44) e também na comparação dos campos de velocidade nas Figuras (5.43) e (5.45).

Para casos em que há reação entre o fluido e o meio poroso, a verificação entre os casos é feita a partir do campo de porosidades no *breakthrough* e o padrão de dissolução. Nas Figuras (5.46), (5.47), (5.48), (5.49), (5.50) e (5.51) estão os casos para os números de Da de 1, 10, 50, 100, 1000 e 10000 respectivamente, para os fluidos analisados. De forma análoga à apresentação dos resultados do campo de velocidade sem reação, na coluna da esquerda estão os resultados para o caso simulado com o termo de interação analítico e na coluna da direita os mesmos casos

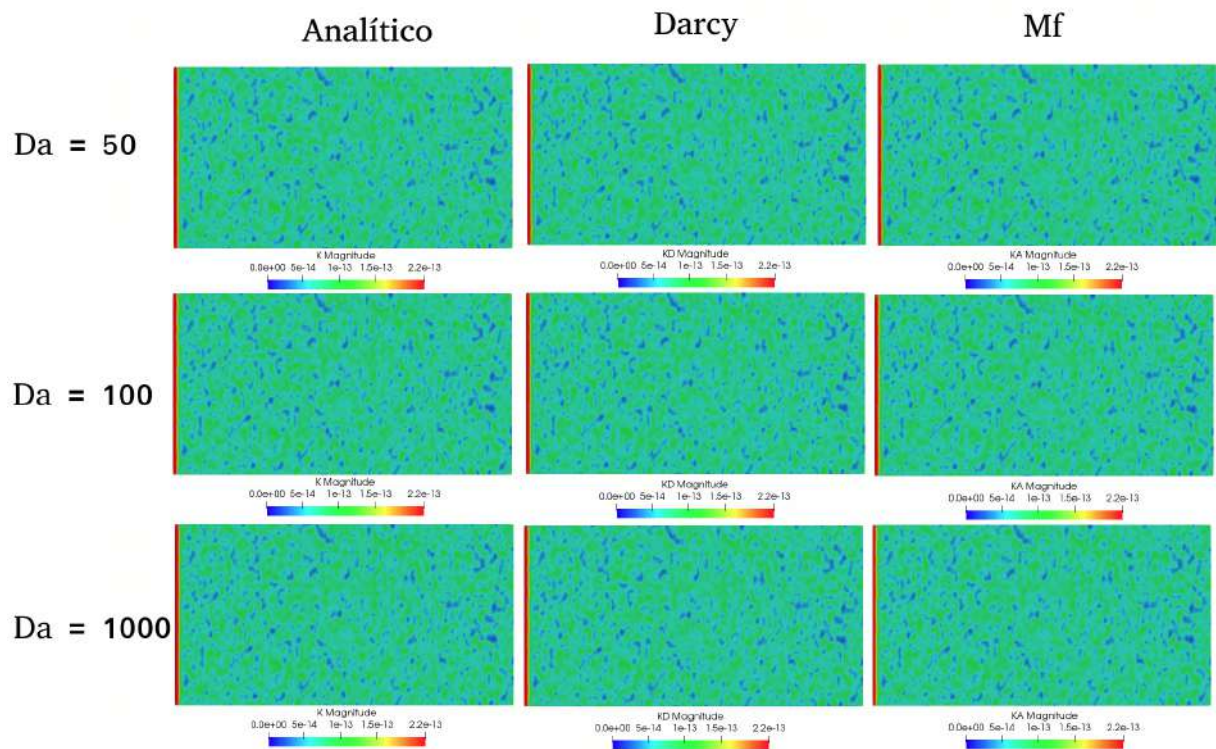


Figura 5.40: Comparação da permeabilidade para casos newtonianos.

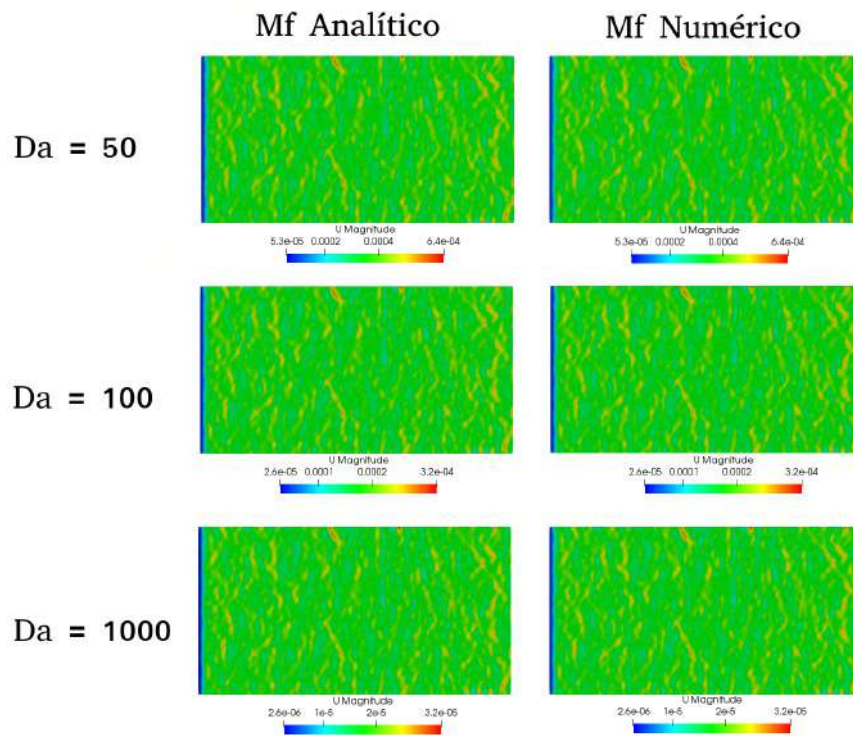


Figura 5.41: Comparação do campo de velocidade para casos newtonianos.

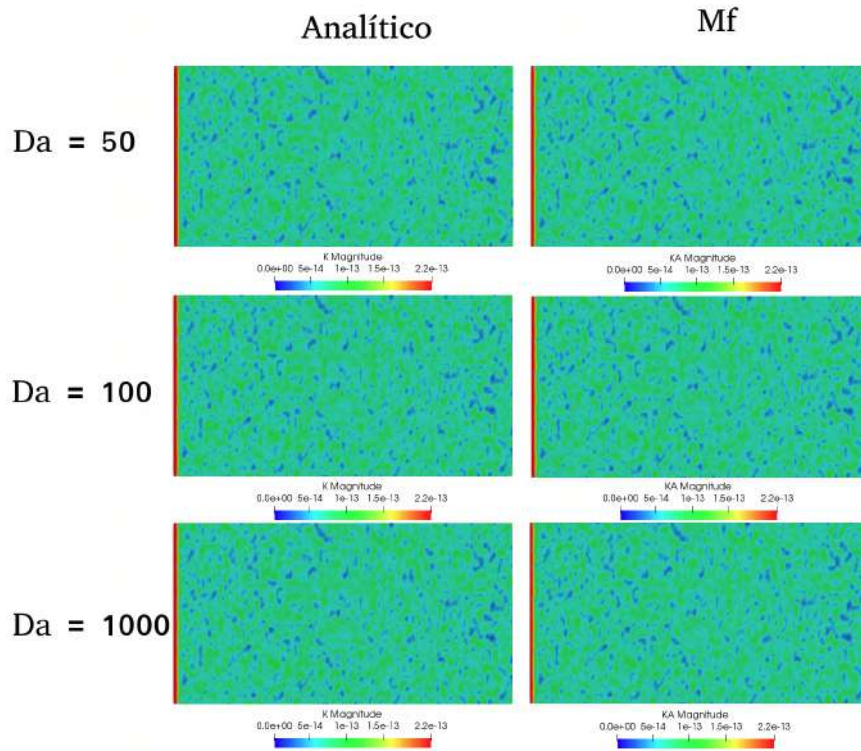


Figura 5.42: Comparação da permeabilidade para casos *shear-thinning* com $n = 0.5$.

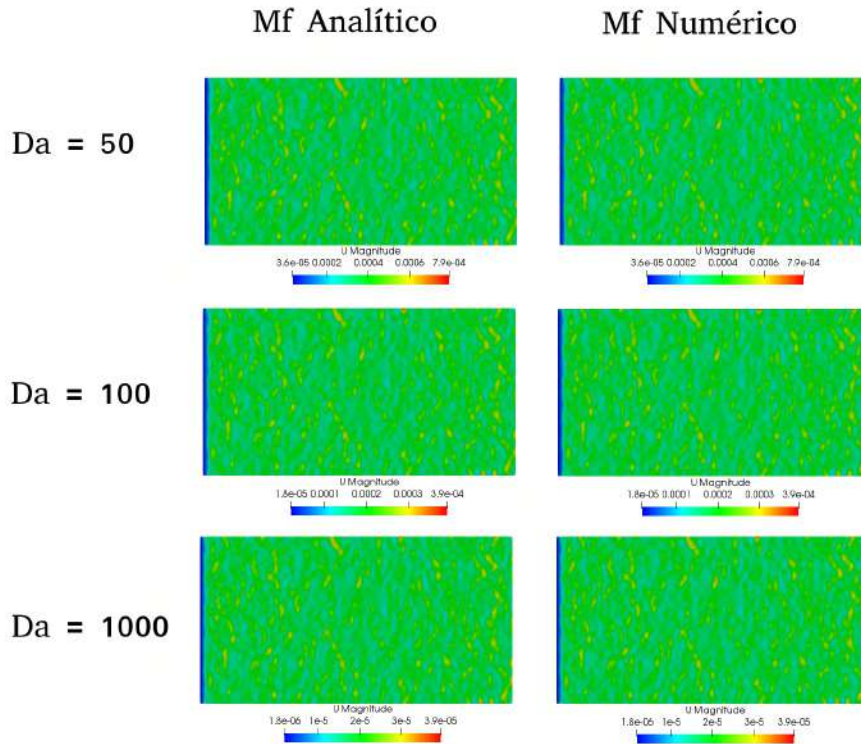


Figura 5.43: Comparação do campo de velocidade para casos *shear-thinning* com $n = 0.5$.

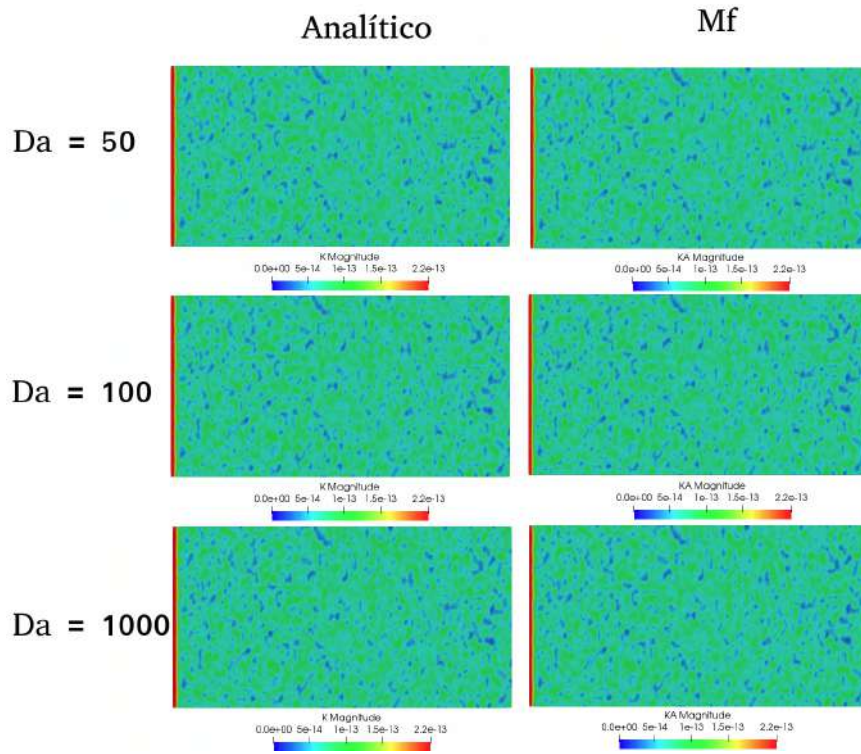


Figura 5.44: Comparação da permeabilidade para casos *shear-thickening* com $n = 1.2$.

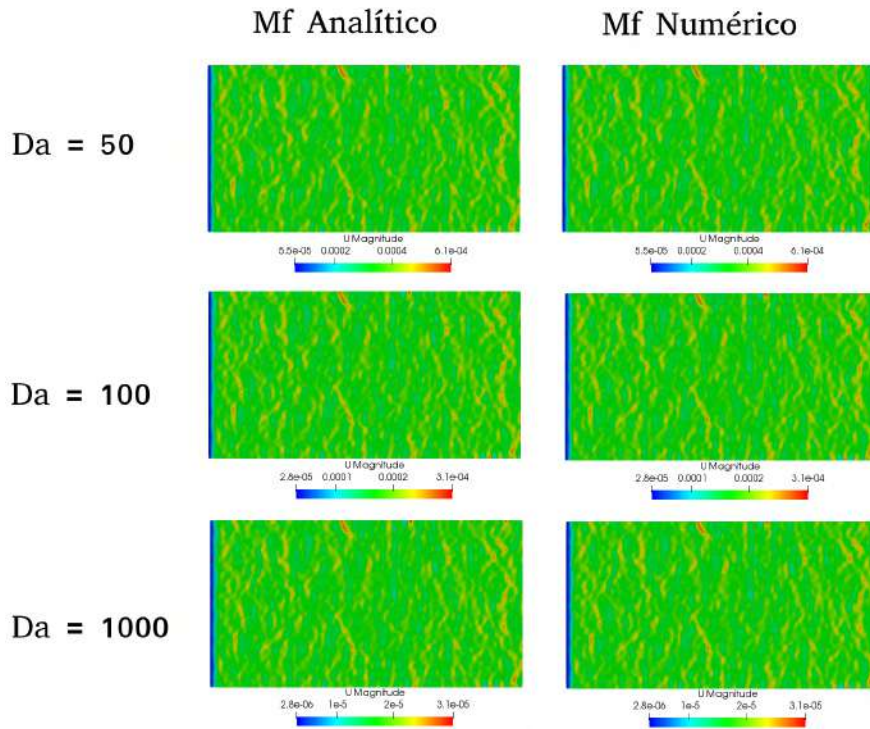


Figura 5.45: Comparação do campo de velocidade para casos *shear-thickening* com $n = 1.2$.

simulados com o termo de interação alimentado pelo banco de dados.

Quando o número de Damköhler é igual a 1, é esperado um padrão de dissolução uniforme, devido a altas taxas de injeção de ácido, o que foi obtido em todos os casos na Figura (5.46). Para o número de $Da = 10$, o padrão de dissolução tende a sofrer uma transição do uniforme para um padrão com ramificações. Todos os casos apresentaram este padrão, independentemente do modelo de fluido, conforme Figura (5.47). Comparando os casos para o mesmo fluido, os resultados fornecidos pela interação numérica são bem próximos aos fornecidos pela interação analítica. Em $Da = 50$, o padrão é predominantemente ramificado (Figura (5.48)). Novamente, boa compatibilidade entre as diferentes metodologias. Na Figura (5.49), o padrão de dissolução é de *wormhole* para todos os casos, tendo o modelo de fluido impactado principalmente na largura do *wormhole*. Para números de $Da = 1000$, as velocidades de injeção são baixas e o padrão de dissolução adquire formato cônico, conforme Figura (5.50). Por fim, nos casos com a menor velocidade de injeção, onde $Da = 10000$, Figura (5.51), o padrão de dissolução é de face. Em todos os casos houve boa concordância entre as metodologias, apresentando padrões de dissolução iguais e campos de porosidade muito parecidos. A ligeira diferente entre os casos pode ser atribuída a hipótese feita para a evolução do raio de poro baseada na evolução da permeabilidade pelo modelo de Carman-Kozeny, descrita anteriormente.

5.2.6 Casos Carreau em Plug

Para os casos Carreau em escala de *plug*, duas metodologias foram empregadas: a combinação do termo de interação analítico newtoniano com o termo de interação analítico *power-law*, onde o primeiro é aplicado quando a taxa de deformação é baixa ($\dot{\gamma} < \dot{\gamma}_c$) e a viscosidade do fluido está no patamar newtoniano. O segundo para maiores taxas de deformação ($\dot{\gamma} \geq \dot{\gamma}_c$), quando a viscosidade está inserida no patamar *power-law*. A segunda metodologia é a aplicação do banco de dados para o termo de interação numérico. Foram analisados os seguintes casos: Carreau modificado com $n = 0.50$, $n = 0.80$ e os casos newtonianos equivalentes.

Nas Figuras (5.52), (5.53), (5.54) e (5.55) estão os resultados para os casos simulados respectivamente para os números de $Da = 10, 50, 100, 1000$. Na coluna da esquerda, estão dispostos os resultados obtidos com a estratégia de combinar os termos de interação analíticos. Na coluna da direita, os resultados usando termo de interação numérico. Na primeira linha, $n = 0.50$. Na segunda, $n = 0.80$ e na terceira o caso $n = 1.0$, que são os casos newtonianos equivalentes.

Em $Da = 10$, na Figura (5.52), os casos Carreau apresentaram um padrão de dissolução de transição entre o uniforme e o ramificado, o que também foi observado nos casos *power-law*. Não foi notada diferença significativa entre os valores de n ,

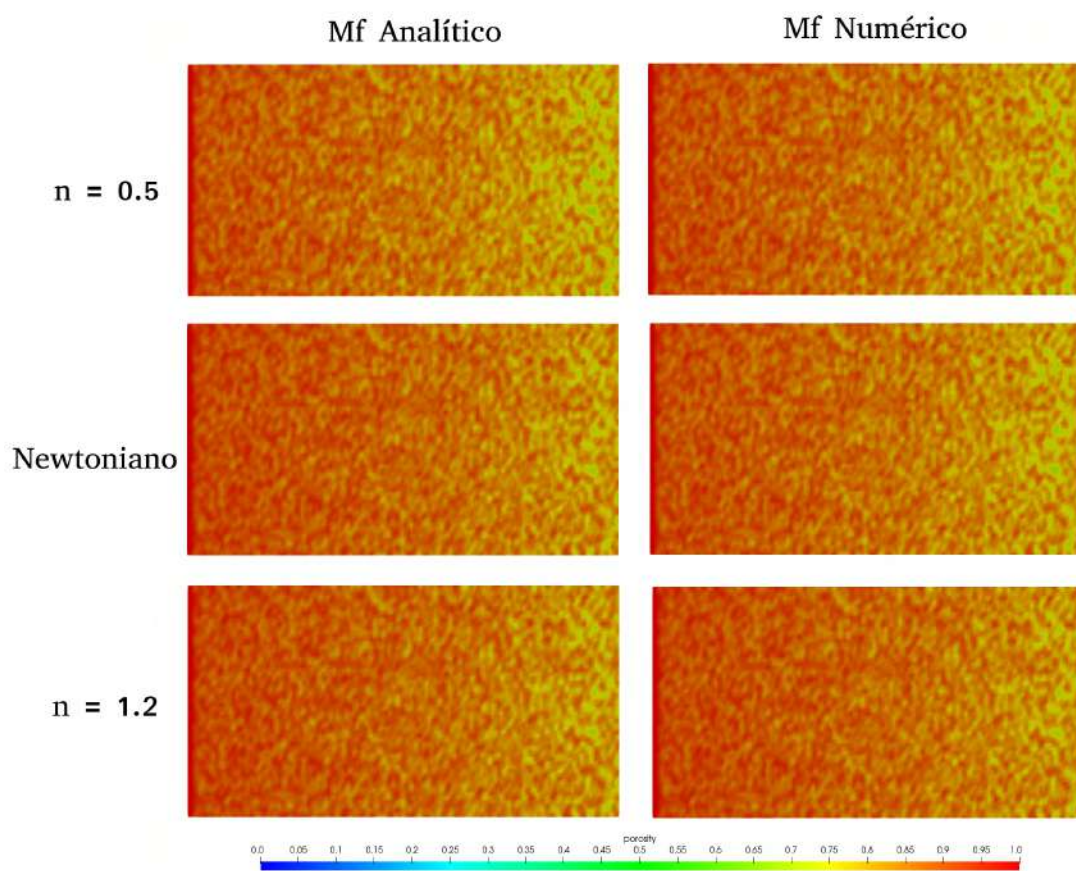


Figura 5.46: Perfis de porosidade para os casos com $Da = 1$

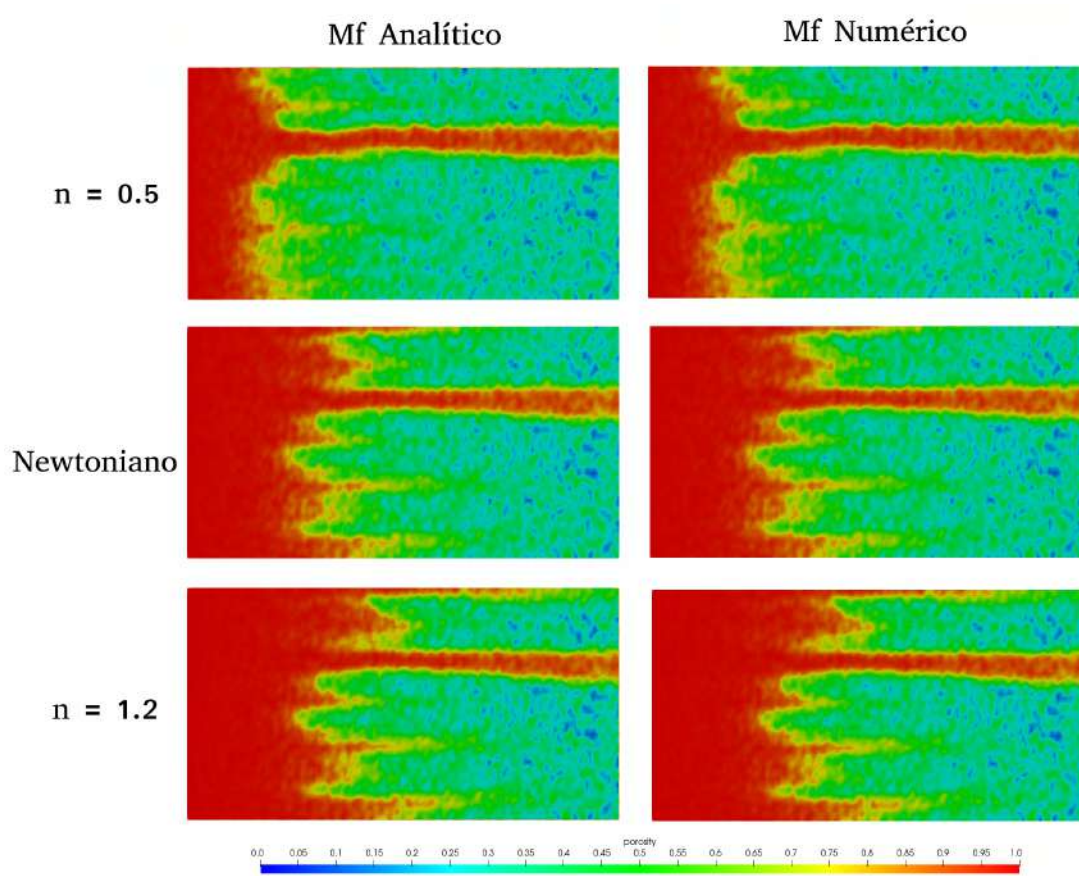


Figura 5.47: Perfis de porosidade para os casos com $Da = 10$

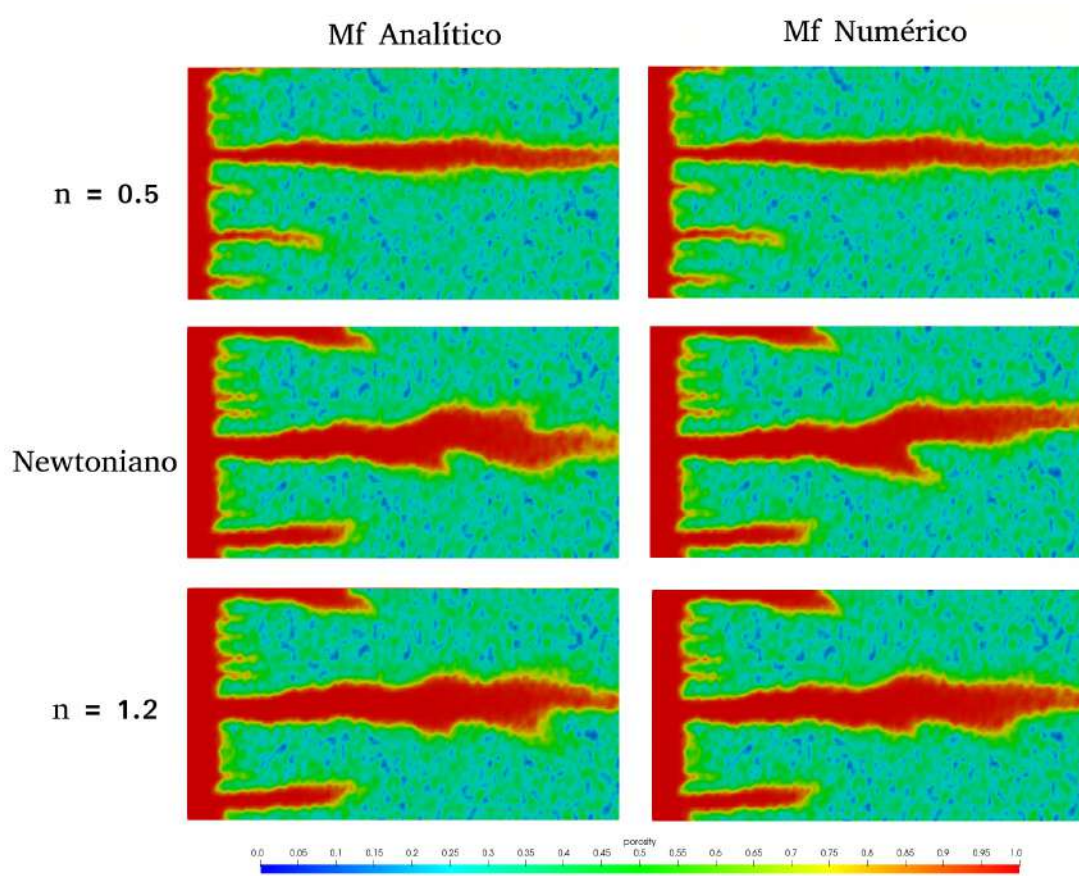


Figura 5.48: Perfis de porosidade para os casos com $Da = 50$

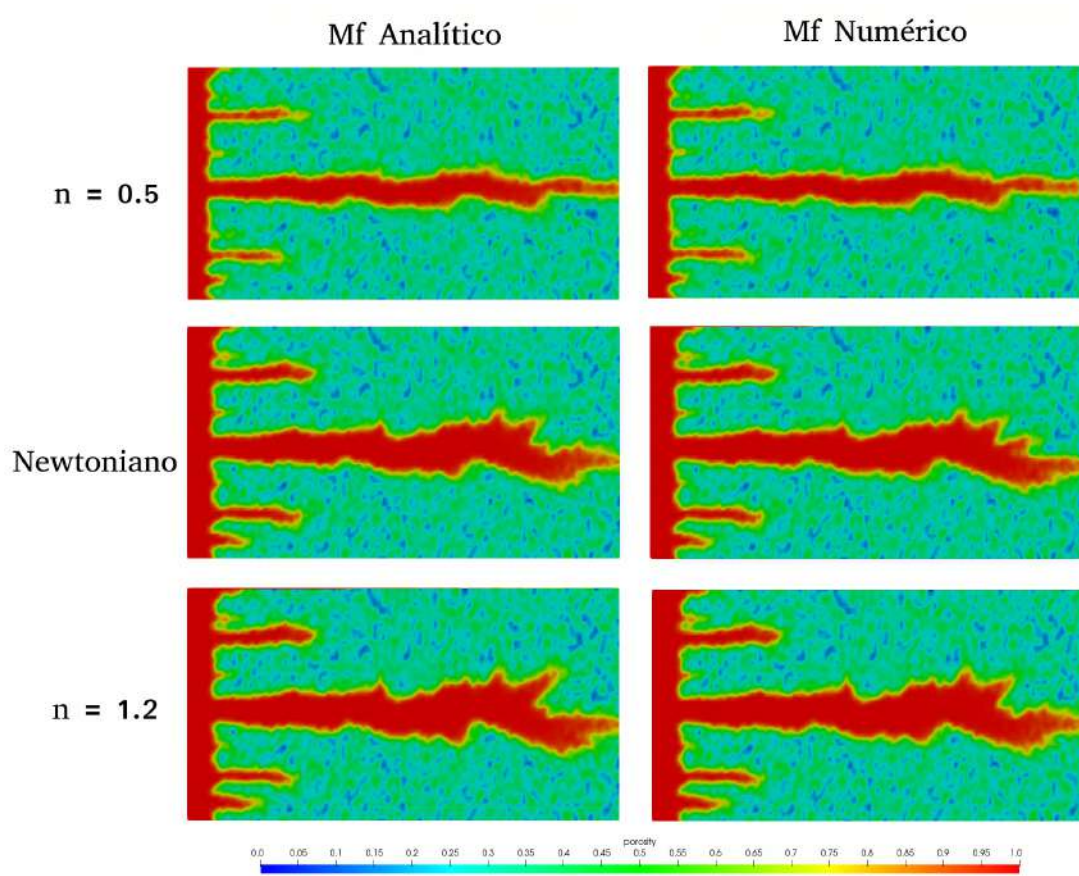


Figura 5.49: Perfis de porosidade para os casos com $Da = 100$

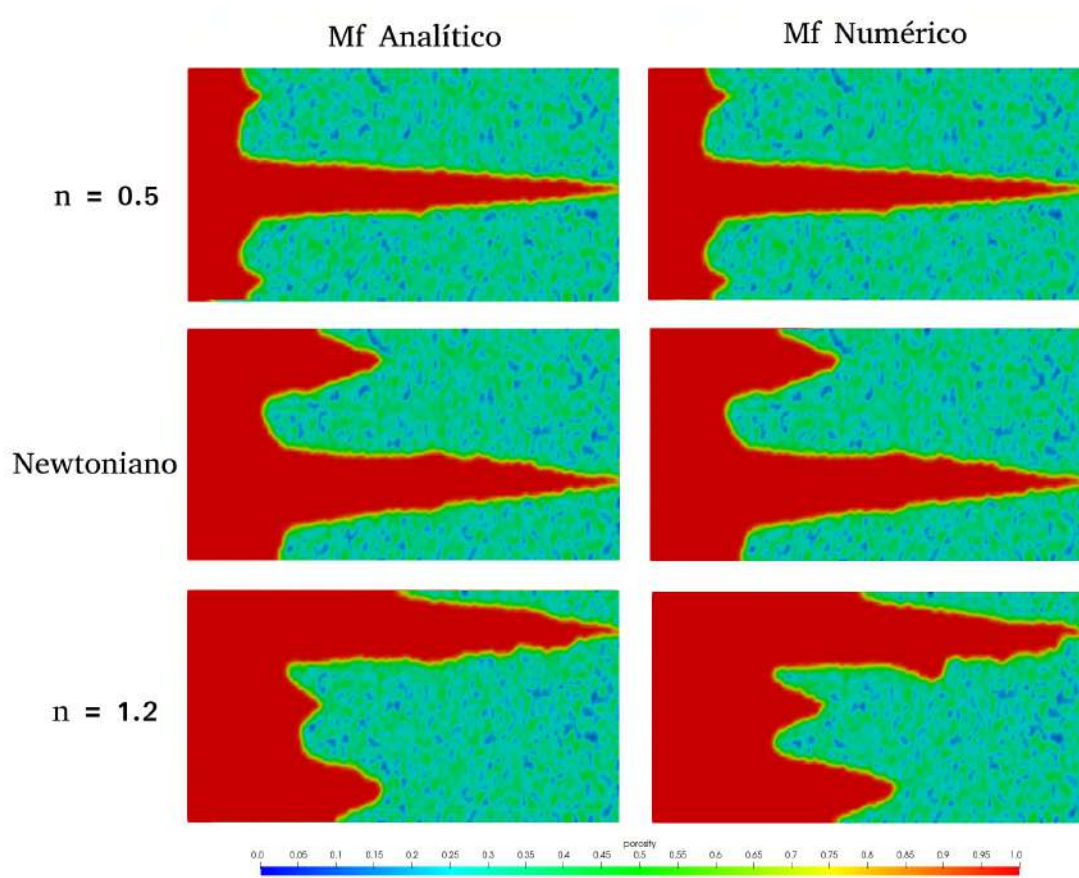


Figura 5.50: Perfis de porosidade para os casos com $Da = 1000$

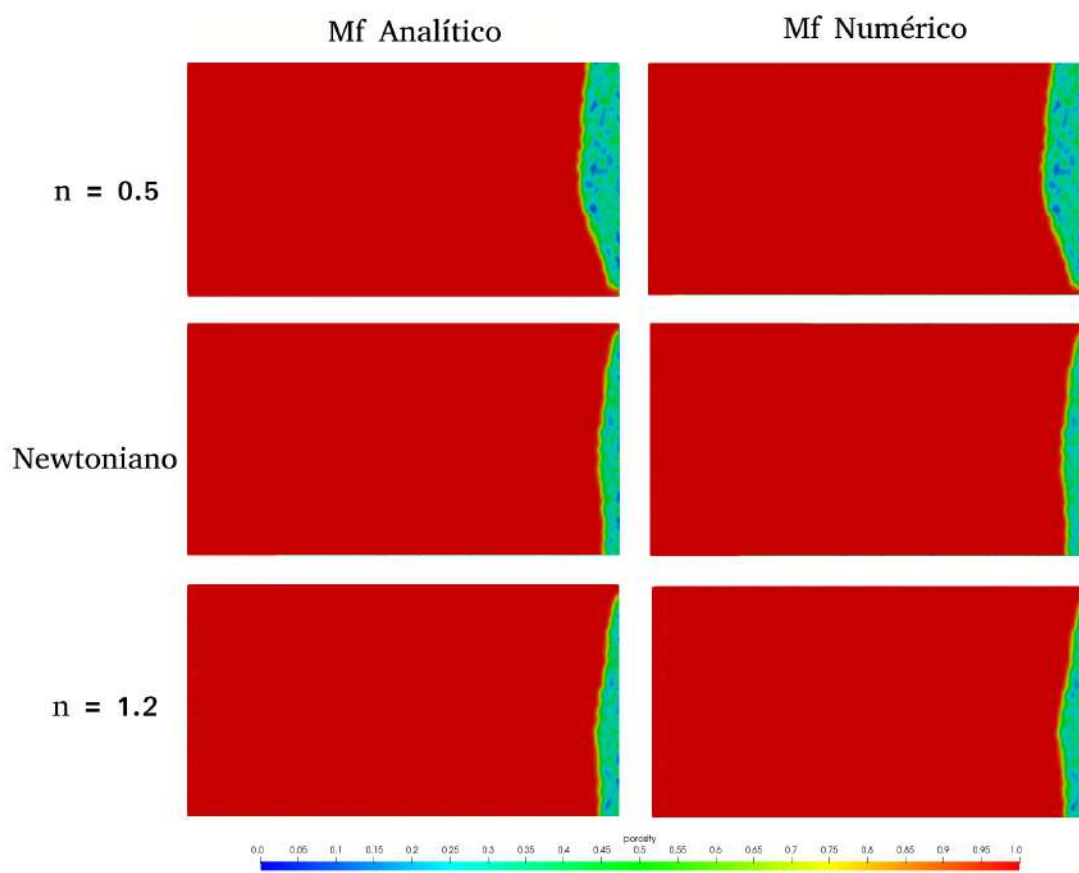


Figura 5.51: Perfis de porosidade para os casos com $Da = 10000$

Caso	$n = 0.5$	$n = 0.8$	Newtoniano
$Da = 10$ - \mathbf{m}_f analítico	900 s	1100 s	1200 s
$Da = 10$ - \mathbf{m}_f numérico	900 s	1100 s	1200 s
$Da = 50$ - \mathbf{m}_f analítico	2300 s	3200 s	3400 s
$Da = 50$ - \mathbf{m}_f numérico	2300 s	3200 s	3400 s
$Da = 100$ - \mathbf{m}_f analítico	4100 s	5700 s	5500 s
$Da = 100$ - \mathbf{m}_f numérico	4100 s	5200 s	5700 s
$Da = 1000$ - \mathbf{m}_f analítico	86000 s	86000 s	86000 s
$Da = 1000$ - \mathbf{m}_f numérico	58000 s	77000 s	86000 s

Tabela 5.8: Tempos de *breakthrough* para os casos Carreau e newtoniano.

para este número de Da . Ambas as metodologias resultaram em padrões muito semelhantes.

O padrão de dissolução ramificado foi predominante nos casos de $Da = 50$, na Figura (5.53). O caso $n = 0.5$ formou um canal mais fino quando comparado aos maiores valores de n . O canal que atinge o *breakthrough* também é mais estreito para o caso $Da = 100$ e $n = 0.5$, como observado na Figura (5.54). Algumas diferenças sutis nos padrões podem ser notadas quando comparadas as duas metodologias para o termo de interação. Ainda, neste mesmo valor de Da , no caso $n = 0.8$, o tempo de *breakthrough* para o caso com termo de interação numérico foi cerca de 8% menor.

No último número de Da apresentado, equivalente ao valor de 1000 (Fig. (5.55)), o padrão cônico foi formado em todos os casos e são qualitativamente muito semelhantes. A principal diferença reside no tempo de *breakthrough*. Nos casos com termo de interação analítico, o tempo necessário para o canal formado atravessar completamente o domínio foi o mesmo para os três fluidos simulados. A diferença está nos casos com termo de interação numérico e $n < 1$. O caso $n = 0.8$ apresentou tempo de *breakthrough* 10% menor, enquanto o caso $n = 0.5$ chegou a apresentar o tempo 32% menor. Esta diferença é explicada pela limitação da metodologia de combinar os termos de interação newtoniano e *power-law*. Apesar de ser prática por não precisar do banco de dados, não é capaz de cobrir a região de transição presente no modelo de Carreau. Esta limitação pode impactar os resultados a depender da taxa de deformação no meio poroso, mas esta não está presente na metodologia do banco de dados, que é capaz de cobrir a região de transição. Os tempos de *breakthrough* para todos os casos estão na tabela (5.8).

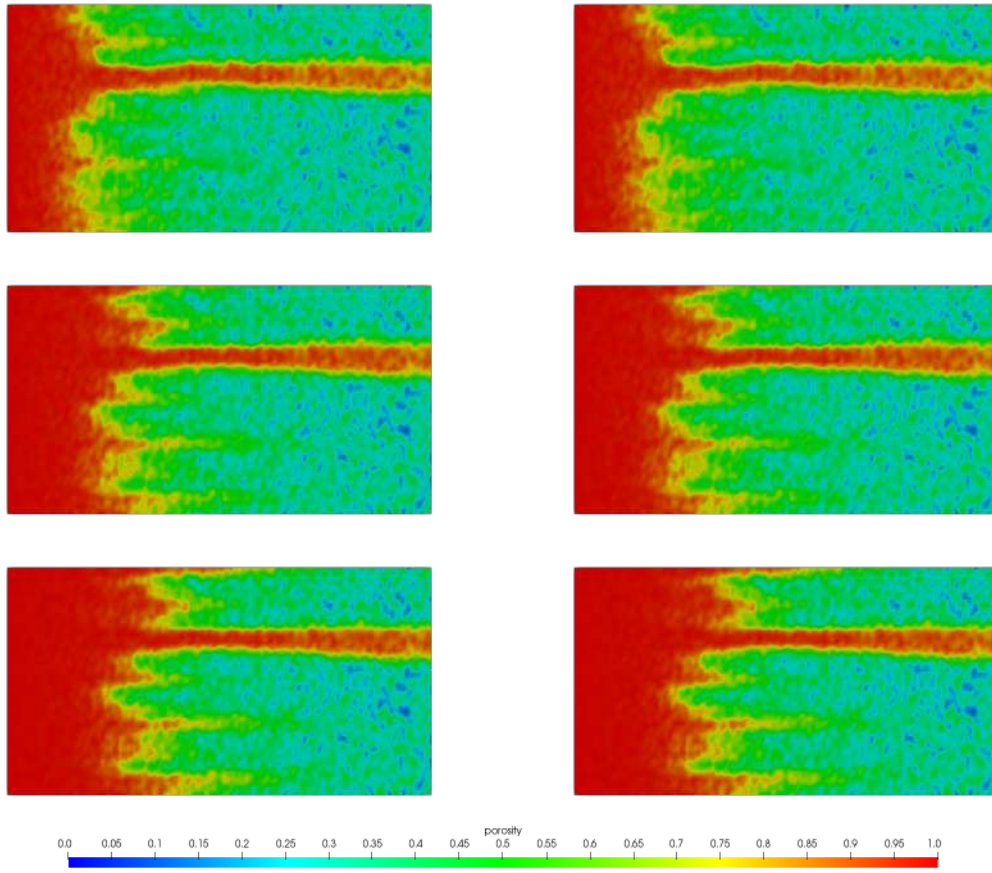


Figura 5.52: Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 10$.

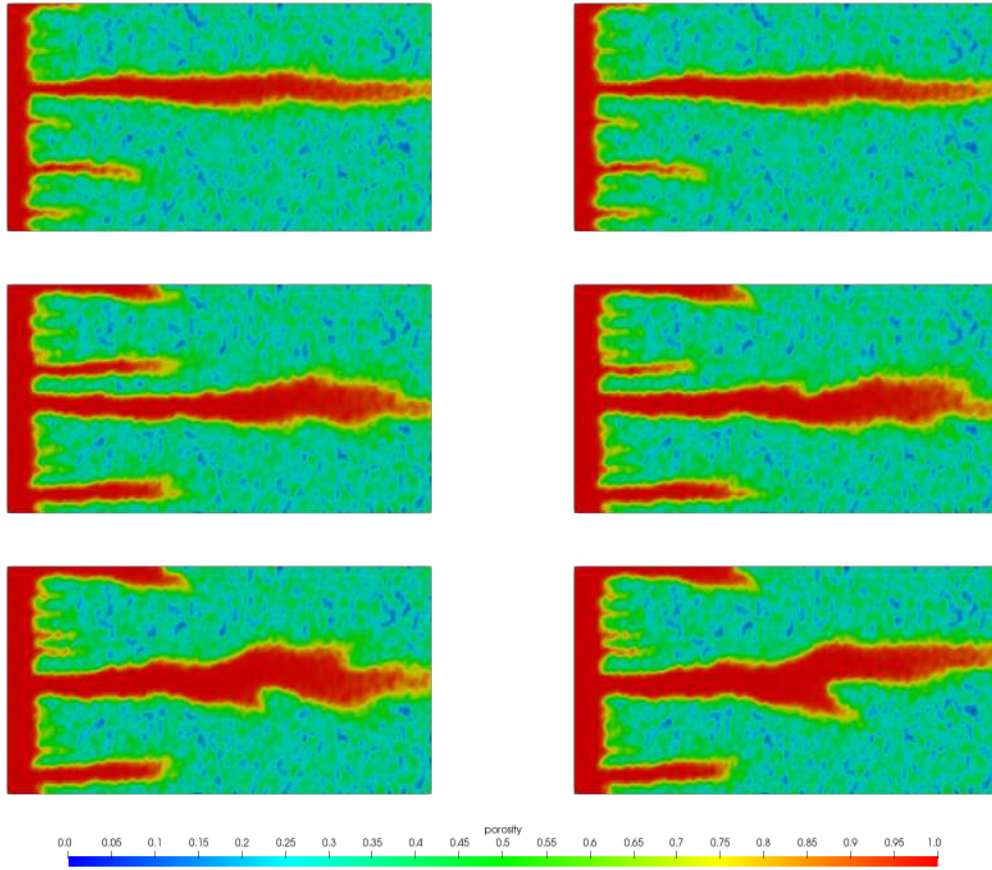


Figura 5.53: Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 50$.

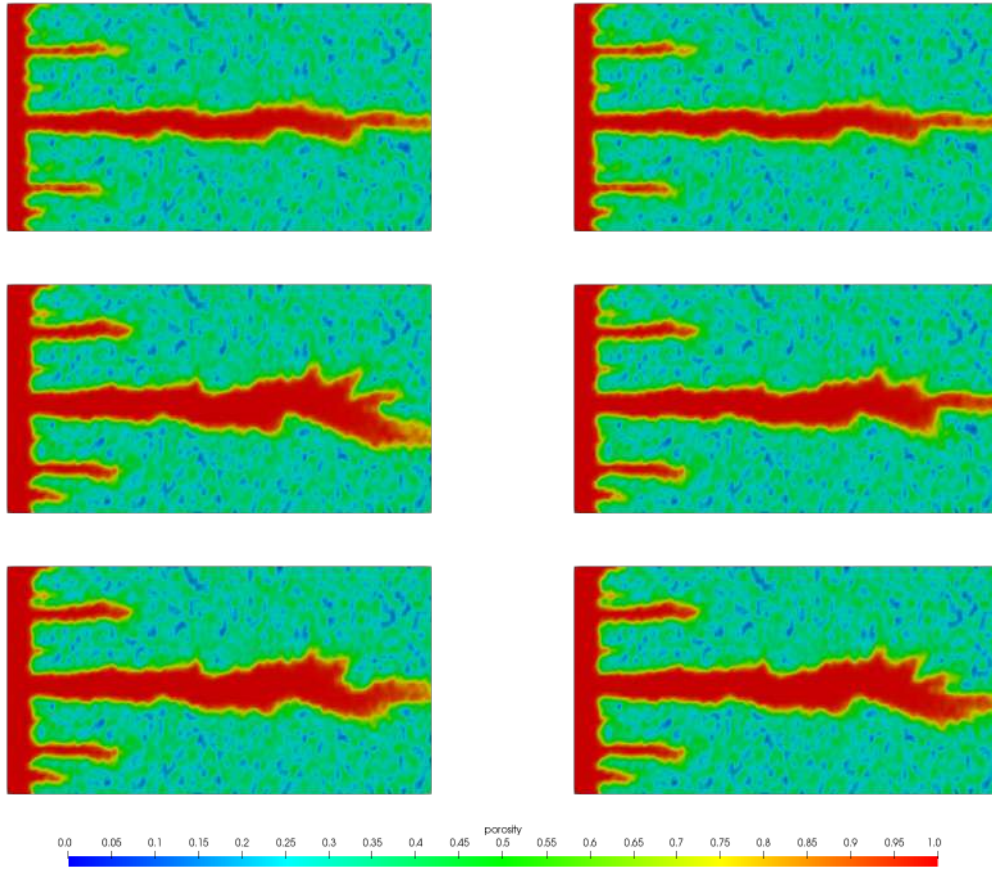


Figura 5.54: Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 100$.

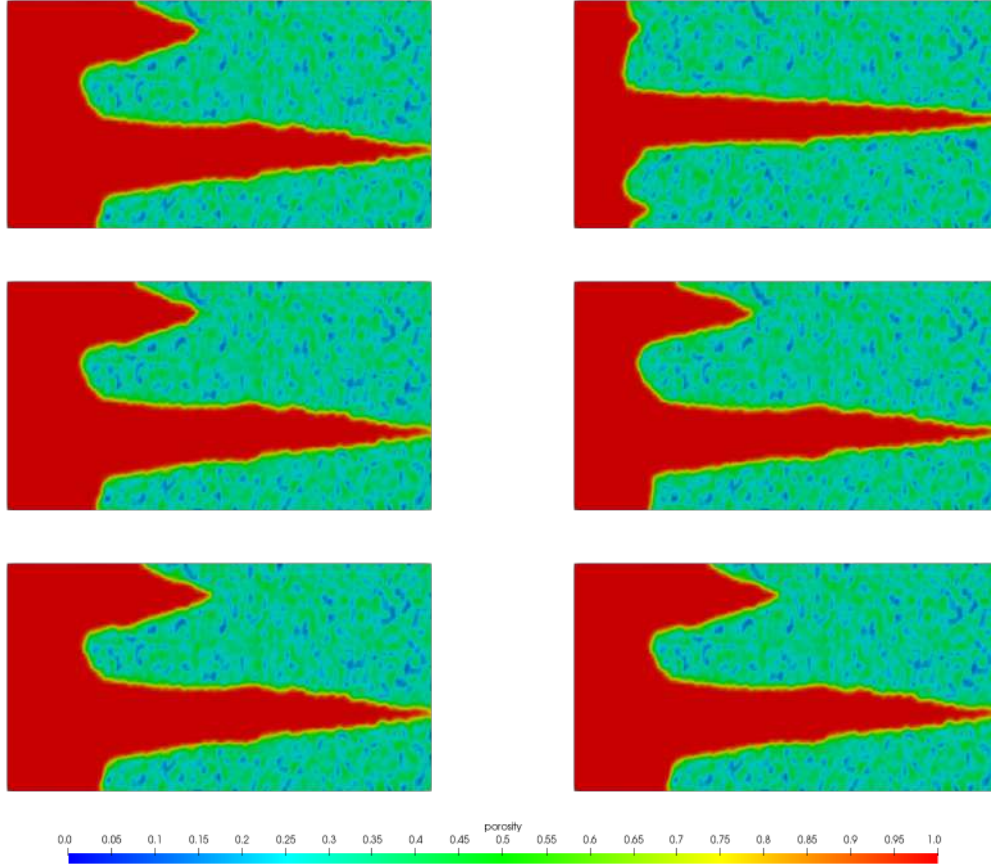


Figura 5.55: Perfis de porosidade para fluido Carreau com $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano. $Da = 1000$.

As curvas de PVbt para os casos simulados estão na Figura (5.56). Além dos casos apresentados nos resultados de padrão de dissolução, estão os casos com $Da = 1$ e $Da = 10000$, que correspondem a casos extremos para o número de Da e não há diferença significativa no padrão de dissolução. Pelo gráfico é possível notar um desvio dos casos com \mathbf{m}_f numérico, quando comparado com o mesmo caso com \mathbf{m}_f analítico, principalmente para altos números de Da . Esse comportamento é esperado pois estes casos tiveram maior divergência no tempo de *breakthrough*. Para baixos casos de Da , os resultados fornecidos por ambas metodologias foram bem próximos. Os resultados indicam que, assim como foi observado no estudo para fluido *power-law*, quanto menor o valor de n , menor tende a ser o PVbt.

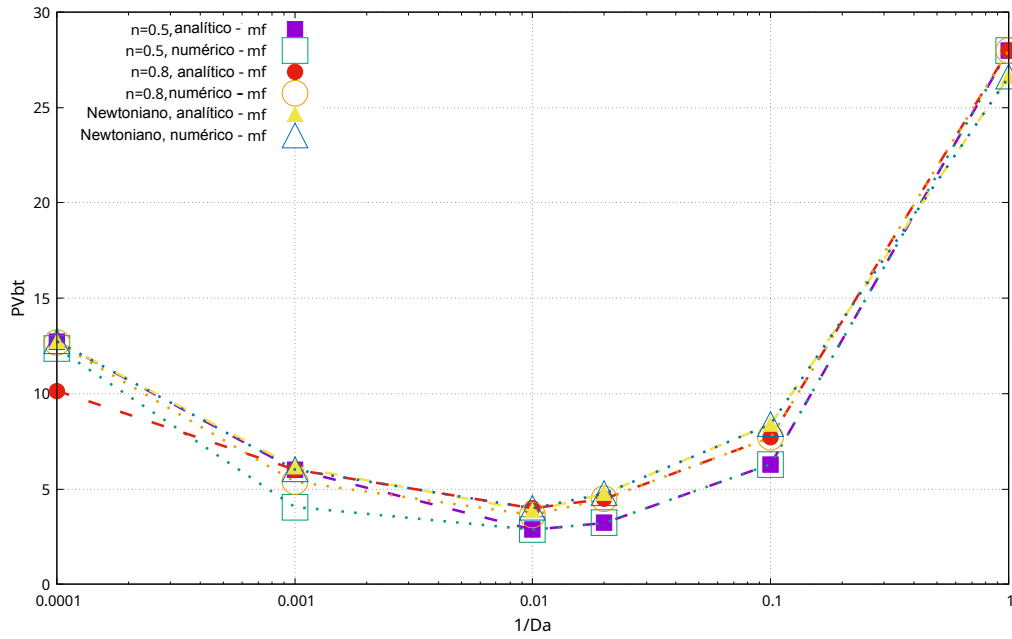


Figura 5.56: Curvas de PVbt para casos de poro com geometria cilíndrica.

O banco de dados também permite que outras geometrias de poro sejam aplicadas, o que não é possível na estratégia de combinar termos de interação analíticos. Na Figura (5.57) estão os gráficos de pressão adimensional em função do tempo para os casos $n = 0.5$, $n = 0.8$ e newtoniano, para três valores de δ : 0, 0.4 e 0.8; Para dois valores de Da : 10 e 100. Quando a geometria extensional é considerada no modelo de poro, é natural que haja maior resistência ao escoamento no meio poroso e, portanto, para a mesma vazão correspondente ao número de Da , seja necessária uma pressão maior na entrada. Este comportamento esperado é observado e ainda, quanto mais abrupta é a redução de raio do canal, o que corresponde a um valor maior de δ , maior é a pressão necessária na entrada. A leitura de pressão foi feita exatamente no centro do domínio.

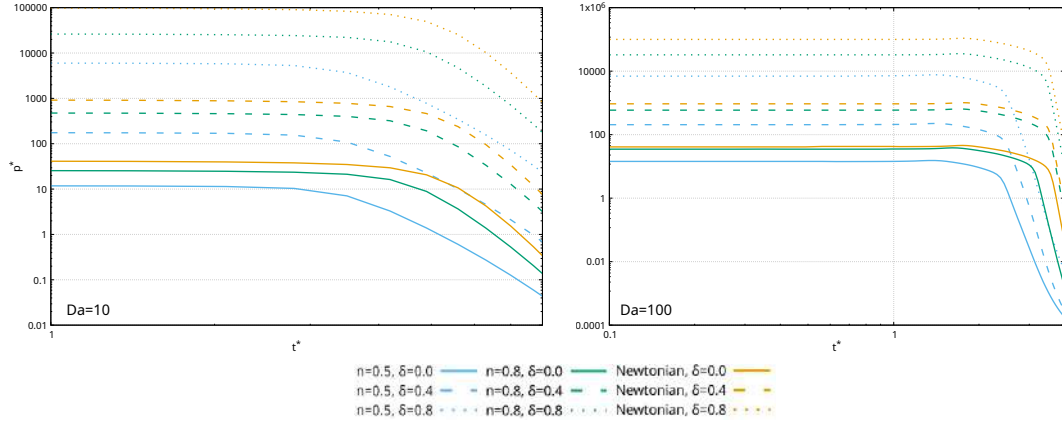


Figura 5.57: Queda de pressão adimensional ao longo do tempo para fluidos Carreau e newtoniano com três níveis de extensão. Casos com $Da = 10$ e $Da = 100$. *Probe* posicionada no centro do *plug*.

5.2.7 Casos Giesekus em Plug

Na Figura (5.58) estão os resultados em *plug* para o número de $Da = 10$. O padrão de dissolução usualmente encontrando neste Da é o cônico, que pode ser visto na primeira linha, correspondente ao caso de fluido newtoniano. Porém, ao simular os mesmos casos utilizando o modelo de Giesekus, é notada uma transição de um padrão cônico para um canal fino que se assemelha um *wormhole*. A mudança no padrão é notada para os dois valores de α analisados, bem como os dois valores de Wi . No maior valor de Wi , os canais formados são mais finos e o tempo de *breakthrough* é menor. O caso com $\alpha = 0.3$ também teve um tempo de *breakthrough* ligeiramente menor quando comparado ao caso $\alpha = 0.15$ e $Wi = 1$.

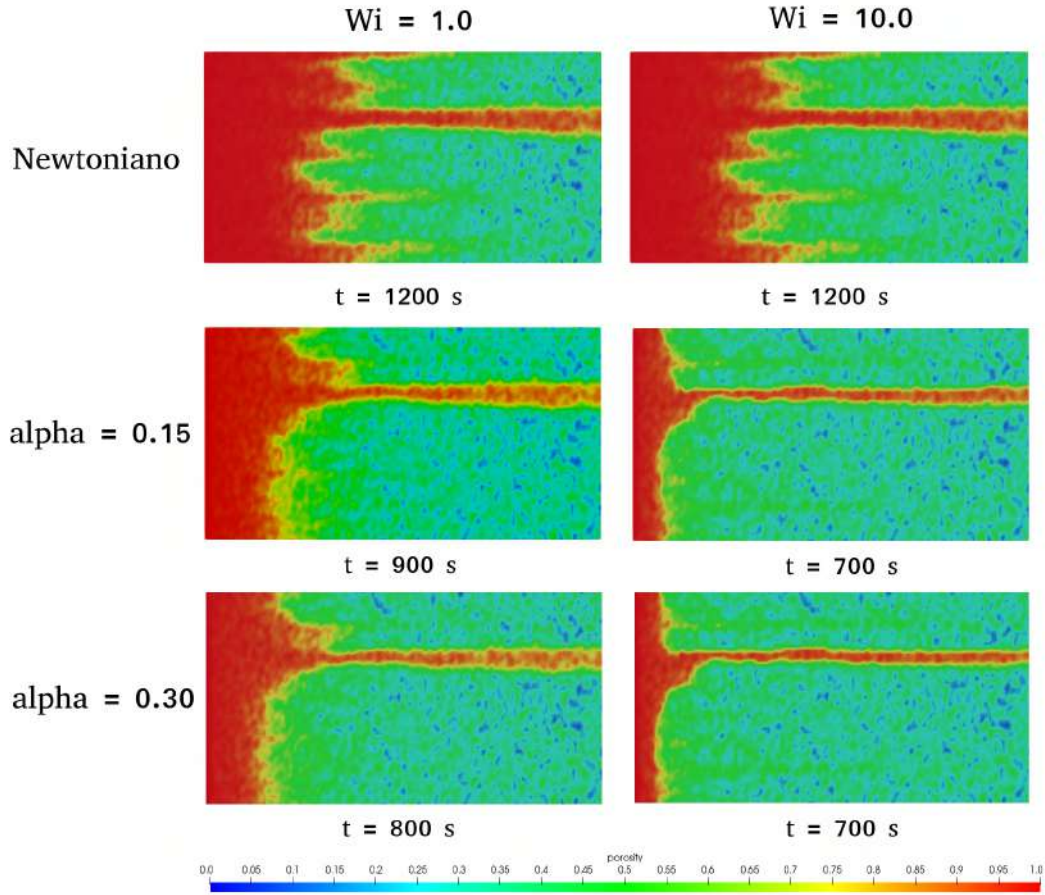


Figura 5.58: Perfis de porosidade no *breakthrough* para casos com $Da = 10$.

Para os casos com $Da = 50$, na Figura (5.59) é verificado um padrão ramificado para o caso newtoniano. Nos casos Giesekus, as ramificações ainda estão presentes, mas são muito menos pronunciadas, além dos canais formados serem consideravelmente mais finos. O tempo de *breakthrough* também é menor quando comparado com casos newtonianos. Outro efeito observado é a mudança na ramificação dominante. Nos casos com $Wi = 1$, a ramificação superior se desenvolveu, enquanto para $Wi = 10$, a inferior alcançou o *breakthrough*.

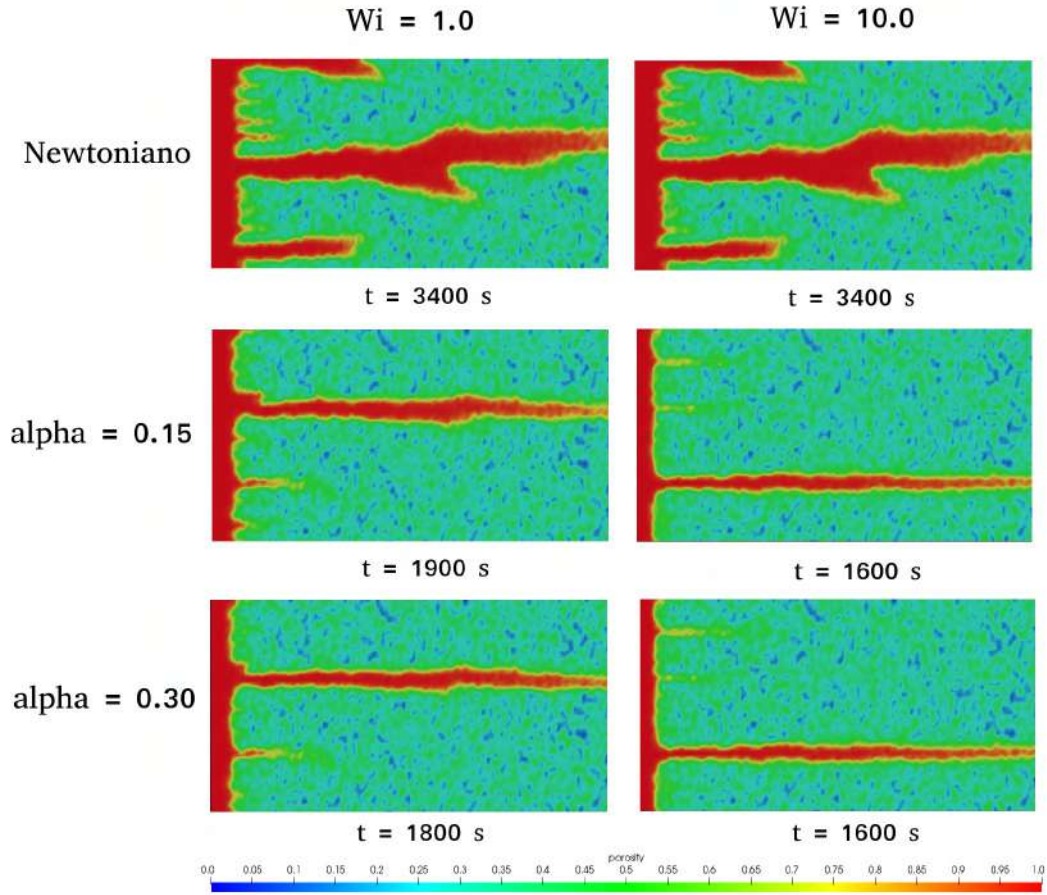


Figura 5.59: Perfis de porosidade no *breakthrough* para casos com $Da = 50$.

A mesma tendência é observada nos casos de $Da = 100$ na Figura (5.60). Os casos newtonianos apresentaram padrão ramificado e os Giesekus padrões ramificados mas com ramificações menores. Ainda, a diferença na formação dos canais entre os diferentes números de Wi e o menor tempo de *breakthrough*. Ainda, neste caso, em $\alpha = 0.3$, os resultados foram próximos tanto para $Wi = 1$ e $Wi = 10$.

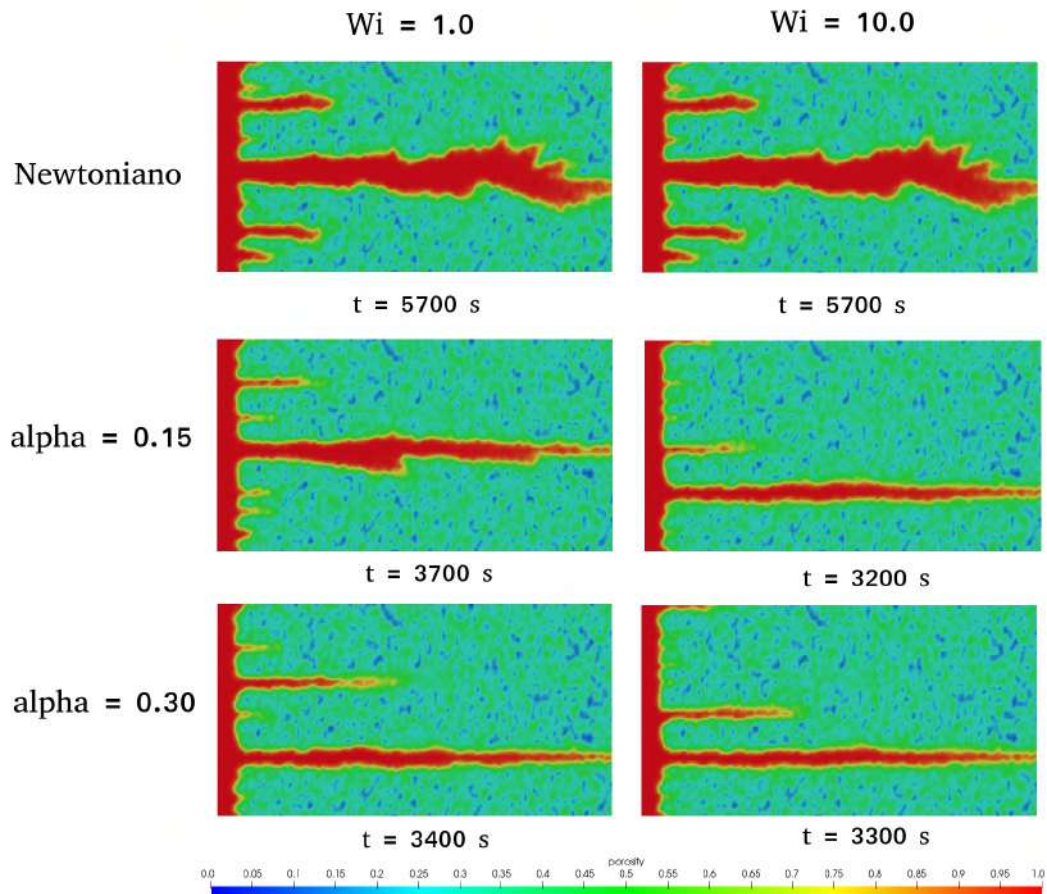


Figura 5.60: Perfis de porosidade no *breakthrough* para casos com $Da = 100$.

Por fim, os casos com $Da = 1000$ na Figura (5.61). Estes casos representam um alto número de Da e, portanto, baixas velocidades de injeção de ácido. Os casos Giesekus apresentaram comportamento mais próximo do newtoniano, sendo as principais diferenças o pronunciamento de algumas ramificações e o tempo de *breakthrough*, impactando diretamente no PVBt.

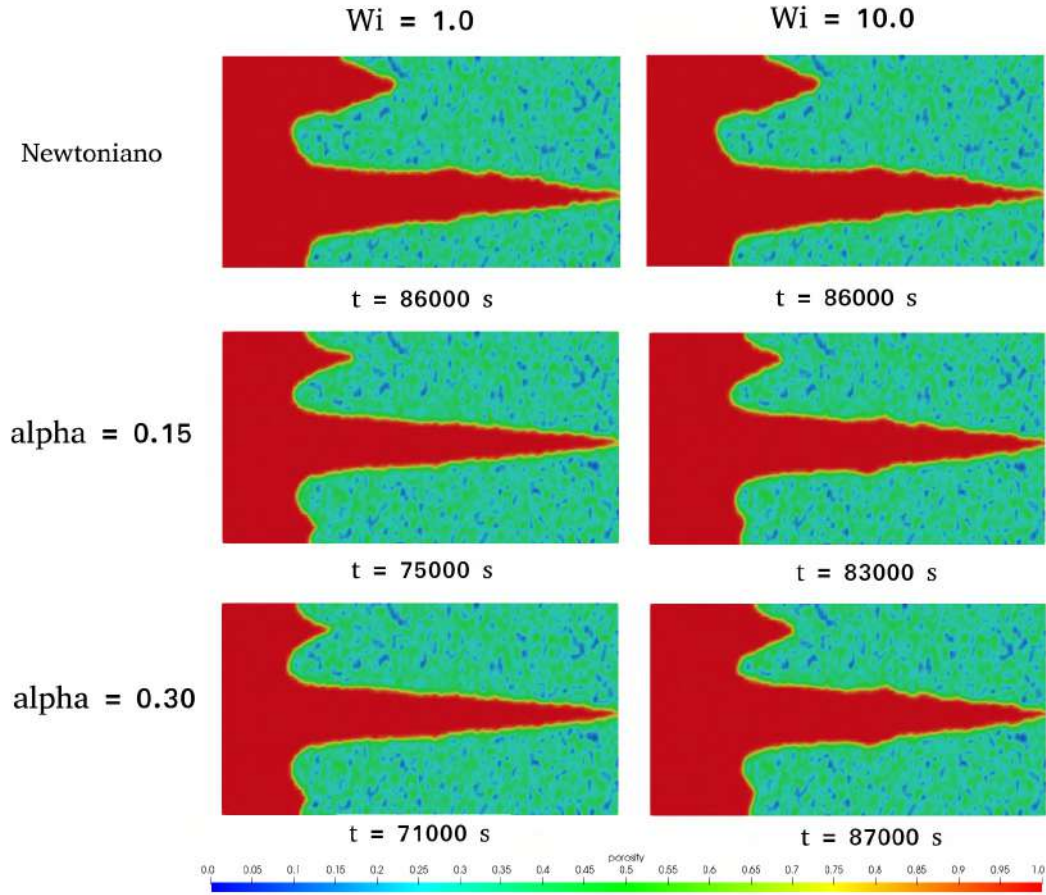


Figura 5.61: Perfis de porosidade no *breakthrough* para casos com $Da = 1000$.

As curvas de PVBt são apresentadas na Figura (5.62). Os casos newtonianos apresentaram maior PVBt, o que é esperado, devido ao maior tempo de *breakthrough* na maioria dos casos. Também há a tendência de quanto maior o valor de α , menor o PVBt e quanto maior o número de Wi , também menor o PVBt. O ponto ótimo de injeção para a maioria dos casos foi em $Da = 100$.

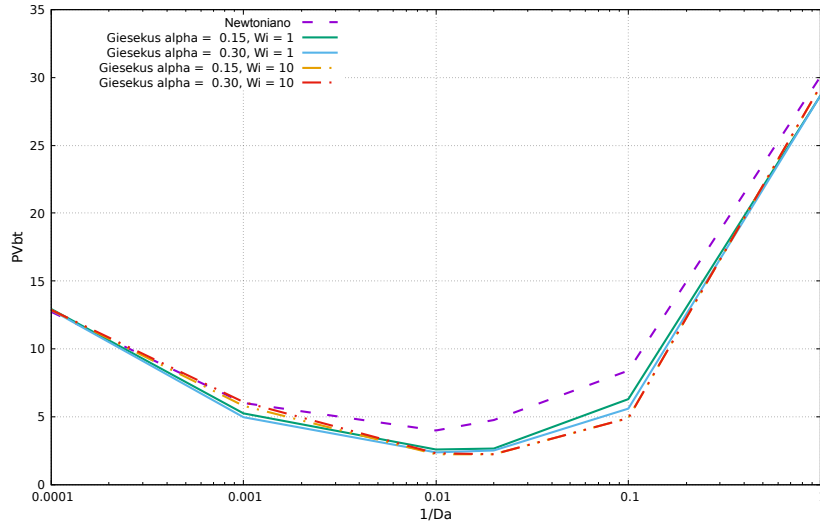


Figura 5.62: Curvas de PVBt para os casos newtonianos e Giesekus.

5.2.8 Volume Elementar Representativo com Distribuição de Poros

Quando o volume elementar representativo não é mais composto por um único poro idealizado e sim por uma distribuição de poros, ocorre um impacto na mobilidade. Para o caso de uma distribuição de poros cilíndricos, são simulados casos a fim de avaliar esta hipótese, a partir dos cálculos de mobilidade deduzidos na seção de metodologia. Foram simulados casos *power-law shear-thinning* e Carreau. As curvas de viscosidade estão na Figura (5.63).

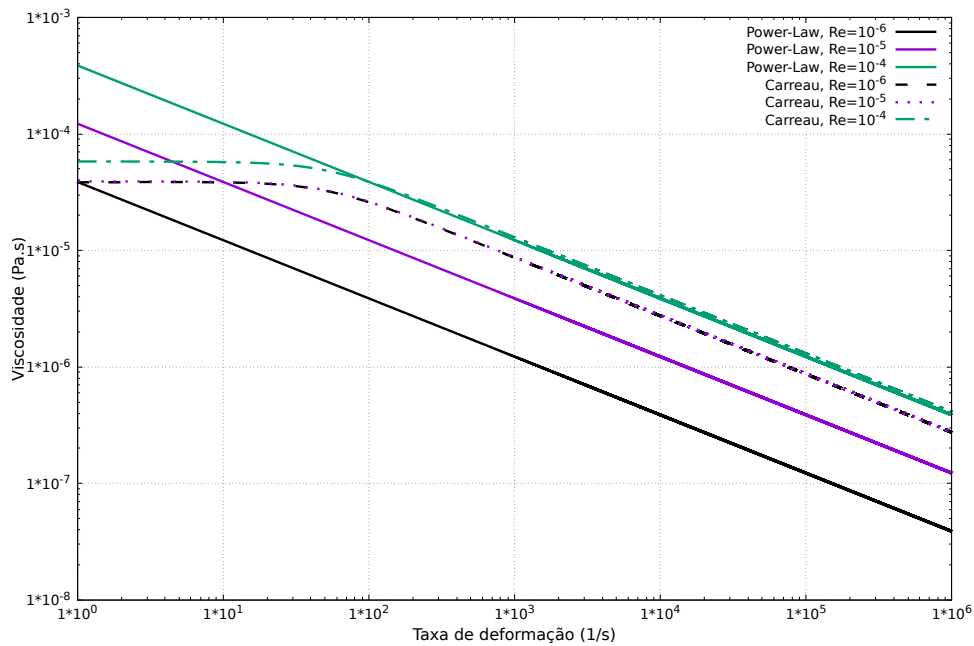


Figura 5.63: Curvas de viscosidade para casos Carraeu e *power-Law*.

O tipo de distribuição considerada nos casos é a distribuição normal, com dois valores de desvio padrão. Na Figura (5.64) está o impacto na queda de pressão no plug, ao longo da direção do escoamento, para fluido *power-law* com $n = 0.5$. As medidas foram feitas na metade da altura do *plug*. Nesses casos, a média $\mu = 10^{-6} m$, com valores de desvio padrão $\sigma_1 = 0.2\mu$ e $\sigma_2 = 0.9\mu$. A linha contínua, que representa o caso de REV com um único poro, é que apresenta a maior pressão para o mesmo número de Reynolds. Números de Re menores apresentam uma queda de pressão menor. As linhas tracejadas representam os casos com distribuição normal, valor de média μ e desvio padrão σ_1 . Claramente, há uma diferença significativa na pressão necessária para manter a mesma vazão. As linhas pontilhadas representam os casos com média μ e o maior desvio padrão, σ_2 . Quando comparada com a curva correspondente ao REV de um único poro, para o mesmo Re , a queda na pressão é drástica. Isso indica que, de fato, poros com maior raio podem ter impacto significativo se estiverem presentes, pois formam caminhos preferenciais para o fluido, apresentando maior mobilidade. Os mesmos casos também são plotados de forma adimensional. Desta forma, a pressão adimensional só varia com o desvio padrão. Também fica mais evidente a diferença entre os casos.

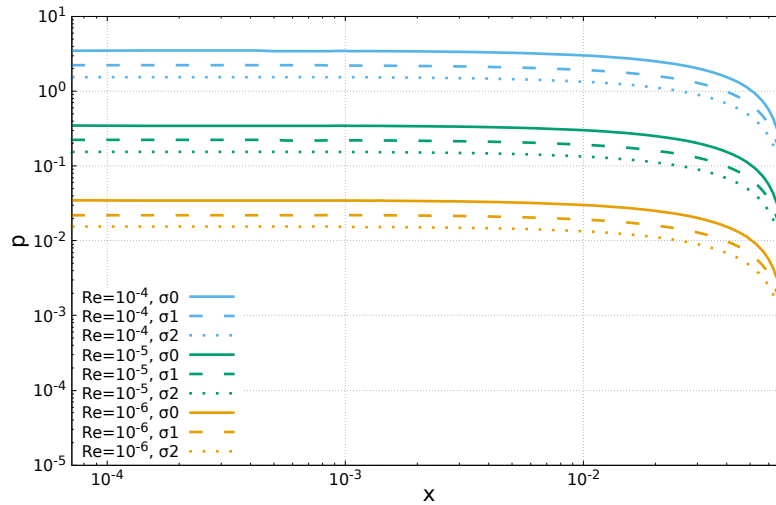


Figura 5.64: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional.

Para verificar uma possível influência da porosidade nos resultados, foram simulados casos com um novo campo de porosidade, com $\bar{\varepsilon} = 0.1$ e desvio padrão de 0.05. O fluido utilizado é também o *power-law* com $n = 0.5$. Não houve diferença do ponto de vista qualitativo nos resultados obtidos, como observado na Figura (5.66).

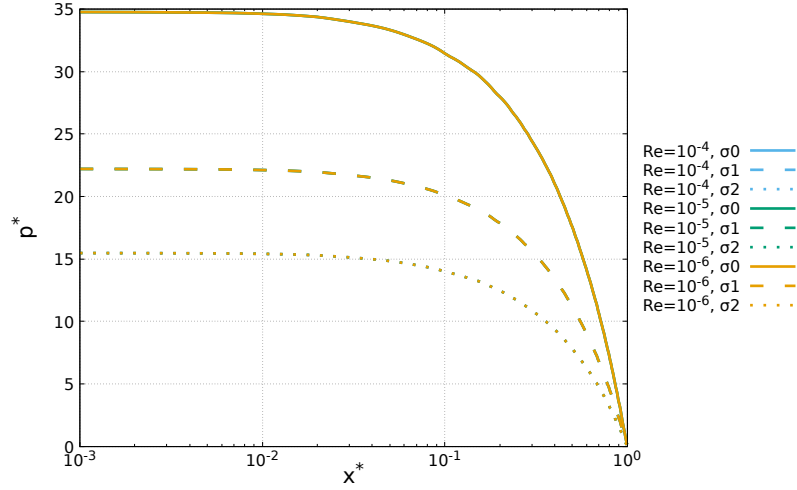


Figura 5.65: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional adimensional.

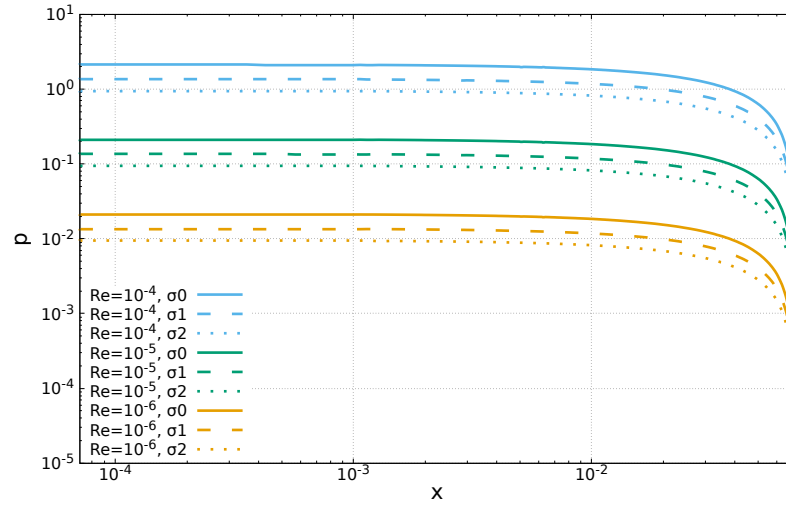


Figura 5.66: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional com outra distribuição inicial de porosidade ($\bar{\varepsilon} = 0.1$).

O modelo de Carreau com $n = 0.5$ foi utilizado nos casos com a distribuição de porosidade inicial. Os resultados estão na Figura 5.68. Também ocorre a tendência esperada de que para casos com desvio padrão maior, a pressão necessária seja menor para o mesmo número de Re . Neste caso, o caso de maior Reynolds e maior desvio padrão apresentou pressão menor do que o caso com número de Re imediatamente abaixo e com REV com único poro, o que não ocorreu nos casos *power-law*. Ainda nesta figura, o gráfico adimensional não teve as curvas completamente sobrepostas para o mesmo valor de desvio padrão. Este resultado pode ser explicado pela região de transição do patamar newtoniano para o *power-law*, presente no fluido Carreau, que não é bem capturada pelo número de Reynolds. Quando a região de transição

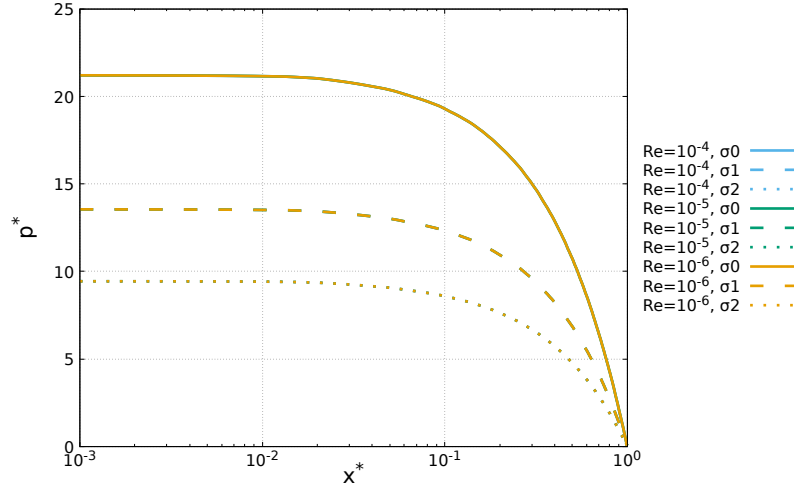


Figura 5.67: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão adimensional com outra distribuição inicial de porosidade ($\bar{\varepsilon} = 0.1$).

é alterada, usando um lambda diferente (pois $\dot{\gamma}_c = 1/\lambda$), os casos adimensionais permanecem plenamente compatíveis, conforme Figura (5.70).

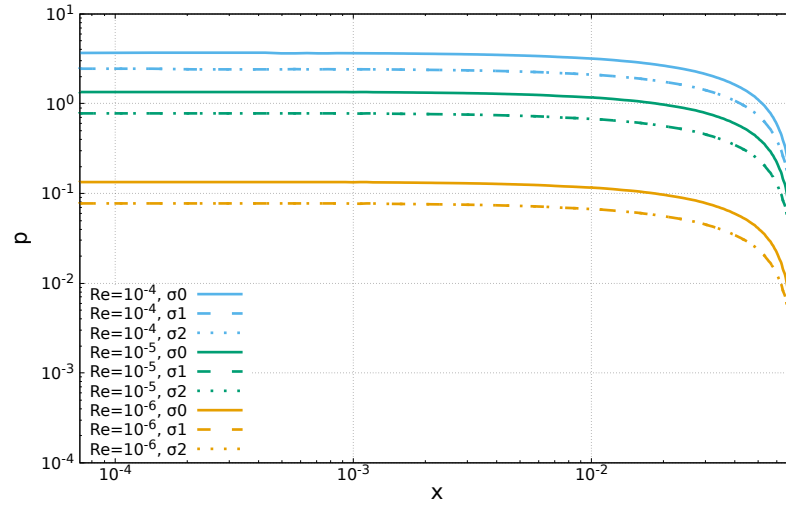


Figura 5.68: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.02$).

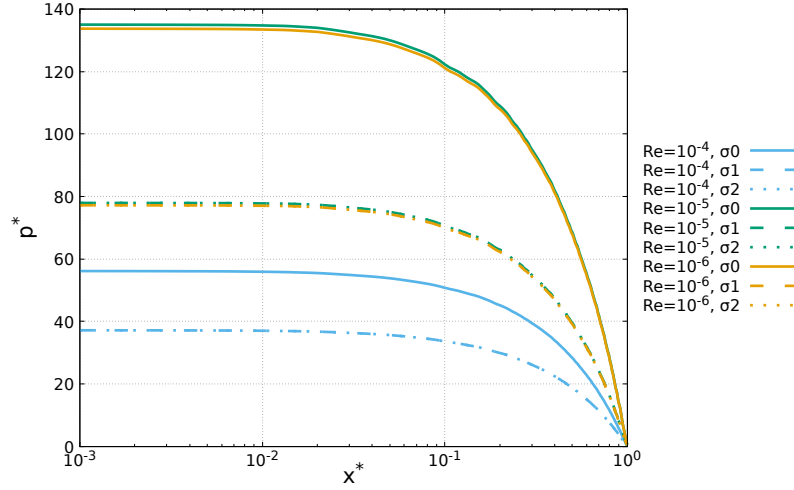


Figura 5.69: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão adimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.02$).

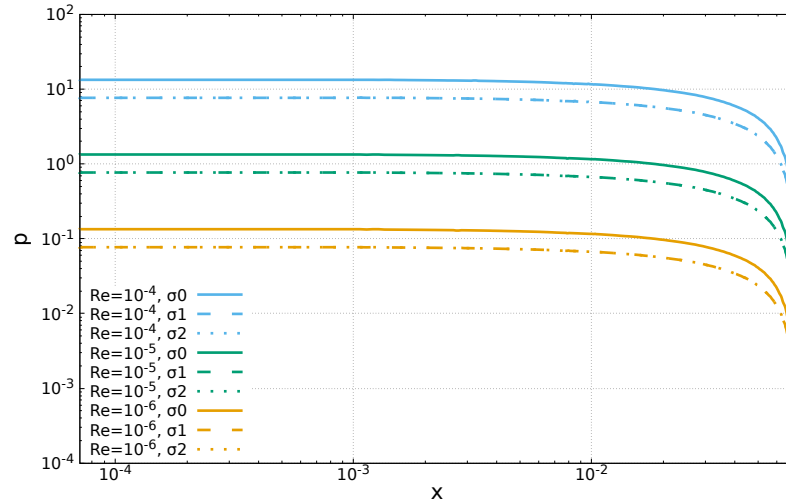


Figura 5.70: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão dimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.001$).

Também foram simulados casos com diferentes valores para o raio de poro médio: $R1 = 10^{-7} \text{ m}$ e $R3 = 10^{-5} \text{ m}$. $R2$ representa os casos anteriores de 10^{-6} m . Os resultados para pressão dimensional e adimensional estão na Figura (5.72). Raio de poro médio menor implica numa mobilidade menor. Este impacto na mobilidade é notado pela pressão maior em casos com r_p maior. Para o mesmo caso, quanto maior o valor do desvio padrão, menor é a pressão. Alguns casos estão sobrepostos na Figura de pressão dimensional. Quando os resultados são plotados na forma adimensional, o efeito do número de Re é encapsulado, de forma que a queda de pressão depende apenas do raio de poro médio e do desvio padrão.

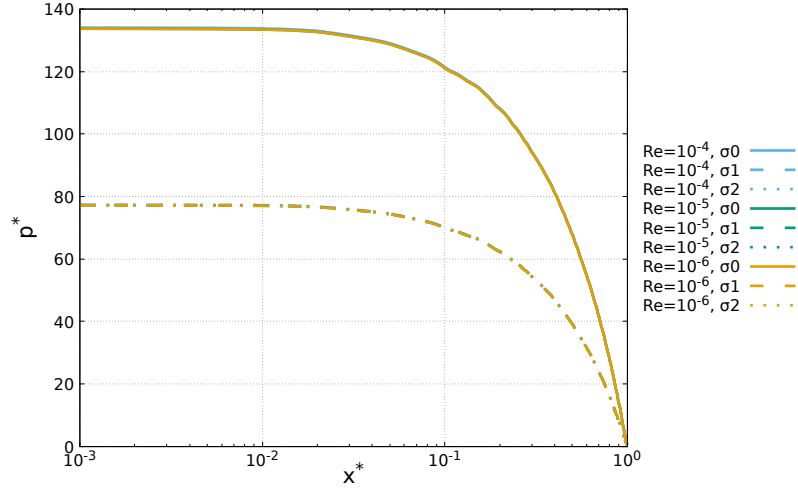


Figura 5.71: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão adimensional para casos com modelo de fluido de Carreau ($\lambda = 0.001$).

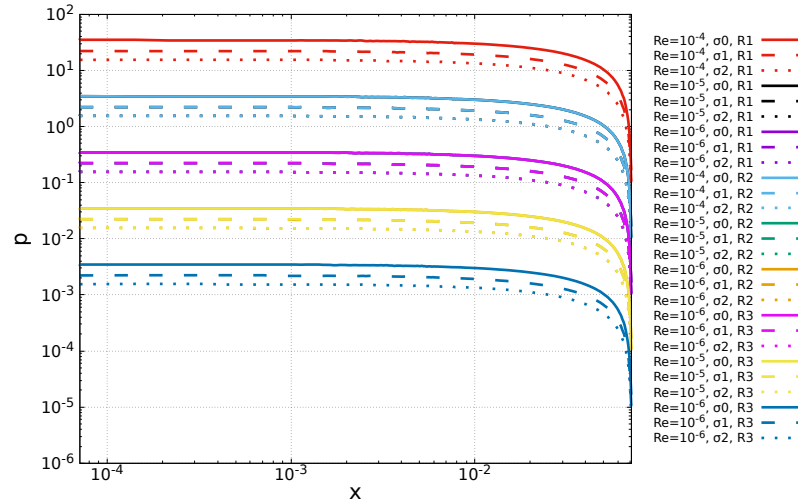


Figura 5.72: Comparação da queda de pressão dimensional para diferentes valores de raio de poro médio.

A razão de mobilidades f_M é plotada para casos com média μ e desvio padrão σ_1 na Figura (5.74) e σ_2 na Figura (5.75). São plotados para diferentes valores de N , que corresponde ao número de poros no volume elementar representativo. Também é plotada a razão de mobilidades média. Pela Figura (5.74), é possível notar que quanto maior o valor de N , menor a dispersão dos sorteios em relação a média. Ainda, a média dos casos é bem próxima, o que indica uma tendência de que é necessário um número alto de poros no REV para tornar o efeito da distribuição representativo. Este fenômeno também é notado no caso σ_2 , na Figura (5.75). Porém, conforme esperado pela diferença vista nos resultados de pressão, a razão de mobilidades é bem maior quando comparada ao caso σ_1 .

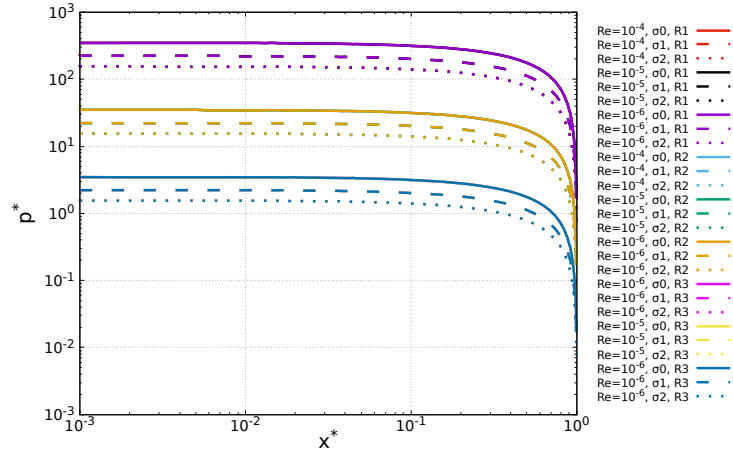
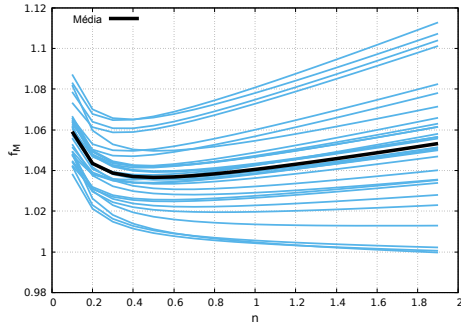
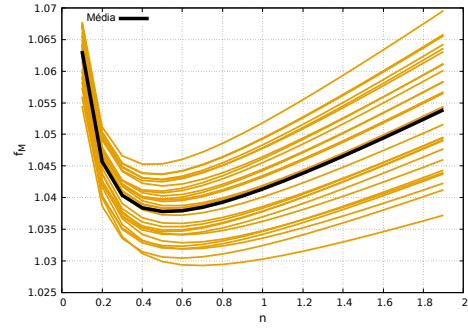


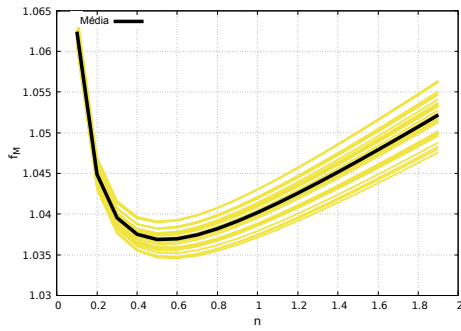
Figura 5.73: Comparação da queda de pressão adimensional para diferentes valores de raio de poro médio.



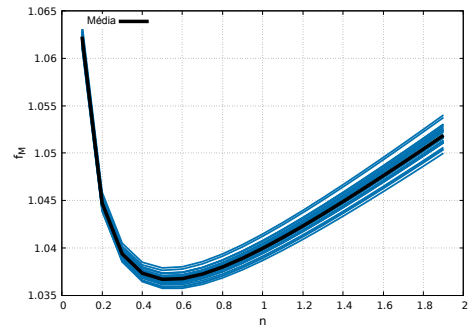
(a) $N = 100$



(b) $N = 1000$



(c) $N = 10000$



(d) $N = 50000$

Figura 5.74: Razão de mobilidade para casos $R_1 \sigma_1$.

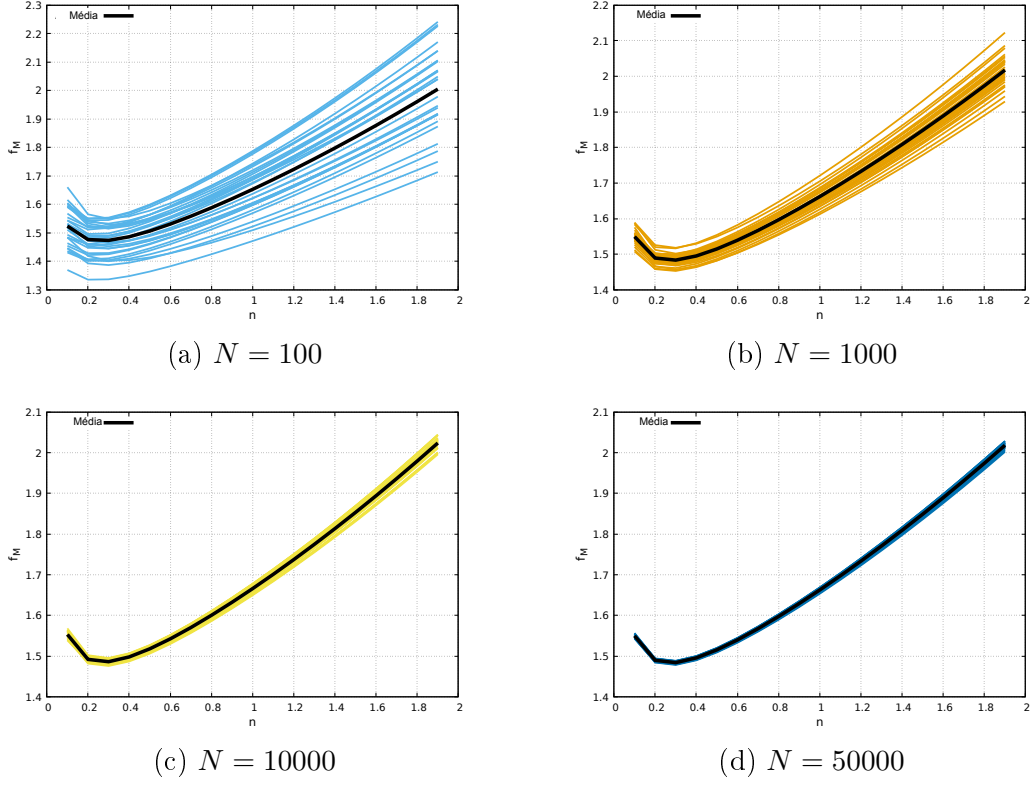


Figura 5.75: Razão de mobilidade para casos $R_1 \sigma_2$.

Fica claro pelos resultados que o raio médio e o desvio padrão são parâmetros chave na modelagem do REV, o que pode impactar significativamente nos resultados em escala de *plug*. Ainda, é esperado que o tipo de distribuição também afete sensivelmente os resultados. Na Figura (5.76), é plotada a razão de mobilidade para casos com média μ e σ_1 , para diferentes valores de N , considerando distribuição uniforme. Não houve diferença em considerar esta distribuição e considerar o REV composto por apenas um poro representativo.

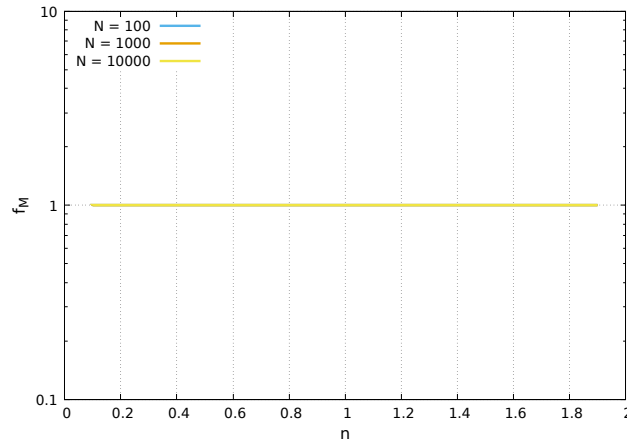


Figura 5.76: Razão de mobilidades para casos com distribuição uniforme e R_1 .

É verificado o impacto do modelo na viscosidade aparente, medida de um *plug* simulado. Um caso teste é executado, considerando um caso *power-law shear-thinning* com $n = 0.5$. A viscosidade é plotada na Figura (5.77), representada pela curva verde. Casos com este fluido são simulados no *plug*, considerando o raio médio de $\bar{R}2 = 10^{-6} m$ e dois valores de desvio padrão. A viscosidade aparente é obtida da equação (4.159) e a taxa de deformação aparente é obtida da equação (4.161), substituindo R pelo valor do raio médio. Este procedimento usa a informação única do valor médio. É possível notar na Figura (5.77)(a) que a viscosidade aparente obtida do modelo de poro único é equivalente à viscosidade do modelo. Isso é esperado porque a função de taxa de cisalhamento aparente é obtida através da hipótese de poros representativos. Quando a distribuição é considerada, a viscosidade aparente é menor e ainda menor para um valor maior de σ , o que indica que as simulações considerando o volume elementar representativo com distribuição de poros estão sendo impactadas pelos poros maiores presentes na distribuição. Curiosamente, este resultado está na mesma tendência dos obtidos por [50], pois pela natureza cisalhante do fluido, uma viscosidade menor também seria obtida deslocando a taxa de cisalhamento característica para a direita. Este resultado mostra que uma distribuição não uniforme de poros pode ser vista como uma possível fonte da discrepância entre a função de viscosidade obtida em um reômetro e aquela obtida com a equação de Darcy.

Na Fig. (5.77)(b) é plotada a função de viscosidade com as correções obtidas considerando a distribuição do raio dos poros e a permeabilidade efetiva para os casos de distribuição correspondentes, conforme descrito na seção 2.5.3. É possível notar que a correção aproxima a curva da função de viscosidade ao modelo original, embora não de forma perfeita. Além disso, são plotados os resultados de Cannella et al. [50] com a correção da taxa de cisalhamento, que consiste em um fator que amplifica a taxa de cisalhamento aparente derivada da suposição do poro médio, como a Eq. (4.161). A partir da Figura, podemos supor que o caso de Cannella et al. poderia ser representado por um caso com distribuição gaussiana e um valor de desvio padrão próximo a σ_1 . Como o coeficiente é independente do caso, os demais casos não puderam ser pareados, mesmo sem distribuição. Para o fator de rocha de Fletcher λ [53], o intervalo de valores relatados não se aplicam em todos os casos tratados aqui. Apenas o caso com σ_1 apresentou boa concordância com $\lambda = 3.01$. A tabela (5.9) tem os fatores correspondentes que melhor combinam a viscosidade aparente do *plug* com a viscosidade do fluido. Cannella et al. têm um fator para todos os casos. Na tabela, o fator é convertido para ser aplicado diretamente na equação (4.161). Isso acontece porque as expressões propostas por cada autor se mostram um pouco diferentes da expressão proposta aqui, mas ambas são proporcionais a v/R .

Caso	σ_0	σ_1	σ_2
c	0	3	23
Cannella et al.	$\frac{3}{2}\sqrt{8}$	$\frac{3}{2}\sqrt{8}$	$\frac{3}{2}\sqrt{8}$
Fletcher et al.	$\frac{25}{16}3.01$	$\frac{25}{16}3.01$	$\frac{25}{16}10.06$

Tabela 5.9: Fatores para os diferentes casos com distribuição.

Vale ressaltar que nas simulações o valor de N é localmente dependente da porosidade e do raio médio dos poros para que a porosidade seja mantida. Um alto valor representativo de N é escolhido para os resultados da escala de *plug*. Para um valor suficientemente alto de N , o comportamento de mobilidade não muda significativamente, como visto na Fig. 5.75. Muitos poros são sorteados em cada célula de acordo com a distribuição considerada e o valor estimado para N . Devido ao alto uso de recursos computacionais e à natureza local da seleção aleatória de poros, os poros sorteados não puderam ser levados diretamente para a análise de viscosidade aparente. Assim, para o gráfico de viscosidade aparente nos casos com correção, os poros são novamente sorteados, respeitando a mesma distribuição correspondente, com a mesma média e desvio padrão. Este procedimento pode explicar parcialmente as discrepâncias ainda obtidas após a correção na Fig. (5.77)(b).

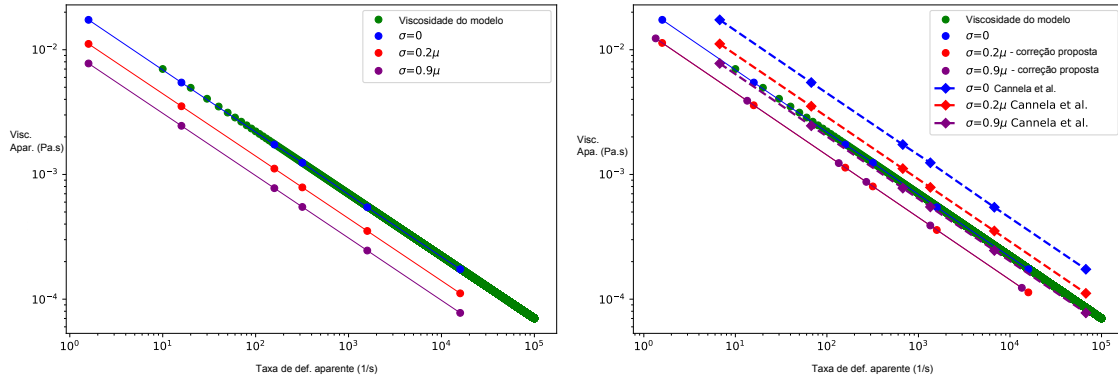
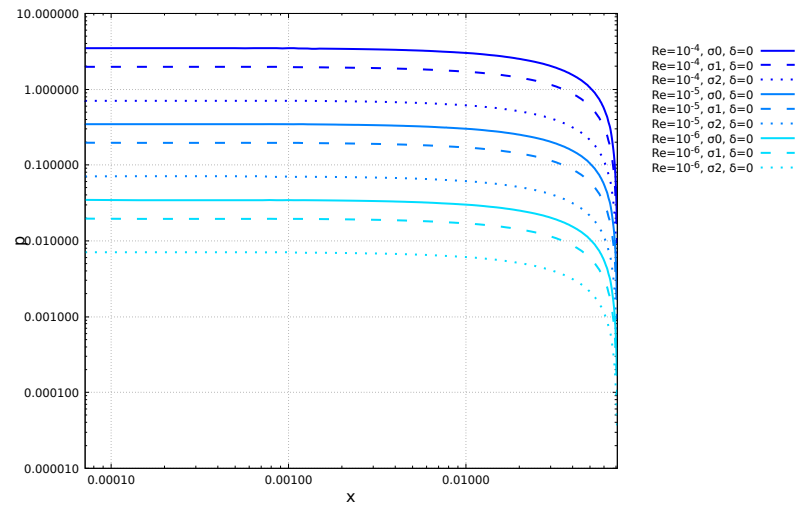


Figura 5.77: Viscosidade aparente versus taxa de deformação aparente para casos *power-law* com $n = 0.5$ para diferentes distribuições normais e a comparação com a viscosidade original do modelo. (a) Taxa de deformação característica obtida usando a expressão para raio de poro representativo. (b) Correção da taxa de deformação característica levando a distribuição em consideração.

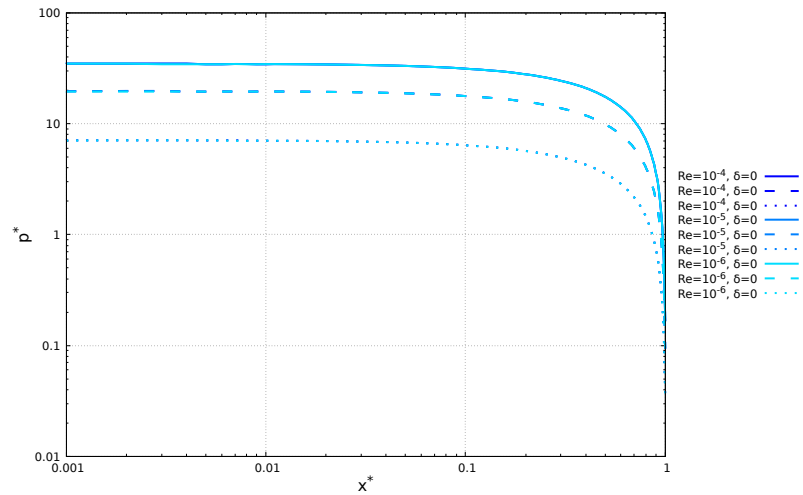
Casos Herschel-Bulkley

Nesta seção, são apresentados os resultados em *plug* considerando uma distribuição não-uniforme de poros. A distribuição é normal, com raio médio de $10^{-6} m$ e dois valores para o desvio padrão: $\sigma_1 = 0.2\bar{R}$ e $\sigma_2 = 0.9\bar{R}$. Na Figura (5.78) está o impacto na queda de pressão no *plug*, ao longo da direção do escoamento, para fluido Herschel-Bulkley com $n = 0.5$. As medidas foram feitas na metade da altura

do *plug*. A linha contínua, que representa o caso de REV com um único poro, é que apresenta a maior pressão para o mesmo número de Reynolds. Números de Re menores apresentam uma queda de pressão menor. As linhas tracejadas representam os casos com distribuição normal e desvio padrão σ_1 . As linhas pontilhadas representam os casos com o maior desvio padrão, σ_2 . A mesma tendência observada nos casos *power-law* é vista aqui. Quando a distribuição é considerada, a queda de pressão é menor quando comparado com o caso sem distribuição. E é ainda menor para o maior valor de desvio padrão. Os mesmos casos também são plotados de forma adimensional. Novamente, a pressão adimensional só varia com o desvio padrão e também fica mais evidente a diferença entre os casos.



(a) Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão. Casos Herschel-Bulkley.



(b) Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão adimensional. Casos Herschel-Bulkley.

Figura 5.78: Influência da hipótese do REV sobre a queda de pressão.

REV com Distribuição e Extensionalidade

A seguir, são apresentados os resultados da queda de pressão dimensional e adimensional para os casos com distribuição não-heterogênea de poros no REV, considerando poros com geometria convergente-divergente. Foram simulados casos *power-law* e Carreau compatíveis com os analisados anteriormente, com $n = 0.5$ e uma distribuição normal com raio médio de $\bar{R} = 10^{-6} m$ e dois valores de desvio padrão: $\sigma_1 = 0.2\bar{R}$ e $\sigma_2 = 0.9\bar{R}$. Na Figura (5.79) estão os resultados para a queda de pressão dimensional ao longo do *plug* considerando modelo reológico *power-law*.

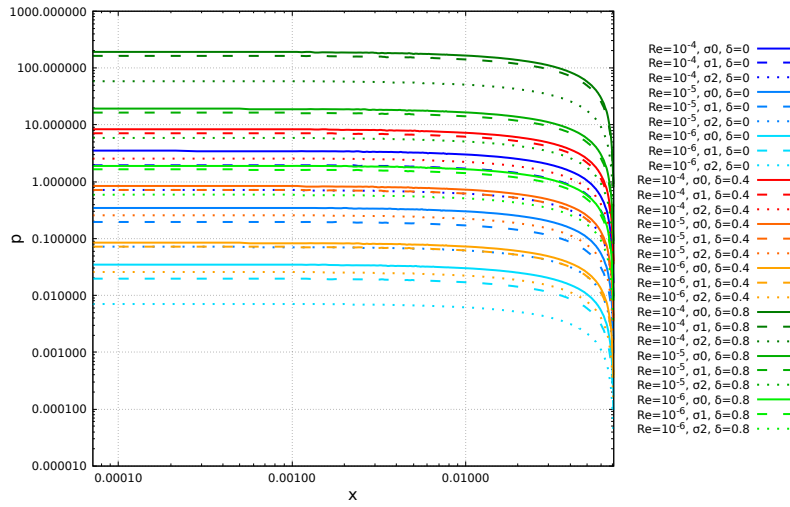


Figura 5.79: Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão. Casos *power-law*.

Cada família de cores representa um grau de extensão. As curvas azuis representam grau de extensão nulo, quando o poro é cilíndrico. Curvas vermelhas e laranja representam casos com 40% de extensão. Os casos representados pelas curvas verdes indicam as simulações que consideram poros com o maior grau de extensão disponível pelo banco de dados, de 80%. As linhas contínuas correspondem aos casos sem distribuição. Linhas tracejadas aos casos σ_1 e linhas pontilhadas aos casos σ_2 . Por fim, quanto mais escura a cor, maior o número de Reynolds. Os resultados mostram uma tendência esperada de que quanto maior o grau de extensão, maior a queda de pressão, pois a mobilidade é reduzida. Porém, quando este efeito é combinado com o da heterogeneidade no interior do REV, casos com extensão podem apresentar uma queda de pressão menor quando comparados a casos sem extensão, para o mesmo número de Reynolds. É o caso, por exemplo, de $Re = 10^{-4}$, $\delta = 0$ e σ_0 , representado pela curva contínua azul escuro e o caso $Re = 10^{-4}$, $\delta = 0.4$ e σ_2 representado pela curva pontilhada vermelha. Apesar de ter um grau de extensão muito maior, o segundo caso apresentou maior mobilidade, devido ao modelo de distribuição não-uniforme de poros. Os resultados também são apresentados na forma adimensional na Figura (5.80).

Os casos são significativamente colapsados na versão adimensional, dependendo ainda da distribuição e agora do grau de extensão. Também é possível notar o cruzamento dos casos com diferentes valores de δ .

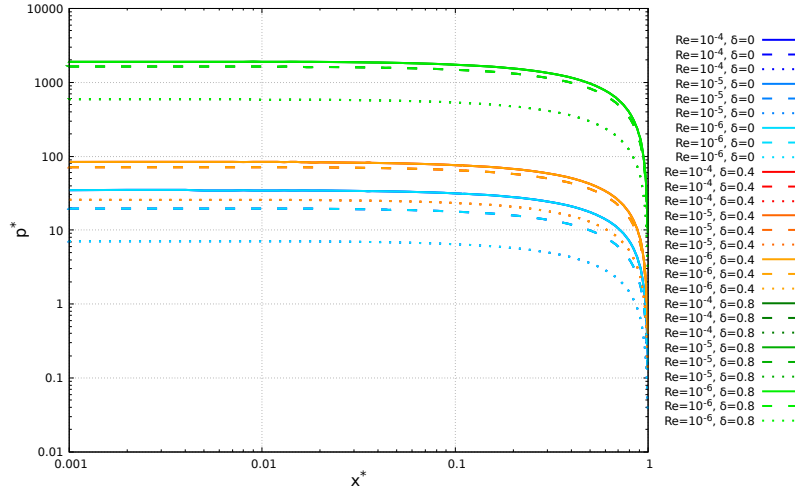


Figura 5.80: Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão adimensional. Casos *power-law*.

Na Figura (5.81) estão os casos Carreau, para dois níveis de extensão. É observada a mesma tendência dos casos *power-law*, onde um maior grau de extensão leva a quedas de pressão maiores, quando comparados com casos com mesmo Reynolds e mesma distribuição, devido a redução de permeabilidade. Também há cruzamento entre casos de mesmo Reynolds, demonstrando o efeito combinado no meio poroso. Os resultados na forma adimensional estão na Figura (5.82), novamente apresentados de forma condensada, independente do número de Reynolds.

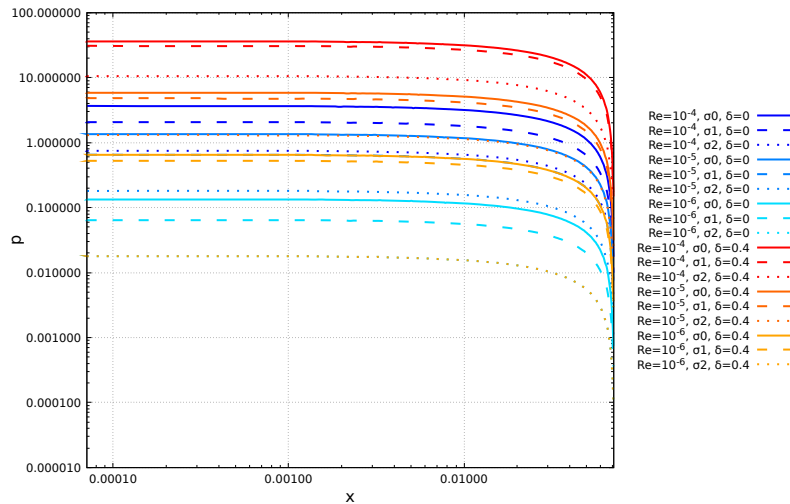


Figura 5.81: Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão. Casos Carreau.

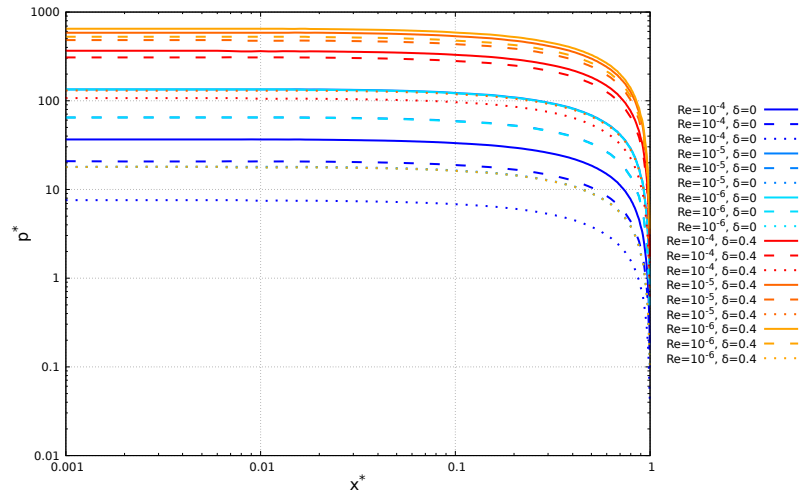


Figura 5.82: Influência das hipóteses no R.E.V sobre a pressão adimensional. Casos Carreau.

Capítulo 6

Considerações Finais

6.1 Conclusões

Na tese, foram investigados os efeitos reológicos no processo de acidificação de reservatórios carbonáticos. Foi aplicado um modelo de duas escalas que considera o balanço de quantidade de movimento linear completo, que permite o estudo do escoamento de fluidos reativos não newtonianos em meios porosos, inclusive em regiões de alta permeabilidade, como canais ou cavernas. A informação da menor escala é acoplada no modelo em escala de Darcy através de correlações de permeabilidade, coeficiente de transferência de massa mas principalmente do termo de interação sólido-fluido, previsto pela Teoria de Misturas da Mecânica do Contínuo. Este termo fonte representa a resistência que o fluido sofre devido a presença do meio poroso.

Foi proposto um modelo de viscosidade com dependência do pH, motivado pela aplicação de fluidos divergentes. Ainda, foi montado um banco de dados com informações sobre a força adimensional em escala de poro, para alimentar as simulações na maior escala, considerando modelos de fluidos mais complexos, os quais não apresentam solução analítica para o escoamento completamente desenvolvido em um poro cilíndrico. Além de permitir que tais modelos reológicos sejam aplicados, a metodologia permite idealizações mais complexas quanto à geometria do poro. Foram simulados casos considerando geometria convergente-divergente, que conferem uma característica extensional ao escoamento, aspecto importante na análise de fluidos não newtonianos. O banco de dados com geometria convergente-divergente foi montado considerando 4 graus de extensionalidade, além da extensionalidade nula que corresponde ao caso cilíndrico. Ainda, uma nova abordagem para o volume elementar representativo (REV) do modelo foi proposta para representar a heterogeneidade do problema na menor escala. O REV foi analisado considerando uma distribuição não-uniforme de poros. O termo de interação e o tensor mobili-

dade para fluido newtoniano e *power-law* foram calculados analiticamente. Também foram analisados resultados considerando fluido Carreau.

O pacote aberto de fluidodinâmica computacional OpenFOAM foi utilizado para simular os casos, tanto em escala de poro quanto de *plug*. Diversas bibliotecas foram implementadas para simular os modelos propostos.

Os resultados mostraram que a reologia do ácido de fato impacta significativamente nos resultados, quando comparados com os casos equivalentes newtonianos. Nos casos *power-law*, os padrões de dissolução mudaram de acordo com o índice de comportamento avaliado, para diferentes números de Da . As exceções foram os casos extremos de Da , onde as velocidades de injeção são muito altas ou muito baixas. Nesse sentido, fica claro que a mudança no padrão de dissolução devido ao efeito reológico é diferente para cada regime de dissolução, ou seja, para cada Da . Os casos que modelam ácidos divergentes mostraram uma capacidade desses fluidos de tratar regiões não-preferenciais nos *plugs*, apesar deste efeito não ser garantido. Ainda, o efeito do pH levou a padrões de dissolução mais ramificados e com maior PVBt, com aumento de até 67% para o caso $Da = 100$ e $n = 0.5$. Pelos resultados, é possível concluir que apenas o índice de comportamento do modelo *power-law* é suficiente para impactar o processo e que valores menores de n tendem a fornecer um PVBt mais baixo, enquanto o oposto também é verdade e valores maiores de n tendem a fornecer valores maiores de PVBt. Para os ácidos divergentes, a curva de queda de pressão também mostrou um comportamento não-monotônico, o que é esperado devido à redução local de mobilidade causada por estes ácidos.

Os resultados de poro para o banco de dados com geometrias cilíndrica e convergente-divergente mostraram que a força de resistência no poro aumenta com o aumento do nível de extensão, o que é esperado. O expoente do modelo de Carreau é mais relevante para os casos com níveis de extensão maior. O banco de dados mostrou boa validação nos casos em que há solução analítica, como fluido newtoniano e *power-law* em geometria cilíndrica. Para os casos Carreau, a comparação do modelo de poro numérico e o analítico proposto mostrou boa concordância na maioria dos casos, exceto para altos valores de Da . O resultado mostra uma limitação do modelo analítico para o fluido Carreau, que não é capaz de cobrir a região de transição da viscosidade a baixas taxas de deformação para taxas de deformação intermediárias. A redução do expoente do modelo Carreau tende a fornecer valores mais baixos de PVBt, o que também foi observado nos resultados *power-law*. O nível de extensão também foi relevante para avaliar a pressão necessária para manter a vazão constante no *plug*. Uma queda de pressão significativamente maior foi necessária para os casos com poro extensional, principalmente nos casos com maior nível de extensão. Nos padrões de dissolução, comparando os casos com e sem extensão, foi observado um aumento no número de ramificações. Em alguns casos, a região preferencial de

permeabilidade do *plug* é impactada.

Os resultados para os casos com heterogeneidade intra-REV mostraram que a queda de pressão necessária para manter a vazão no *plug* tende a ser menor quando a distribuição não-uniforme de poros é considerada. Ainda, quanto maior o desvio padrão, menor a queda de pressão. Isso se deve a presença de poros maiores, que fornecem uma maior mobilidade para o fluido, em detrimento dos poros menores. Do ponto de vista adimensional, os resultados de queda de pressão mostraram que a dependência é apenas em função da distribuição. A razão da mobilidade do caso com distribuição não-uniforme e do caso com distribuição uniforme equivalente foi avaliada para diferentes valores do índice de comportamento *power-law*. A análise da viscosidade aparente mostrou uma discrepância com a viscosidade aparente obtida através da equação de Darcy, o que é previsto pela literatura. A viscosidade aparente tende a ser menor com uma distribuição não-uniforme e diminui com o aumento do desvio padrão.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Para trabalhos futuros, diversas sugestões são dadas para o aprimoramento do modelo de duas escalas: o aumento do banco de dados para outros modelos de fluidos como os viscoplásticos, que não foram explorados na tese, além de casos de fluidos viscoelásticos em geometria não-cilíndrica, onde é esperado que a característica não-extensional do escoamento impacte de maneira diferente na mobilidade destes fluidos. Esse avanço permite compreender melhor o comportamento de fluidos reais no problema de acidificação e os impactos da simplificação usual que é feita neste tipo de problema considerando fluido newtoniano; A proposta e análise de novas geometrias de poro; A quantificação da tortuosidade, principalmente nos casos com heterogeneidade intra-REV; A proposta de um modelo de coalescência de poros, de forma que as hipóteses de distribuição não-uniforme de poros sejam aplicadas no problema de acidificação.

Referências Bibliográficas

- [1] MCDUFF, D., SHUCHART, C. E., JACKSON, S., et al. “Understanding wormholes in carbonates: Unprecedented experimental scale and 3-D visualization”. In: *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers, 2010.
- [2] NASR-EL-DIN, H. A., CHESSON, J. B., CAWIEZEL, K. E., et al. “Lessons Learned and Guidelines for Matrix Acidizing with Viscoelastic Surfactant Diversion in Carbonate Formations”. In: *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Society of Petroleum Engineers, 2006.
- [3] WHITAKER, S. “The Forchheimer Equation: A Theoretical Development”, *Transport in Porous Media*, v. 25, pp. 27–61, 1996.
- [4] SAMPAIO, R., GAMA, R. “Relações Constitutivas para Escoamentos de Fluidos Não Newtonianos Através de Meios Porosos Saturados.” *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences.*, v. 7, pp. 267–280, 1985.
- [5] VENTURA, V. F. “Análise do Termo de Interação Entre o Fluido e o Meio Poroso Obtido em Teoria de Mistura Utilizando uma Idealização Não Viscométrica do Meio Poroso”. 2018.
- [6] PANGA, M. K., ZIAUDDIN, M., BALAKOTAIAH, V. “Two-scale continuum model for simulation of wormholes in carbonate acidization”, *AIChE journal*, v. 51, n. 12, pp. 3231–3248, 2005.
- [7] OKABE, H., BLUNT, M. J. “Pore space reconstruction of vuggy carbonates using microtomography and multiple-point statistics”, *Water Resources Research*, v. 43, n. 12, 2007.
- [8] LIU, E., PAYNE, M. A., XU, S., et al. “Carbonate Rock Physics Issues”. In: *International Petroleum Technology Conference*. International Petroleum Technology Conference, 2009.
- [9] WILLIAMS, B., NIERODE, D., OTHERS. “Design of acid fracturing treatments”, *Journal of Petroleum Technology*, v. 24, n. 07, pp. 849–859, 1972.

- [10] FERNANDES, P. D., OTHERS. “Modelagem semi-analítica pseudo tridimensional de propagação e fechamento de fraturas induzidas em rochas”, 1998.
- [11] CROWE, C., HUTCHINSON, B., TRITTIPO, B., et al. “Fluid-loss control: the key to successful acid fracturing”, *SPE Production Engineering*, v. 4, n. 02, pp. 215–220, 1989.
- [12] AL-ANAZI, H., NASR-EL-DIN, H., MOHAMED, S. “Stimulation of tight carbonate reservoirs using acid-in-diesel emulsions: field application. SPE formation damage control conference”, *Society of Petroleum Engineers*, 1998.
- [13] PANGA, M. K., ZIAUDDIN, M., BALAKOTAIAH, V. “Two-scale continuum model for simulation of wormholes in carbonate acidization”, *AIChE journal*, v. 51, n. 12, pp. 3231–3248, 2005.
- [14] BUIJSE, M. A., OTHERS. “Understanding wormholing mechanisms can improve acid treatments in carbonate formations”. In: *SPE European Formation Damage Conference*. Society of Petroleum Engineers, 1997.
- [15] DACCORD, G., TOUBOUL, E., LENORMAND, R. “Carbonate acidizing: toward a quantitative model of the wormholing phenomenon”, *SPE production engineering*, v. 4, n. 01, pp. 63–68, 1989.
- [16] FREDD, C. N., FOGLER, H. S. “Influence of transport and reaction on wormhole formation in porous media”, *AIChE journal*, v. 44, n. 9, pp. 1933–1949, 1998.
- [17] MAHESHWARI, P., BALAKOTAIAH, V., OTHERS. “Comparison of carbonate HCl acidizing experiments with 3D simulations”, *SPE Production & Operations*, v. 28, n. 04, pp. 402–413, 2013.
- [18] IZGEC, O., ZHU, D., HILL, A. D. “Numerical and experimental investigation of acid wormholing during acidization of vuggy carbonate rocks”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 74, n. 1-2, pp. 51–66, 2010.
- [19] LIU, P., XUE, H., ZHAO, L., et al. “Simulation of 3D multi-scale wormhole propagation in carbonates considering correlation spatial distribution of petrophysical properties”, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, v. 32, pp. 81–94, 2016.
- [20] SOULAIN, C., ROMAN, S., KOVSCEK, A., et al. “Mineral dissolution and wormholing from a pore-scale perspective”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 827, pp. 457–483, 2017.

- [21] LIU, P., YAO, J., COUPLES, G. D., et al. “Modeling and simulation of wormhole formation during acidization of fractured carbonate rocks”, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 154, pp. 284–301, 2017.
- [22] QI, N., CHEN, G., LIANG, C., et al. “Numerical simulation and analysis of the influence of fracture geometry on wormhole propagation in carbonate reservoirs”, *Chemical Engineering Science*, v. 198, pp. 124–143, 2019.
- [23] QI, N., CHEN, G., PAN, L., et al. “Numerical simulation and analysis of fracture etching morphology during acid fracturing of dolomite reservoirs”, *Chemical Engineering Science*, v. 229, pp. 116028, 2021.
- [24] LYNN, J. D., NASR-EL-DIN, H., OTHERS. “A core based comparison of the reaction characteristics of emulsified and in-situ gelled acids in low permeability, high temperature, gas bearing carbonates”. In: *SPE International Symposium on Oilfield Chemistry*. Society of Petroleum Engineers, 2001.
- [25] NASR-EL-DIN, H., TAYLOR, K., AL-HAJJI, H., et al. “Propagation of Cross-linkers Used in In-Situ Gelled Acids in Carbonate Reservoirs”. In: *SPE/DOE Improved Oil Recovery Symposium*. Society of Petroleum Engineers, 2002.
- [26] CHANG, F., QU, Q., FRENIER, W., et al. “A novel self-diverting-acid developed for matrix stimulation of carbonate reservoirs”. In: *SPE International Symposium on Oilfield Chemistry*. Society of Petroleum Engineers, 2001.
- [27] TAYLOR, D., KUMAR, P. S., FU, D., et al. “Viscoelastic surfactant based self-diverting acid for enhanced stimulation in carbonate reservoirs”. In: *SPE European Formation Damage Conference*. Society of Petroleum Engineers, 2003.
- [28] MAHESHWARI, P., MAXEY, J., BALAKOTAIAH, V., et al. “Reactive-dissolution modeling and experimental comparison of wormhole formation in carbonates with gelled and emulsified acids”, *SPE Production & Operations*, v. 31, n. 02, pp. 103–119, 2016.
- [29] PANGA, M. K., ZIAUDDIN, M., GANDIKOTA, R., et al. “A new model for predicting wormhole structure and formation in acid stimulation of carbonates”. In: *SPE International Symposium and Exhibition on Formation Damage Control*. Society of Petroleum Engineers, 2004.
- [30] WHITAKER, S. “The transport equations for multi-phase systems”, *Chemical Engineering Science*, v. 28, pp. 139–147, 1973.

- [31] GRAY, W. G. “A Derivation of the Equations For Multi-phase Transport”, *Chemical Engineering Science*, v. 30, pp. 229–233, 1975.
- [32] HOWES, F. A., WHITAKER, S. “The Spatial Averaging Theorem Revised”, *Chemical Engineering Science*, v. 40, pp. 1387–1392, 1985.
- [33] SLATTERY, J. C. “Flow of Viscoelastic Fluid Through Porous Media”, *AIChE Journal*, v. 13, pp. 1066–1071, 1967.
- [34] DE HARO, M. L., DEL RÍO, J. A., WHITAKER, S. “Flow of Maxwell Fluids in Porous Media”, *Transport in Porous Media*, v. 25, pp. 167–192, 1996.
- [35] ATKIN, R., CRAINE, R. “Continuum theories of mixtures. Basic theory a development”, *Quarterly J. Mech. Appl. Math.*, v. 29, pp. 209–244, 1976.
- [36] GURTIN, M. E. *An introduction to continuum mechanics*, v. 158. Academic press, 1982.
- [37] TAO, L., OTHERS. *Mechanics of mixtures*, v. 35. World scientific, 1995.
- [38] SLATTERY, J. C. *Advanced transport phenomena*. Cambridge University Press, 1999.
- [39] RAJAGOPAL, K. R., SRINIVASA, A. R. “A thermodynamic frame work for rate type fluid models”, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 88, n. 3, pp. 207–227, 2000.
- [40] SRINIVASAN, S., RAJAGOPAL, K. “A thermodynamic basis for the derivation of the Darcy, Forchheimer and Brinkman models for flows through porous media and their generalizations”, *International Journal of Non-Linear Mechanics*, v. 58, pp. 162–166, 2014.
- [41] MOTTA, A. B. G. “Formulação Teórico-Numérica de Acidificação de Meios Porosos de Reservatórios Petrolíferos com o Objetivo do Aumento de sua permeabilidade”. 2018.
- [42] BIRD, R. B., ARMSTRONG, R. C., HASSAGER, O. *Dynamics of polymeric liquids. Vol. 1: Fluid mechanics*. 1987.
- [43] SOCHI, T. “Flow of non-Newtonian fluids in porous media”, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, v. 48, n. 23, pp. 2437–2767, 2010.
- [44] CARMAN, P. C. “Permeability of saturated sands, soils and clays”, *The Journal of Agricultural Science*, v. 29, n. 2, pp. 262–273, 1939.

- [45] MARTINS-COSTA, M., ANGULO, J. A., DA COSTA MATTOS, H. “Modeling the connection between porosity and permeability: A mixture theory approach”, *Journal of Porous Media*, v. 20, pp. 389–403, 05 2017. doi: 10.1615/JPorMedia.v20.i5.20.
- [46] MAHESHWARI, P., RATNAKAR, R., KALIA, N., et al. “3-D simulation and analysis of reactive dissolution and wormhole formation in carbonate rocks”, *Chemical Engineering Science*, v. 90, pp. 258–274, 2013.
- [47] BALAKOTAIAH, V., WEST, D. H. “Shape normalization and analysis of the mass transfer controlled regime in catalytic monoliths”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 8, pp. 1269–1286, 2002.
- [48] FICK, A. “V. On liquid diffusion”, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, v. 10, n. 63, pp. 30–39, 1855.
- [49] RATNAKAR, R. R., KALIA, N., BALAKOTAIAH, V. “Modeling, analysis and simulation of wormhole formation in carbonate rocks with in situ cross-linked acids”, *Chemical Engineering Science*, v. 90, pp. 179–199, 2013.
- [50] CANNELLA, W., HUH, C., SERIGHT, R. “Prediction of xanthan rheology in porous media”. In: *SPE annual technical conference and exhibition*. OnePetro, 1988.
- [51] JASAK, H. “OpenFOAM: open source CFD in research and industry”, *International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering*, v. 1, n. 2, pp. 89–94, 2009.
- [52] MAGEE, J., BUIJSE, M., PONGRATZ, R., et al. “Method for effective fluid diversion when performing a matrix acid stimulation in carbonate formations”. In: *Middle East Oil Show and Conference*. Society of Petroleum Engineers, 1997.
- [53] FLETCHER, A., FLEW, S., LAMB, S., et al. “Measurements of polysaccharide polymer properties in porous media”. In: *SPE International Symposium on Oilfield Chemistry*. OnePetro, 1991.

Apêndice A

Desenvolvimentos Complementares

No apêndice estão inclusos alguns desenvolvimentos matemáticos que complementam o conteúdo apresentado na Tese.

A.1 O problema do fechamento da Teoria de Média Volumétrica

Para exemplificar a metodologia, será analisado o exemplo supracitado. A condição de não deslizamento nas interfaces exercerá uma papel crucial no fechamento do problema [3]. Na Equação A.1, pode ser visto que a velocidade média intrínseca avaliada em S é um termo fonte no problema microscópico e a flutuação possui a mesma ordem de grandeza do valor médio.

$$\mathbf{v}_\beta = 0 \rightarrow \mathbf{v}'_\beta = -\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \text{ em } S \rightarrow O(\mathbf{v}'_\beta) = O(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta). \quad (\text{A.1})$$

Como pode ser visto na Figura A.1, nas entradas $(\partial\mathcal{V}_\beta - S)$, não há informação sobre os campos, então a função \mathbf{g} é definida como condição de contorno, e esta também representa um termo fonte do problema conforme Equação A.2.

$$\mathbf{v}'_\beta = -\mathbf{g}(t, \mathbf{x}) \text{ em } \partial\mathcal{V}_\beta - S \quad (\text{A.2})$$

Para se obter as equações de transporte microscópicas, é necessário subtrair as equações originais das equações médias. O balanço de massa microscópico é

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}'_\beta) = 0 \quad (\text{A.3})$$

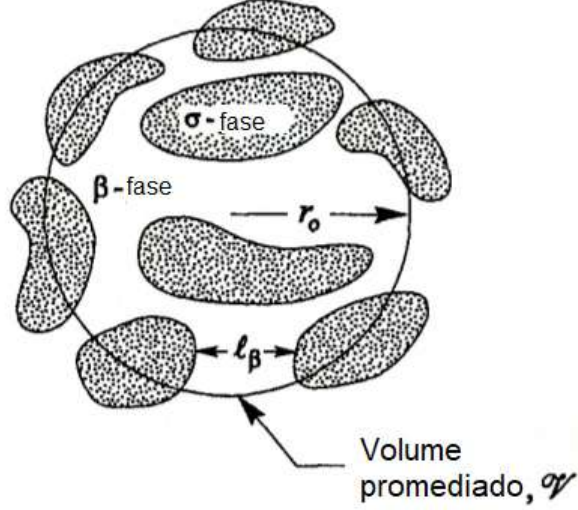


Figura A.1: O problema microscópico. Adaptado de [3].

e a quantidade de movimento linear

$$\begin{aligned} \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot ((\mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta)) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot ((\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta)) - \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta) = \\ -\nabla p'_\beta + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-p'_\beta \mathbf{I} + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta)) dA \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Usando o fato do escoamento ser incompressível,

$$\begin{aligned} \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \mathbf{v}'_\beta \cdot \mathbf{v}_\beta + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \mathbf{v}'_\beta - \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta) = \\ -\nabla p'_\beta + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-p'_\beta \mathbf{I} + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta)) dA \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

e aplicando análise de escalas,

$$O(\nabla \mathbf{v}'_\beta) = O\left(\frac{\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}{\ell_\beta}\right) \quad (\text{A.6a})$$

$$O(\nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) = O\left(\frac{\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta}{L}\right) \quad (\text{A.6b})$$

onde $L \gg \ell_\beta$, então

$$O(\nabla \mathbf{v}'_\beta \cdot \mathbf{v}_\beta) = O\left(\frac{(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)^2}{\ell_\beta}\right) \gg O(\nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \mathbf{v}'_\beta) = O\left(\frac{(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)^2}{L}\right) \quad (\text{A.7})$$

$$\langle \mathbf{v}_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta \rangle = \epsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \epsilon_\beta \langle \mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.8})$$

$$\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \otimes \mathbf{v}_\beta \rangle) = \nabla \cdot ((\epsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) + \nabla \cdot ((\epsilon_\beta \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle \otimes \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta)) \quad (\text{A.9})$$

$$O(\nabla \cdot ((\epsilon_\beta \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle \otimes \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta))) = O(\nabla \cdot ((\epsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta))) \quad (\text{A.10})$$

$$O(\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta)) = O(\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)), \quad (\text{A.11})$$

$$O(\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta)) = O(\nabla \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) = O\left(\frac{(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)^2}{L}\right) \quad (\text{A.12})$$

$$O(\nabla \mathbf{v}'_\beta \cdot \mathbf{v}_\beta) = O\left(\frac{(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)^2}{\ell_\beta}\right) \gg O(\nabla \cdot (\langle \mathbf{v}'_\beta \otimes \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta)) = O\left(\frac{(\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)^2}{L}\right) \quad (\text{A.13})$$

então a equação da flutuação de momento pode ser simplificada

$$\langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \mathbf{v}'_\beta \cdot \mathbf{v}_\beta = -\nabla p'_\beta + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-p'_\beta \mathbf{I} + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta)) dA \quad (\text{A.14})$$

O problema de valor de contorno microscópico é

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\mathbf{v}'_\beta) = 0, \\ \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \mathbf{v}'_\beta \cdot \mathbf{v}_\beta = -\nabla p'_\beta + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-p'_\beta \mathbf{I} + \mu \nabla^2(\mathbf{v}'_\beta)) dA, \\ (\text{C.C.1}) \mathbf{v}'_\beta = -\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \text{ em } S, \\ (\text{C.C.2}) \mathbf{v}'_\beta = -\mathbf{g}(t, \mathbf{x}) \text{ em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{v}'_\beta \rangle^\beta = 0 \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

Para lidar com (C.C.2) na A.15, [3] cria uma região microscópica representativa do problema onde em $\partial \mathcal{V}_\beta - S$ a condição de contorno é periódica. Na A.1, observa-se que esta região possui a menor escala, $O(\ell_\beta)$. E, como $\ell_\beta \ll r_o$, então o erro associado a esta aproximação será pequeno também. Então o problema microscópico

representativo torna-se,

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{v}'_\beta) = \mathbf{0}, \\ \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \mathbf{v}'_\beta \cdot \mathbf{v}_\beta = -\nabla p'_\beta + \mu \nabla^2 (\mathbf{v}'_\beta) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-p'_\beta \mathbf{I} + \mu \nabla^2 (\mathbf{v}'_\beta)) dA, \\ \text{(C.C.1) } \mathbf{v}'_\beta = -\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \text{ em } S, \\ \text{(C.C.2) } \mathbf{v}'_\beta \text{ e } p'_\beta \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{v}' \rangle^\beta = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (\text{A.16})$$

Variáveis de fechamento

Dado que há apenas um termo fonte no problema de condição de contorno, A.16, [3] propõe uma solução usando um mapeamento linear entre os campos microscópicos e médios,

$$\mathbf{v}'_\beta = \mathbf{M} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \mathbf{u} \quad (\text{A.17a})$$

$$p'_\beta = \mu \mathbf{m} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \xi \quad (\text{A.17b})$$

onde \mathbf{M} e \mathbf{m} podem ser definidos de qualquer forma que se desejar. O autor propõe o seguinte fechamento,

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{M}) = \mathbf{0}, \\ \nabla \mathbf{M} \cdot \frac{\langle \rho \rangle^\beta \mathbf{v}}{\mu} = -\nabla \mathbf{m} + \mu \nabla^2 (\mathbf{M}) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{m} \otimes \mathbf{I} + \nabla \mathbf{M}) dA, \\ \text{(C.C.1) } \mathbf{M} = -\mathbf{I} \text{ em } S, \\ \text{(C.C.2) } \mathbf{M} \text{ e } \mathbf{m} \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{M} \rangle^\beta = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (\text{A.18})$$

Para lidar com \mathbf{u} e ξ , é necessário que se subtraia as Equações (A.16) das Equações (A.18),

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{u}) = \mathbf{0}, \\ \nabla \mathbf{u} \cdot \frac{\langle \rho \rangle^\beta \mathbf{v}}{\mu} = -\nabla \xi + \nabla^2 (\mathbf{u}) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\xi \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) dA, \\ \text{(C.C.1) } \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ em } S, \\ \text{(C.C.2) } \xi \text{ e } \mathbf{u} \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{u} \rangle^\beta = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (\text{A.19})$$

Whitaker [3] prova que \mathbf{u} é nulo calculando a média do produto escalar entre a

segunda equação e \mathbf{u} ,

$$\int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{u} \cdot \left(\nabla \mathbf{u} \cdot \frac{\langle \rho_\beta \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta}{\mu} \right) d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{u} \cdot \nabla \xi d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{u} \cdot \nabla^2(\mathbf{u}) d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{u} \cdot \left(\frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\xi \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) dA \right) d\mathcal{V} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2} \frac{\langle \rho_\beta \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta}{\mu} \right) d\mathcal{V} = & - \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \cdot ((\xi \mathbf{u})) d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \mathbf{u}^T : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V} - \\ & \underbrace{\int_{\mathcal{V}_\beta} \mathbf{u} d\mathcal{V}}_{\langle \mathbf{u} \rangle^\beta = \mathbf{0}} \cdot \left(\frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\xi \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}) dA \right) \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

$$\int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2} \frac{\langle \rho_\beta \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta}{\mu} \right) d\mathcal{V} = - \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \cdot ((\xi \mathbf{u})) d\mathcal{V} + \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} d\mathcal{V} - \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \mathbf{u}^T : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V} \quad (\text{A.22})$$

usando a condição de não escorregamento,

$$\int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \mathbf{u}^T : \nabla \mathbf{u} d\mathcal{V} = 0 \quad (\text{A.23})$$

$$\nabla \mathbf{u} = \mathbf{0} \rightarrow \mathbf{u} = \text{constante} \quad (\text{A.24})$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (\text{A.25})$$

Substituindo esta equação na segunda equação das Eqs. (A.18),

$$\nabla \xi = - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\xi \mathbf{I}) dA \quad (\text{A.26})$$

$$\nabla \xi = \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_{\mathcal{V}_\beta} \nabla \xi d\mathcal{V} \rightarrow \nabla \xi = \mathbf{c}_1 \rightarrow \xi = \mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{x} + c_2 \quad (\text{A.27})$$

A condição de periodicidade implica em $\mathbf{c}_1 = \mathbf{0}$. Logo,

$$\xi = c_2. \quad (\text{A.28})$$

Como ξ é constante, este não passa pelo filtro de superfície, então o mapeamento pode ser reescrito da seguinte forma

$$\mathbf{v}'_\beta = \mathbf{M} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.29a})$$

$$p'_\beta = \mu \mathbf{m} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.29b})$$

As equações macroscópicas então podem ser reescritas da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot ((\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \langle \mathbf{M}^T \otimes \mathbf{M} \rangle^\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) = \\ -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \mu \nabla^2 (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{b} \rangle^\beta + \\ \mu \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \left(\int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{m} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{M}) dA \right) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Decomposição das variáveis de fechamento

Whitaker [3] decompõe as variáveis de fechamento para obter a lei de Darcy, usando o tensor permeabilidade que depende da topologia do meio poroso, e a segunda parte leva ao termo de correção inercial de Forcheimer.

$$\mathbf{v}'_\beta = \mathbf{B} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \mathbf{C} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.31a})$$

$$p'_\beta = \mu \mathbf{b} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \mu \mathbf{c} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.31b})$$

Esta decomposição implica em dois problemas de fechamento distintos,

• PROBLEMA 1

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{B}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} = -\nabla \mathbf{b} + \nabla^2 (\mathbf{B}) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{b} \otimes \mathbf{I} + \nabla \mathbf{B}) dA, \\ (\text{C.C.1}) \mathbf{B} = -\mathbf{I} \text{ em } S, \\ (\text{C.C.2}) \mathbf{B} \text{ e } \mathbf{b} \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{B} \rangle^\beta = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (\text{A.32})$$

• PROBLEMA 2

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{C}) = \mathbf{0}, \\ \underbrace{\nabla \mathbf{B} \cdot \frac{\langle \rho_\beta \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta}{\mu}}_{\text{source}} + \nabla \mathbf{C} \cdot \frac{\langle \rho \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta}{\mu} = -\nabla \mathbf{c} + \nabla^2 (\mathbf{C}) - \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{c} \otimes \mathbf{I} + \nabla \mathbf{C}) dA, \\ (\text{C.C.1}) \mathbf{C} = -\mathbf{I} \text{ em } S, \\ (\text{C.C.2}) \mathbf{C} \text{ e } \mathbf{c} \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{C} \rangle^\beta = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (\text{A.33})$$

A equação macroscópica fechada pode ser reescrita como,

$$\begin{aligned}
\langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot ((\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot ((\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \langle \mathbf{M}^T \otimes \mathbf{M} \rangle^\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) = \\
-\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \mu \nabla^2 (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{b} \rangle^\beta + \\
\mu \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \left(\int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{b} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{B}) dA \right) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta + \\
\mu \frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \left(\int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{c} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{C}) dA \right) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta
\end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Definindo, respectivamente, os tensores permeabilidade e correção de Forchheimer,

$$\frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \left(\int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{b} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{B}) dA \right) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \triangleq -\epsilon \mathbf{K}^{-1} \quad (\text{A.35a})$$

$$\frac{\epsilon_\beta^{-1}}{\mathcal{V}} \left(\int_S \hat{\mathbf{n}}_s \cdot (-\mathbf{c} \otimes \mathbf{I} + \mathbf{C}) dA \right) \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \triangleq -\epsilon_\beta \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{F} \quad (\text{A.35b})$$

a Equação A.34 pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot ((\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \otimes \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \nabla \cdot ((\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \cdot \langle \mathbf{M}^T \otimes \mathbf{M} \rangle^\beta \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)) = \\
-\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \mu \nabla^2 (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{b} \rangle^\beta - \mu \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \mu \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle
\end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

por análise dimensional, a equação pode ser simplificada,

$$0 = -\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta + \mu \nabla^2 (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta) + \langle \rho_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{b} \rangle^\beta - \mu \mathbf{K}^{-1} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle - \mu \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle \quad (\text{A.37})$$

isto resulta na equação de Forchheimer com a correção da difusão de Brinkman,

$$\langle \mathbf{v}_\beta \rangle = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \left(\nabla \langle p_\beta \rangle^\beta - \langle \rho_\beta \rangle^\beta \langle \mathbf{b} \rangle^\beta - \underbrace{\mu \nabla^2 (\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta)}_{\text{Brinkman}} \right) - \underbrace{\mathbf{F} \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \rangle}_{\text{Fochheimer}} \quad (\text{A.38})$$

Os problemas de fechamento associados se tornam:

- PROBLEMA 1

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{B}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} = -\nabla \mathbf{b} + \nabla^2 (\mathbf{B}) + \epsilon \mathbf{K}^{-1}, \\ (\text{C.C.1}) \mathbf{B} = -\mathbf{I} \text{ em } S, \\ (\text{C.C.2}) \mathbf{B} \text{ e } \mathbf{b} \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{B} \rangle^\beta = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (\text{A.39})$$

• PROBLEMA 2

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{C}) = \mathbf{0}, \\ \underbrace{\nabla \mathbf{B} \cdot \frac{\langle \rho_\beta \rangle^\beta \mathbf{v}}{\mu}}_{\text{source}} + \nabla \mathbf{C} \cdot \frac{\langle \rho \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta}{\mu} = -\nabla \mathbf{c} + \mu \nabla^2 (\mathbf{C}) + \epsilon \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{F}, \\ \text{(B.C.1) } \mathbf{C} = -\mathbf{I} \text{ em } S, \\ \text{(B.C.2) } \mathbf{C} \text{ e } \mathbf{c} \text{ periódica em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{C} \rangle^\beta = \mathbf{0} \end{array} \right. \quad (\text{A.40})$$

Resolvendo os problemas microscópicos de fechamento, é possível se obter \mathbf{K} e \mathbf{F} . Também é possível aplicar mudanças de variável para tornar o cálculo de \mathbf{K} e \mathbf{F} numericamente mais fácil,

• PROBLEMA 1

$$\mathbf{d} \triangleq \epsilon_\beta^{-1} \mathbf{b} \cdot \mathbf{K} \quad (\text{A.41a})$$

$$\mathbf{D} \triangleq \epsilon_\beta^{-1} (\mathbf{B} + \mathbf{I}) \cdot \mathbf{K} \quad (\text{A.41b})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{D}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{0} = -\nabla \mathbf{d} + \nabla^2 (\mathbf{D}) + \mathbf{I}, \\ \text{(C.C.1) } \mathbf{D} = -\mathbf{I} \text{ em } S, \\ \text{(C.C.2) } \mathbf{D} \text{ e } \mathbf{d} \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{D} \rangle^\beta = \epsilon_\beta^{-1} \mathbf{K} \end{array} \right. \quad (\text{A.42})$$

• PROBLEMA 2

$$\mathbf{H}^{-1} \triangleq \mathbf{K}^{-1} \cdot (\mathbf{I} + \mathbf{F}) \quad (\text{A.43a})$$

$$\mathbf{m}_0 \triangleq \epsilon_\beta^{-1} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H} \quad (\text{A.43b})$$

$$\mathbf{M}_0 \triangleq \epsilon_\beta^{-1} (\mathbf{M} + \mathbf{I}) \cdot \mathbf{H} \quad (\text{A.43c})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{M}_0) = \mathbf{0}, \\ \nabla \mathbf{M}_0 \cdot \frac{\langle \rho_\beta \rangle^\beta \mathbf{v}_\beta}{\mu} = -\nabla \mathbf{m}_0 + \nabla^2 (\mathbf{M}_0) + \mathbf{I}, \\ \text{(C.C.1) } \mathbf{M}_0 = -\mathbf{I} \text{ em } S, \\ \text{(C.C.2) } \mathbf{M}_0 \text{ e } \mathbf{d} \text{ periódico em } \partial \mathcal{V}_\beta - S, \\ \langle \mathbf{M}_0 \rangle^\beta = \epsilon_\beta^{-1} \mathbf{H} \end{array} \right. \quad (\text{A.44})$$

A.2 Promediação da Equação Constitutiva para Modelo Oldroyd-B

O operador média volumétrica também pode ser aplicado diretamente na equação constitutiva de um fluido viscoelástico. Aqui, será aplicada ao modelo de Oldroyd-B.

A equação de tensão que descreve o modelo Oldroyd-B é dada por:

$$\boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = 2\eta_0 \left(\mathbf{D} + \lambda_2 \overset{\nabla}{\mathbf{D}} \right) \quad (\text{A.45})$$

onde o símbolo subscrito $\overset{\nabla}{}$ denota a derivada convectada superior:

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{T} - \nabla \mathbf{v}^T \cdot \mathbf{T} - \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{v} \quad (\text{A.46})$$

Aplicando o operador média volumétrica:

$$\langle \boldsymbol{\tau} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \rangle = \eta_0 \left[(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T) + \lambda_2 (\overset{\nabla}{\nabla} \mathbf{v} + \overset{\nabla}{\nabla} \mathbf{v}^T) \right] \quad (\text{A.47})$$

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle + \langle \lambda_1 \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \rangle = \eta_0 \langle \nabla \mathbf{v} \rangle + \eta_0 \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle + \eta_0 \lambda_2 \langle \overset{\nabla}{\nabla} \mathbf{v} \rangle + \eta_0 \lambda_2 \langle \overset{\nabla}{\nabla} \mathbf{v}^T \rangle \quad (\text{A.48})$$

Primeiro, será obtida a média do tensor $\boldsymbol{\tau}$ com a aplicação da derivada convectada superior:

$$\langle \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \rangle = \left\langle \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} \right\rangle + \langle \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle - \langle \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\tau} \rangle - \langle \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{v} \rangle \quad (\text{A.49})$$

Aplicando a propriedade da média da derivada temporal no primeiro termo do lado direito da equação:

$$\begin{aligned} \langle \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} \rangle &= \left(\frac{\partial \langle \boldsymbol{\tau} \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{n} \cdot (\boldsymbol{\tau} \otimes \mathbf{w}) dA \right) + \\ &+ \langle \mathbf{v} \cdot \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle - \langle \nabla \mathbf{v}^T \cdot \boldsymbol{\tau} \rangle - \langle \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{v} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Utilizando a propriedade da média do produto:

$$\begin{aligned} \langle \nabla \tau \rangle &= \left(\frac{\partial \langle \tau \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{n} \cdot (\tau \otimes \mathbf{w}) dA \right) + \\ &(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \langle \nabla \tau \rangle^\beta + \varepsilon \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \tau' \rangle^\beta) - (\varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta \cdot \langle \tau \rangle^\beta + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \tau' \rangle^\beta) + \\ &- (\varepsilon \langle \tau \rangle^\beta \cdot \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta + \varepsilon \langle \tau' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta) \end{aligned} \quad (\text{A.51})$$

Aplicando o teorema de média volumétrica para derivada espacial:

$$\begin{aligned} \langle \nabla \tau \rangle &= \left(\frac{\partial \langle \tau \rangle}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{n} \cdot (\tau \otimes \mathbf{w}) dA \right) + \\ &\left[\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \tau \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \tau \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \tau' \rangle^\beta \right] + \\ &- \left[\varepsilon \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right) \cdot \langle \tau \rangle^\beta + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \tau' \rangle^\beta \right] + \\ &- \left[\varepsilon \langle \tau \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \tau' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right] \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

Substituindo a média superficial pela média intrínseca:

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle \nabla \tau \rangle^\beta &= \left(\frac{\partial \varepsilon \langle \tau \rangle^\beta}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{n} \cdot (\tau \otimes \mathbf{w}) dA \right) + \\ &\left[\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \tau \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \tau \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \tau' \rangle^\beta \right] + \\ &- \left[\varepsilon \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right) \cdot \langle \tau \rangle^\beta + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \tau' \rangle^\beta \right] + \\ &- \left[\varepsilon \langle \tau \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \tau' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right] \end{aligned} \quad (\text{A.53})$$

De forma análoga:

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta &= \left(\frac{\partial \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v} \otimes \mathbf{w}) dA \right) + \\ &\left[\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \nabla \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right] + \\ &- \left[\varepsilon \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right) \cdot \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right] + \\ &- \left[\varepsilon \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right] \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

onde, novamente pelo teorema de média volumétrica para derivada espacial:

$$\langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta = \left(\frac{\nabla(\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right) \quad (\text{A.55})$$

De forma análoga:

$$\begin{aligned}
\varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta &= \left(\frac{\partial \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta}{\partial t} - \frac{1}{\mathcal{V}} \int_S \mathbf{n} \cdot (\nabla \mathbf{v}^T \otimes \mathbf{w}) dA \right) + \\
&\left[\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla (\varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \nabla \mathbf{v}^T \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \nabla \mathbf{v}^{T'} \rangle^\beta \right] + \\
&- \left[\varepsilon \left(\frac{\nabla (\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right) \cdot \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \nabla \mathbf{v}^{T'} \rangle^\beta \right] + \\
&- \left[\varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla (\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{v} \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right]
\end{aligned} \tag{A.56}$$

onde $\langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta = \left(\frac{\nabla (\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \mathbf{n} \otimes \mathbf{v} dA \right)$.

A condição de contorno de não-deslizamento deve ser satisfeita:

$$\begin{aligned}
\varepsilon \langle \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta &= \left(\frac{\partial \varepsilon \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta}{\partial t} \right) + \\
&\left[\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla (\varepsilon \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta)}{\varepsilon} + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \boldsymbol{\tau} \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}' \rangle^\beta \right] + \\
&- \left[\varepsilon \left(\frac{\nabla (\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\varepsilon} \right) \cdot \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \boldsymbol{\tau}' \rangle^\beta \right] + \\
&- \left[\varepsilon \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta \cdot \left(\frac{\nabla (\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)}{\varepsilon} \right) + \varepsilon \langle \boldsymbol{\tau}' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right]
\end{aligned} \tag{A.57}$$

Considerando que o meio poroso é homogêneo, $\nabla \varepsilon \approx 0$ e portanto:

$$\begin{aligned}
\varepsilon \langle \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta &= \left(\frac{\partial \varepsilon \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta}{\partial t} \right) + \\
&\left[\varepsilon \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \left(\nabla \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta + \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S \boldsymbol{\tau} \otimes \mathbf{n} dA \right) + \varepsilon \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}' \rangle^\beta \right] + \\
&- \left[\varepsilon \nabla (\langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T \cdot \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \boldsymbol{\tau}' \rangle^\beta \right] + \\
&- \left[\varepsilon \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \varepsilon \langle \boldsymbol{\tau}' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \right]
\end{aligned} \tag{A.58}$$

Reescrevendo a equação anterior:

$$\langle \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta = \left(\frac{\partial \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta}{\partial t} \right) + \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta - \nabla (\langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T \cdot \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta - \langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \langle \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle^* \tag{A.59}$$

onde:

$$\langle \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle^* = \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S ((\boldsymbol{\tau})^\beta + \boldsymbol{\tau}') \otimes \mathbf{n} dA + \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \boldsymbol{\tau}' \rangle^\beta - \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \boldsymbol{\tau}' \rangle^\beta - \langle \boldsymbol{\tau}' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \tag{A.60}$$

De forma análoga e pelo fato de que a condição de contorno de não deslizamento

é aplicada, $\langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta = \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta$:

$$\langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta = \left(\frac{\partial \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta}{\partial t} \right) + \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta - \nabla (\langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T \cdot \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta - \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^* \quad (\text{A.61})$$

sendo:

$$\langle \nabla \mathbf{v} \rangle^* = \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \nabla \mathbf{v}') \otimes \mathbf{n} dA + \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta - \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta - \langle \nabla \mathbf{v}' \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \quad (\text{A.62})$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta &= \varepsilon^{-1} \left(\frac{\partial \varepsilon (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T}{\partial t} \right) + \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \nabla (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T - \nabla (\langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T \cdot (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T - (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T \cdot \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \\ &+ \langle \mathbf{v} \rangle^\beta \cdot \frac{1}{\mathcal{V}_\beta} \int_S [(\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T + \nabla \mathbf{v}^{T'}] \otimes \mathbf{n} dA + \langle \mathbf{v}' \cdot \nabla \nabla \mathbf{v}^{T'} \rangle^\beta - \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \nabla \mathbf{v}^{T'} \rangle^\beta - \langle \nabla \mathbf{v}^{T'} \cdot \nabla \mathbf{v}' \rangle^\beta \end{aligned} \quad (\text{A.63})$$

A equação diferencial para a parte deviatórica do tensor das tensões pode ser escrita como:

$$\langle \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta + \lambda_1 \langle \nabla \boldsymbol{\tau} \rangle^\beta = \eta_0 \nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta + \eta_0 (\nabla \langle \mathbf{v} \rangle^\beta)^T + \eta_0 \lambda_2 \langle \nabla \mathbf{v} \rangle^\beta + \eta_0 \lambda_2 \langle \nabla \mathbf{v}^T \rangle^\beta \quad (\text{A.64})$$

A.3 Teoria Constitutiva - Taxa de Dissipação

Considerando uma mistura sólido-fluido, sem transferência de massa devido a reações químicas, o balanço de energia dado na 3.142 para cada constituinte é reduzido a [40]:

$$\rho_i \frac{Du_i}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_i + \mathbf{T}_i : \nabla \mathbf{v}_i + \rho_i Q_{e_i} + \psi_i \quad (\text{A.65})$$

onde $i = s, f$ e os subscritos s e f representam o constituinte sólido e fluido, respectivamente. Não há produção de energia na mistura como um todo, o que leva a:

$$(\psi_s + \psi_f) + (\mathbf{m}_s \cdot \mathbf{v}_s + \mathbf{m}_f \cdot \mathbf{v}_f) = 0 \quad (\text{A.66})$$

Considerando que os constituintes estão na mesma temperatura θ a cada instante de tempo e a cada posição, a 3.147 para uma mistura pode ser escrita como:

$$\rho_f \frac{Ds_f}{Dt} + \rho_s \frac{Ds_s}{Dt} + \nabla \cdot \left[\frac{\mathbf{q}_s + \mathbf{q}_f}{\theta} \right] - \left[\frac{\rho_s Q_{e_s} + \rho_f Q_{e_f}}{\theta} \right] = \dot{s} \geq 0 \quad (\text{A.67})$$

Definindo o potencial de Helmholtz a_i para os constituintes:

$$a_i = e_i - \theta s_i \quad (\text{A.68})$$

$$\frac{\partial a_i}{\partial \theta} = -s_i \quad (\text{A.69})$$

Substituindo as Equações A.68 e A.69 em A.67, evidenciando $\nabla \cdot \mathbf{q}_i$ na A.65 e usando o fato de que não há na mistura produção de energia, A.66, e de quantidade de movimento linear 3.117 tem-se:

$$\begin{aligned} \xi \equiv \theta \dot{s} = & \mathbf{T}_f : \nabla \mathbf{v}_f + \mathbf{T}_s : \nabla \mathbf{v}_s + \mathbf{m}_s \cdot \mathbf{v}_{rel} - \rho_f \left. \frac{Da_f}{Dt} \right|_{\theta} \\ & - \rho_s \left. \frac{Da_s}{Dt} \right|_{\theta} - \frac{\nabla(\theta) \cdot (\mathbf{q}_f + \mathbf{q}_s)}{\theta} \geq 0 \end{aligned} \quad (\text{A.70})$$

onde $\mathbf{v}_{rel} = \mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s$. Algumas hipóteses são feitas: a de que o sólido é rígido; apenas processos isotérmicos são considerados; o fluido é incompressível; efeitos transientes e inerciais são desprezados. Essas hipóteses simplificam a A.70 para:

$$\xi \equiv \theta \dot{s} = \mathbf{T}_f : \nabla \mathbf{v}_f + \mathbf{m}_s \cdot \mathbf{v}_{rel} - \rho_f \left. \frac{Da_f}{Dt} \right|_{\theta} - \rho_s \left. \frac{Da_s}{Dt} \right|_{\theta} \quad (\text{A.71})$$

Idealmente, é assumido que o potencial de Helmholtz num corpo rígido é constante. Porém, como a temperatura é assumida constante no problema, o potencial de Helmholtz da mistura é essencialmente o potencial de Helmholtz do fluido. Se o sólido fosse deformável, poderia ser atribuído a ele um potencial de Helmholtz.

Agora, serão usadas formas específicas para o potencial de Helmholtz do fluido e da taxa de dissipação da mistura, de forma que esta não seja negativa. É importante notar que a função é objetiva. Maximizando ξ com as limitações impostas pela A.71 e da hipótese de que o fluido é incompressível ($\nabla \cdot (\mathbf{v}_f) = \mathbf{D}_f : \mathbf{I} = 0$) e assumindo o potencial de Helmholtz $a_f = a_f(\theta^*)$ onde θ^* é uma temperatura constante:

$$\left. \frac{Da_f}{Dt} \right|_{\theta^*} = 0 \quad (\text{A.72})$$

$$\left. \frac{Da_s}{Dt} \right|_{\theta^*} = 0 \quad (\text{A.73})$$

O que simplifica a A.71 para:

$$\xi = \hat{\mathbf{T}} : \mathbf{D}_f + \mathbf{m}_f \cdot \mathbf{v}_f \geq 0 \quad (\text{A.74})$$

O objetivo é maximizar a função ξ com a limitação que o traço de \mathbf{D} é nulo com a limitação imposta pela A.74. Será aplicado o método dos multiplicadores de Lagrange. A função auxiliar é então construída:

$$\varepsilon(\mathbf{D}_f, \mathbf{v}_f) \equiv \xi + \lambda_1(\xi - \hat{\mathbf{T}} : \mathbf{D}_f - \mathbf{m}_f \cdot \mathbf{v}_f) + \lambda_2(\mathbf{D}_f : \mathbf{I}) \quad (\text{A.75})$$

As condições necessárias para um extremo são:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{D}_f} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{D}_f} + \lambda_1 \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{D}_f} - \lambda_1 \hat{\mathbf{T}} + \lambda_2 \mathbf{I} = \varepsilon_1 \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{D}_f} - \hat{\mathbf{T}} + \varepsilon_2 \mathbf{I} = 0 \quad (\text{A.76})$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{v}_f} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{v}_f} + \lambda_1 \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{v}_f} - \lambda_1 \mathbf{m}_f = \varepsilon_1 \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{v}_f} - \mathbf{m}_f = 0 \quad (\text{A.77})$$

onde $\varepsilon_1 = (1 + \lambda_1)/\lambda_1$ e $\varepsilon_2 = \lambda_2/\lambda_1$. Multiplicando a A.76 e A.77 por \mathbf{D} , \mathbf{v}_f respectivamente e somando chega-se em:

$$\varepsilon_1 \left[\frac{\partial \xi}{\partial \hat{\mathbf{T}}} : \hat{\mathbf{T}} + \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{v}_f} \cdot \mathbf{v}_f \right] - \xi = 0 \quad (\text{A.78})$$

Tomando o produto interno na A.76 com \mathbf{I} :

$$\varepsilon_2 = -\frac{\varepsilon_1}{3} \left[\frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{D}_f} : \mathbf{I} \right] = -\frac{\varepsilon_1}{3} \text{tr} \left[\frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{D}_f} \right] \quad (\text{A.79})$$

Inserindo a A.78 e A.79 em A.76 e A.77:

$$\hat{\mathbf{T}} = \varepsilon_1 \left[\frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{D}_f} \right]_{dev} \quad (\text{A.80})$$

$$\mathbf{m}_f = \varepsilon_1 \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{v}_f} \quad (\text{A.81})$$

$$\varepsilon_1 = \xi \left[\frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{D}_f} : \mathbf{D}_f + \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{v}_f} \cdot \mathbf{v}_f \right]^{-1} \quad (\text{A.82})$$

onde a notação *dev* indica a parte deviatórica do tensor. Ao fazer escolhas específicas para a taxa de dissipação ξ , diferentes modelos podem ser obtidos. A escolha de ξ deve ser então ditada pela física do problema.

Considerando uma forma funcional que considere a dissipação proveniente dos poros do sólido devido ao escoamento e a dissipação devido a efeitos viscosos na fase fluida, é proposto:

$$\xi(\mathbf{D}_f, \mathbf{v}_f) = \alpha(p, \hat{\mathbf{T}}, \mathbf{m}_f) \|\mathbf{v}_f\|^2 + 2\mu(p, \hat{\mathbf{T}}, \mathbf{m}_f) \|\mathbf{D}_f\|^2 \quad (\text{A.83})$$

onde $\alpha > 0$ e $\mu > 0$ são chamados de coeficiente de arrasto e viscosidade, respectivamente. Aplicando a A.83 na A.80 e A.81:

$$\hat{\mathbf{T}} = 2\mu(p, \hat{\mathbf{T}}, \mathbf{m}_f) \mathbf{D}_f \quad (\text{A.84})$$

$$\mathbf{m}_f = \alpha(p, \hat{\mathbf{T}}, \mathbf{m}_f) \mathbf{v}_f \quad (\text{A.85})$$

Serão consideradas e discutidas 4 escolhas possíveis para μ e α .

1. $\alpha = \alpha_0$ e $\mu = \mu_0$ onde α_0 e μ_0 são constantes positivas. Isto leva ao modelo tradicional de Brinkman:

$$\mathbf{T}_f = -p_f \mathbf{I} + 2\mu_0 \mathbf{D}_f \quad (\text{A.86})$$

$$\mathbf{m}_f = \alpha_0 \mathbf{v}_f \quad (\text{A.87})$$

E o balanço de quantidade de movimento linear se torna:

$$\alpha_0 \mathbf{v}_f + \nabla p_f - \nabla \cdot (2\mu_0 \mathbf{D}_f) = \rho_f \mathbf{b}_f \quad (\text{A.88})$$

2. $\alpha = \alpha(p_f) > 0$ e $\mu = \mu(p_f) > 0$, levando a uma generalização do modelo de Brinkman, onde tanto a viscosidade quanto o coeficiente de arrasto dependem da pressão. Neste caso, o balanço de Q.M.L. é:

$$\alpha(p_f) \mathbf{v}_f + \nabla p_f - \nabla \cdot (2\mu(p_f) \mathbf{D}_f) = \rho_f \mathbf{b}_f \quad (\text{A.89})$$

3. $\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 \|\mathbf{m}\|$ e $\mu = \mu_0$ onde α_0 , α_1 e μ_0 são constantes positivas, o que leva a:

$$\mathbf{m}_f = (\alpha_0 + \alpha_1 \|\mathbf{m}\|) \mathbf{v}_f \quad (\text{A.90})$$

Isto implica que:

$$\|\mathbf{m}_f\| = \frac{\alpha_0 \|\mathbf{v}_f\|}{1 - \alpha_1 \|\mathbf{v}_f\|} \quad (\text{A.91})$$

E $\alpha_1 \|\mathbf{v}_f\| < 1$. Usando a aproximação:

$$(1 - z)^{-1} \approx 1 + z \text{ quando } \|z\| < 1 \quad (\text{A.92})$$

E inserindo a A.91 na A.90, é obtida uma fórmula do tipo Forchheimer para o termo de interação:

$$\mathbf{m}_f \approx (\alpha_0 + \alpha_0 \alpha_1 \|\mathbf{v}_f\|) \mathbf{v}_f \quad (\text{A.93})$$

O balanço de quantidade de movimento linear é então:

$$-(\alpha_0 \alpha_1 \mathbf{v}_f + \alpha_0) \mathbf{v}_f + \nabla p_f - \nabla \cdot (2\mu_0 \mathbf{D}_f) = \rho_f \mathbf{b}_f \quad (\text{A.94})$$

4. Se a dissipação devido ao arrasto nos poros é muito maior que a dissipação

devido ao cisalhamento na fase fluida, então:

$$2\mu||\mathbf{D}_f||^2 \lll \alpha||\mathbf{v}_f||^2 \quad (\text{A.95})$$

Então a A.83 pode ser simplificada:

$$\xi(\mathbf{D}_f, \mathbf{v}_f) \approx \alpha||\mathbf{v}_f||^2 \quad (\text{A.96})$$

Mas da A.74:

$$\xi(\mathbf{D}_f, \mathbf{0}) = 0 = \hat{\mathbf{T}} : \mathbf{D}_f + \mathbf{m}_f \cdot \mathbf{0} = \hat{\mathbf{T}} : \mathbf{D}_f \quad (\text{A.97})$$

Portanto, da A.97 é possível notar que $\hat{\mathbf{T}}$ deve ser um múltiplo escalar do tensor identidade. Mas como $\hat{\mathbf{T}}$ é deviatórico, isto implica que $\hat{\mathbf{T}} = 0$. Então a A.74 é simplificada para:

$$\xi = \mathbf{m}_f \cdot \mathbf{v}_f \quad (\text{A.98})$$

A função ξ da A.98 sendo maximizada em relação a \mathbf{v}_f e com a A.98 como a limitação, obtém-se:

$$\mathbf{T}_f = -p_f \mathbf{I} \quad (\text{A.99})$$

$$\mathbf{m}_f = \alpha(p_f, \hat{\mathbf{T}}, \mathbf{m}_f) \mathbf{v}_f \quad (\text{A.100})$$

O que leva a equação governante:

$$\alpha \mathbf{v}_f + \nabla p_f = \rho_f \mathbf{b}_f \quad (\text{A.101})$$

O que é claramente uma generalização do modelo de Darcy. As várias escolhas para a função $\alpha(p_f, \hat{\mathbf{T}}, \mathbf{m}_f)$ levam a diferentes generalizações do modelo.

O termo de interação para um fluido *power-law* também pode obtido a partir da mesma técnica utilizada para a idealização do meio poroso [41]. Na teoria clássica, o tensor das tensões para um fluido newtoniano generalizado é dado por:

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\eta(\dot{\gamma})\mathbf{D} \quad (\text{A.102})$$

onde η é a função viscosidade e $\dot{\gamma}$ é a taxa de deformação, definida como:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{2tr(\mathbf{D}^2)} \quad (\text{A.103})$$

Se o fluido é *power-law*, a função viscosidade é definida por:

$$\eta = k\dot{\gamma}^{n-1} \quad (\text{A.104})$$

onde k é o índice de consistência e n é o expoente *power-law*, que dita a reposta do fluido de acordo com a taxa de deformação. Se $n < 1$, a viscosidade diminui com o aumento da taxa de deformação e o fluido é chamado *shear-thinning* ou pseudoplástico. Se $n > 1$, a viscosidade aumenta com a taxa de deformação e o fluido é chamado *shear-thickening* ou dilatante. Se $n = 1$ a viscosidade não varia com a taxa de deformação e o fluido é newtoniano.

Novamente, deseja-se obter o perfil de velocidade para este fluido entre placas paralelas, de forma a atender a idealização feita para o meio poroso. Utilizando as mesmas hipóteses da 3.2.3 para um fluido Newtoniano, a equação da conservação de quantidade de movimento é reduzida para:

$$\frac{dp}{dx} = \frac{d}{dy} \left[-k \left(\frac{du}{dy} \right)^{n-1} \frac{du}{dy} \right] = \frac{d}{dy} \left[-k \left(\frac{du}{dy} \right)^n \right] \quad (\text{A.105})$$

Integrando a A.105:

$$-k \left(\frac{du}{dy} \right)^n = \frac{dp}{dy} y + c_1 \quad (\text{A.106})$$

$$\frac{du}{dy} = \left[-\frac{1}{k} \left(\frac{dp}{dx} y \right) \right]^{\frac{1}{n}} \quad (\text{A.107})$$

onde $c_1 = 0$ pois o perfil de velocidade é simétrico. Integrando novamente:

$$u(y) = \left(-\frac{1}{k} \frac{dp}{dx} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) y^{\frac{1+n}{n}} + c_2 \quad (\text{A.108})$$

Da condição de contorno de não deslizamento ($u = 0$ em $y = \Delta/2$):

$$u(y) = \left(-\frac{1}{k} \frac{dp}{dx} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{n+1} \right) \left[y^{\frac{1+n}{n}} - \left(\frac{\Delta}{2} \right)^{\frac{1+n}{n}} \right] \quad (\text{A.109})$$

Obtendo a velocidade média:

$$\bar{v} = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} u(y) dy \quad (\text{A.110})$$

$$\bar{v} = \left(-\frac{1}{k} \frac{dp}{dx} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left(\frac{\Delta}{2} \right)^{\frac{n+1}{n}} \quad (\text{A.111})$$

A partir da relação dada pela 3.161 a A.111 pode ser reescrita como:

$$\bar{v} = \left(-\frac{1}{k} \frac{dp}{dx} \right)^{\frac{1}{n}} \left(\frac{n}{2n+1} \right) \left(\frac{3K}{\varepsilon} \right)^{\frac{n+1}{2n}} \quad (\text{A.112})$$

A força de interação sólido-fluido pode então ser obtida:

$$\varepsilon \frac{dp}{dx} = m_f = -\varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \bar{v}^n \quad (\text{A.113})$$

A A.113 pode ser extrapolada para:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \mathbf{v}_f^n \quad (\text{A.114})$$

De forma análoga ao caso newtoniano, o tensor parcial das tensões para o constituinte fluido pode ser escrito como:

$$\mathbf{T}_f = -\varepsilon p \mathbf{I} + 2\varepsilon \eta (\dot{\gamma}) \mathbf{D}_f \quad (\text{A.115})$$

A equação de conservação de massa é dada pela 3.173:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{v}_f) = 0 \quad (\text{A.116})$$

E o balanço de quantidade de movimento linear:

$$\begin{aligned} \varepsilon \rho \frac{D\mathbf{v}_f}{Dt} &= -\nabla(\varepsilon p) + \nabla \cdot [\varepsilon k (\mathbf{D}_f : \mathbf{D}_f)^{n-1} \mathbf{D}_f] \\ &\quad - \varepsilon k \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \mathbf{v}_f^n + \mathbf{b}_f \end{aligned} \quad (\text{A.117})$$

A.4 Caso Cartesiano com Distribuição de Poros

Nesse caso, o REV é idealizado de acordo com a Figura (A.2).

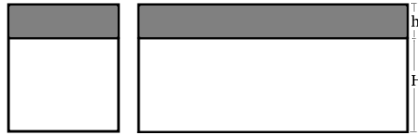


Figura A.2: Visão frontal e lateral do REV idealizado por um poro representativo constituído de placas planas paralelas.

A porosidade volumétrica é dada por:

$$\varepsilon = \frac{H}{H+h}. \quad (\text{A.118})$$

E a relação porosidade-permeabilidade:

$$\frac{K}{\varepsilon} = \frac{1}{3} \left(\frac{H}{2} \right)^2 \quad (\text{A.119})$$

O termo de interação escrito como função da permeabilidade é dado por

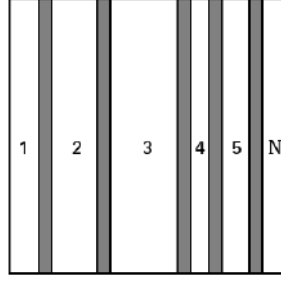


Figura A.3: Volume elementar representativo com uma distribuição não-uniforme de poros idealizados por placas paralelas.

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon \left(\frac{\varepsilon}{3K} \right)^{\frac{n+1}{2}} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \alpha |\mathbf{v}|^{n-1} \mathbf{v} \quad (\text{A.120})$$

E a mobilidade é escrita como

$$M = \frac{K}{\eta_c} \quad (\text{A.121})$$

Onde a viscosidade característica é:

$$\eta_c = \frac{1}{3} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \alpha \left(\frac{v}{\frac{H}{2}} \right)^{n-1} \quad (\text{A.122})$$

Considerando um REV feito de um arranjo de placas paralelas com diferentes larguras, como mostrado na Figura (A.3), o termo de interação é dado pela densidade volumétrica de força de arrasto nos poros, conforme enunciado pela Eq. (4.127).

O perfil de velocidade em regime permanente para um fluido *power-law* em um dado poro i em função da velocidade média v_m é dado por:

$$v = v_m \frac{2n+1}{n+1} \left[1 - \left(\frac{y}{H} \right)^{\frac{n+1}{n}} \right] \quad (\text{A.123})$$

A tensão na parede é:

$$\tau_w = -\eta(\dot{\gamma}) \left(\frac{dv}{dy} \right) \Big|_{y=R} \quad (\text{A.124})$$

A função viscosidade para um fluido *power-law* é dada por:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \alpha \left(\frac{dv}{dy} \right)^{n-1} \quad (\text{A.125})$$

Inserindo a Equação (A.125) na Eq. (A.124):

$$\tau_w = \alpha \left(\frac{dv}{dy} \right)^n \Big|_{y=H} \quad (\text{A.126})$$

$$\tau_w = -\alpha \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{v_m^n}{H^n} \quad (\text{A.127})$$

Para o caso cartesiano, a força na parede pode ser obtida da tensão na parede, relacionando a tensão com a área superficial de contato a_s :

$$f = \tau_w a_s = -\alpha \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{v_m^n}{H^n} wL \quad (\text{A.128})$$

A força obtida corresponde a um único poro i , com comprimento L e largura w .

$$f_i = -wL\alpha \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{v_{mi}^n}{H_i^n} \quad (\text{A.129})$$

Extrapolando a equação anterior para a forma vetorial:

$$\mathbf{f}_i = -wL\alpha \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n H_i^{-n} |\mathbf{v}_{fi}|^{n-1} \mathbf{v}_{fi} \quad (\text{A.130})$$

A força total no REV é:

$$\mathbf{f}_t = \sum_{i=1}^N f_i = -wL\alpha \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \sum_{i=1}^N H_i^{-n} |\mathbf{v}_{fi}|^{n-1} \mathbf{v}_{fi} \quad (\text{A.131})$$

O volume de um único poro i é:

$$V_i = wL(2H_i) \quad (\text{A.132})$$

O volume total de poros no REV é dado por:

$$V_{tp} = 2wL \sum_{i=1}^N H_i \quad (\text{A.133})$$

E o volume do REV:

$$V_{REV} = \frac{2wL}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N H_i \quad (\text{A.134})$$

Da Eq. (4.127), o termo de interação é dado por:

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon \frac{\alpha}{2} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N H_i^{-n} |\mathbf{v}_{fi}|^{n-1} \mathbf{v}_{fi}}{\sum_{i=1}^N H_i} \quad (\text{A.135})$$

O termo de interação também pode ser escrito em função da mobilidade, de acordo com Eq. (4.141). Comparando equações (A.135) e (4.141):

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{\alpha}{2\varepsilon} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N H_i^{-n} |\mathbf{v}_{fi}|^n}{\sum_{i=1}^N H_i |\mathbf{v}_m|} \mathbf{I} \quad (\text{A.136})$$

Quando o REV é modelado por um único poro representativo, o somatório se resume a um único termo, o que leva a

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon \frac{\alpha}{2H^{n+1}} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n |\mathbf{v}_f|^{n-1} \mathbf{v}_f \quad (\text{A.137})$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{\alpha}{2\varepsilon H^{n+1}} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n |\mathbf{v}_f|^n \mathbf{I} \quad (\text{A.138})$$

onde $\mathbf{v}_f = \mathbf{v}_m$. O termo de interação e o inverso da mobilidade calculada para um REV com um único poro são recuperados.

A velocidade média em um dado poro é:

$$v_{f_i} = H_i^{\frac{n+1}{n}} \frac{n}{2n+1} \left[-\frac{1}{\alpha} \left(\frac{dp}{dx} \right)_i \right]^{\frac{1}{n}} \quad (\text{A.139})$$

É assumida a hipótese de que o gradiente de pressão é o mesmo em cada poro. Então:

$$v_{f_i} = H_i^{\frac{n+1}{n}} \frac{n}{2n+1} \left[-\frac{1}{\alpha} \left(\frac{dp}{dx} \right) \right]^{\frac{1}{n}} \quad (\text{A.140})$$

A vazão total no REV é:

$$Q = v_m A_{total} = v_m \sum_{i=1}^N w H_i \quad (\text{A.141})$$

Ainda, a vazão no REV pode ser descrita como somatório de vazões em cada poro:

$$Q = \sum_{i=1}^N q_i = \sum_{i=1}^N w v_i H_i \quad (\text{A.142})$$

Comparando (A.141) and (A.142), a velocidade média no REV pode ser escrita como:

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^N v_i H_i}{\sum_{i=1}^N H_i} \quad (\text{A.143})$$

Inserindo (A.140) em (A.143):

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}}}{\sum_{i=1}^N H_i} \frac{n}{2n+1} \left[-\frac{1}{\alpha} \left(\frac{dp}{dx} \right) \right]^{\frac{1}{n}} \quad (\text{A.144})$$

Então, o gradiente de pressão é:

$$\frac{dp}{dx} = -\alpha \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N H_i}{\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}}} \right]^n v_m^n \quad (\text{A.145})$$

A velocidade em cada poro é então dada por:

$$v_{f_i} = H_i^{\frac{n+1}{n}} \frac{\sum_{i=1}^N H_i}{\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}}} v_m \quad (\text{A.146})$$

O termo de interação pode ser escrito na forma escalar como:

$$m_f = -\varepsilon \frac{\alpha}{2} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N H_i^{-n} v_{f_i}^n}{\sum_{i=1}^N H_i} \quad (\text{A.147})$$

Inserindo (A.146) em (A.147):

$$m_f = -\varepsilon \frac{\alpha}{2} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \frac{\sum_{i=1}^N H_i \left[\sum_{i=1}^N H_i \right]^n}{\sum_{i=1}^N H_i \left[\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}} \right]^n} v_m^n \quad (\text{A.148})$$

$$m_f = -\varepsilon \frac{\alpha}{2} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N H_i}{\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}}} \right]^n v_m^n \quad (\text{A.149})$$

Extrapolando Equação (A.149) para a forma vetorial:

$$m_f = -\varepsilon \frac{\alpha}{2} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N H_i}{\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}}} \right]^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{v}_m \quad (\text{A.150})$$

Então, o inverso do tensor mobilidade é:

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{\alpha}{2\varepsilon} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left[\frac{\sum_{i=1}^N H_i}{\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}}} \right]^n |\mathbf{v}_m|^{n-1} \mathbf{I} \quad (\text{A.151})$$

A razão de mobilidade do REV com distribuição de poro e a mobilidade do REV com um único poro representativo H é dada por:

$$f_M = \frac{\left(\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}} \right)^n}{\left(\sum_{i=1}^N H_i \right)^n H^{n+1}} \quad (\text{A.152})$$

Quando o REV é idealizado por um único poro representativo, a permeabilidade é dada pela Eq. (A.119). Então, para um poro com altura H_i , a permeabilidade é dada por:

$$K_i = \frac{\varepsilon}{12} H_i^2 \quad (\text{A.153})$$

Para uma distribuição de poros, a permeabilidade efetiva, K_{eff} pode ser expres-

sada por:

$$K_{eff} = \frac{\sum_{i=1}^N K_i H_i}{\sum_{i=1}^N H_i} = \frac{\varepsilon}{12} \frac{\sum_{i=1}^N H_i^3}{\sum_{i=1}^N H_i}. \quad (\text{A.154})$$

A viscosidade característica pode ser obtida através da relação geral,

$$\eta_c = K_{eff} M^{-1}, \quad (\text{A.155})$$

usando K_{eff} da Eq. (A.154) e M^{-1} da Eq. (A.151), levando a

$$\eta_c = \frac{\sum_{i=1}^N H_i^3 \left(\sum_{i=1}^N H_i \right)^{n-1}}{\left(\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}} \right)^n} H_m^{n-1} \frac{1}{24} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \alpha \left(\frac{v}{H_m} \right)^{n-1} \quad (\text{A.156})$$

onde H_m é o valor de altura médio, dado por:

$$H_m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H_i. \quad (\text{A.157})$$

Equação (A.157) preserva porosidade, a qual é proporcional a H e, portanto, é representativa para uma escala de poro característica. Então, a taxa de deformação característica pode ser computada por $\dot{\gamma}_c = (\eta_c/\alpha)^{1/(n-1)}$ como

$$\dot{\gamma}_c = \frac{\left(\sum_{i=1}^N H_i^3 \right)^{\frac{1}{n-1}} \sum_{i=1}^N H_i}{\left(\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}} \right)^{\frac{n}{n-1}}} H_m \left(\frac{1}{24} \right)^{\frac{1}{n-1}} \left(\frac{2n+1}{n} \right)^{\frac{n}{n-1}} \left(\frac{v}{H_m} \right) \quad (\text{A.158})$$

Examinando Eq. (A.158), observamos que o fator, f_c , dado por

$$f_c = \frac{\left(\sum_{i=1}^N H_i^3 \right)^{\frac{1}{n-1}} \sum_{i=1}^N H_i}{\left(\sum_{i=1}^N H_i^{\frac{2n+1}{n}} \right)^{\frac{n}{n-1}}} H_m, \quad (\text{A.159})$$

pode ser visto como uma correção a respeito da taxa de deformação, onde a informação sobre a distribuição está inclusa, ao contrário de um procedimento onde apenas o valor médio H_m é conhecido e utilizado para substituir H nesta equação.

A.5 Modelo Bingham com Distribuição de Poros

A equação constitutiva para um material de Bingham é dada por:

$$\begin{aligned}\dot{\gamma} &= 0, \text{ se } \tau \leq \tau_0 \\ \tau &= \tau_0 + \alpha \dot{\gamma}, \text{ se } \tau > \tau_0\end{aligned}$$

Considerando um REV feito de um arranjo de cilindros passantes com diferentes raios. O termo de interação é dado pela densidade volumétrica de força de arrasto nos poros.

$$\mathbf{m}_f = \frac{\mathbf{f}_t}{V_{REV}}. \quad (\text{A.160})$$

O perfil de velocidade no regime permanente para um fluido de Bingham em um poro, considerando escoamento laminar, completamente desenvolvido e em regime permanente é dado por:

$$v = \begin{cases} \frac{dp}{dx} \frac{R^2}{4\alpha} \left(1 - \frac{R_p}{R}\right)^2, & 0 \leq r \leq R_p \\ \frac{dp}{dx} \frac{R^2}{4\alpha} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) - \frac{\tau_0}{\alpha} R \left(1 - \frac{r}{R}\right), & R_p < r \leq R \end{cases}$$

onde R_p é o raio do plug, τ_w é a tensão de cisalhamento na parede. Um balanço de forças na direção do escoamento num elemento de fluido a uma distância r pode ser escrito como:

$$\tau_{rz} = -\frac{\Delta p}{L} \frac{r}{2} \quad (\text{A.161})$$

No raio de *plug* R_p , a Equação (A.161) se aplica:

$$\tau_0 = -\frac{\Delta p}{L} \frac{R_p}{2} \quad (\text{A.162})$$

A equação também se aplica a tensão de cisalhamento na parede:

$$\tau_w = -\frac{\Delta p}{L} \frac{R}{2} \quad (\text{A.163})$$

A razão τ_0/τ_w é então dada por:

$$\frac{\tau_0}{\tau_w} = \frac{R_p}{R} \quad (\text{A.164})$$

A vazão Q é dada por:

$$Q = \frac{\pi R^4}{8\alpha} \frac{dp}{dx} \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4\right) \quad (\text{A.165})$$

Onde $\phi = \tau_0/\tau_w$.

A velocidade média é:

$$v_m = \frac{Q}{A} = \frac{R^2}{8\alpha} \frac{dp}{dx} \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4\right) \quad (\text{A.166})$$

Então, o perfil de velocidade pode ser escrito em função da velocidade média como:

$$v = 2v_m \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4\right)^{-1} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) - 8v_m \frac{\tau_0}{R} \left(\frac{dp}{dx}\right)^{-1} \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4\right)^{-1} \quad (\text{A.167})$$

$$v = 2v_m \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4\right)^{-1} \left\{ \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) - 2\phi \left(1 - \frac{r}{R}\right) \right\} \quad (\text{A.168})$$

Equação (A.168) é válida para $R_p < r \leq R$.

A tensão na parede é dada por:

$$\tau_w = \eta(\dot{\gamma}) \dot{\gamma}|_{r=R} \quad (\text{A.169})$$

A função viscosidade para um fluido de Bingham ($\eta = \tau/\dot{\gamma}$) quando $\tau > \tau_0$ é dada por:

$$\eta(\dot{\gamma}) = \tau_0 \dot{\gamma}^{-1} + \alpha \quad (\text{A.170})$$

Inserindo (A.170) em (A.169):

$$\tau_w = (\tau_0 + \alpha \dot{\gamma})|_{r=R} = \left[\tau_0 + \alpha \left(\frac{dv}{dr} \right) \right] \Big|_{r=R} \quad (\text{A.171})$$

Inserindo Eq. (A.168) em (A.171):

$$\tau_w = \tau_0 - 4\alpha v_m \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4\right)^{-1} \left(\frac{1-\phi}{R}\right) \quad (\text{A.172})$$

Para o caso cilíndrico, a força na parede pode ser obtida da tensão na parede, relacionando a tensão com a área superficial de contato a_s :

$$f = \tau_w a_s = 2\pi R L \left[\tau_0 - 4\alpha v_m \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4\right)^{-1} \left(\frac{1-\phi}{R}\right) \right] \quad (\text{A.173})$$

A força obtida corresponde a um único poro i , com comprimento L .

$$f_i = 2\pi R_i L \left[\tau_0 - 4\alpha v_{mi} \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4\right)^{-1} \left(\frac{1-\phi_i}{R_i}\right) \right] \quad (\text{A.174})$$

Extrapolando a equação acima para a forma vetorial:

$$\mathbf{f}_i = \left[2\pi L \tau_0 R_i |\mathbf{v}_{mi}|^{-1} - 8\alpha \pi L R_i v_{mi} \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4 \right)^{-1} \left(\frac{1 - \phi_i}{R_i} \right) \right] \mathbf{v}_{mi} \quad (\text{A.175})$$

O volume de um único poro i é:

$$V_i = \pi R_i^2 L \quad (\text{A.176})$$

O volume total de poros no REV é dado por:

$$V_{tp} = \pi L \sum_{i=1}^N R_i^2 \quad (\text{A.177})$$

E o volume do REV:

$$V_{REV} = \frac{\pi L}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N R_i^2 \quad (\text{A.178})$$

Da Eq. (A.160), o termo de interação é dado por:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon \tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_{mi}|^{-1} - 8\varepsilon \alpha \sum_{i=1}^N \frac{\left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4 \right)^{-1} (1 - \phi_i)}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \right] \mathbf{v}_{mi} \quad (\text{A.179})$$

O termo de interação também pode ser escrito em função da mobilidade \mathbf{M} :

$$\mathbf{m}_f = -\varepsilon^2 \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{v}_m \quad (\text{A.180})$$

onde \mathbf{v}_m é a velocidade média no REV. Comparando equações (4.140) e (4.141):

$$\mathbf{M}^{-1} = \left[-\frac{2\tau_0}{\varepsilon} \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2 |\mathbf{v}_m|} + \frac{8\alpha}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N \frac{\left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4 \right)^{-1} (1 - \phi_i)}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \frac{\mathbf{v}_{mi}}{|\mathbf{v}_m|} \right] \mathbf{I} \quad (\text{A.181})$$

Quando o REV é modelado por um único poro representativo, o somatório é resumido a um único termo:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon \tau_0 \frac{1}{R} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 8\varepsilon \alpha \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4 \right)^{-1} (1 - \phi) \frac{1}{R^2} \right] \mathbf{v}_m \quad (\text{A.182})$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \left[-\frac{2\tau_0}{\varepsilon} \frac{1}{R |\mathbf{v}_m|} + \frac{8\alpha}{\varepsilon} \left(1 - \frac{4}{3}\phi + \frac{1}{3}\phi^4 \right)^{-1} (1 - \phi) \frac{1}{R^2} \right] \mathbf{I} \quad (\text{A.183})$$

O termo de interação (A.182) também pode ser escrito numa forma alternativa:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{1}{R} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 24\varepsilon\alpha \frac{1}{(3 - \phi - \phi^2 - \phi^3) R^2} \right] \mathbf{v}_m \quad (\text{A.184})$$

Se $\tau_0 = 0$:

$$\mathbf{m}_f = -8\varepsilon\alpha \frac{1}{R^2} \mathbf{v}_m = -\varepsilon^2\alpha \frac{1}{K} \mathbf{v}_m \quad (\text{A.185})$$

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{8\alpha}{\varepsilon} \frac{1}{R^2} \frac{\mathbf{v}_m}{|\mathbf{v}_m|} \mathbf{I} = \frac{\alpha}{K} \mathbf{I} \quad (\text{A.186})$$

E a solução newtoniana para o REV com poro representativo é recuperada.

A velocidade média em um dado poro é:

$$v_{f_i} = \frac{R_i^2}{8\alpha} \left(\frac{dp}{dx} \right)_i \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4 \right) \quad (\text{A.187})$$

A vazão total no REV é:

$$Q = v_m A_{total} = v_m \sum_{i=1}^N \pi R_i^2 \quad (\text{A.188})$$

A vazão total no REV também pode ser descrita como o somatório de vazões em cada poro:

$$Q = \sum_{i=1}^N q_i = \sum_{i=1}^N \pi v_i R_i^2 \quad (\text{A.189})$$

Comparando (A.188) e (A.189), a velocidade média no REV pode ser escrita como:

$$v_m = \frac{\sum_{i=1}^N v_i R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (\text{A.190})$$

Inserindo (A.187) em (A.190):

$$v_m = \frac{1}{8\alpha} \frac{\sum_{i=1}^N \left(\frac{dp}{dx} \right)_i \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4 \right) R_i^4}{\sum_{i=1}^N R_i^2} \quad (\text{A.191})$$

É usada a hipótese de que o gradiente de pressão é o mesmo em cada poro. Então, a velocidade em cada poro é dada por:

$$v_{f_i} = R_i^2 \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4 \right) \frac{\sum_{i=1}^N R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4 \right) R_i^4} v_m \quad (\text{A.192})$$

O termo de interação pode ser escrito na forma escalar como:

$$m_f = 2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} - 8\varepsilon\alpha \sum_{i=1}^N \frac{\left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4\right)^{-1} (1 - \phi_i)}{\sum_{i=1}^N R_i^2} v_{mi} \quad (\text{A.193})$$

Inserindo (A.192) em (A.193)

$$m_f = 2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} - 8\varepsilon\alpha \sum_{i=1}^N \frac{(1 - \phi_i) R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4\right) R_i^4} v_m \quad (\text{A.194})$$

Extrapolando a Equação (A.194) para a forma vetorial:

$$\mathbf{m}_f = \left[2\varepsilon\tau_0 \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2} |\mathbf{v}_m|^{-1} - 8\varepsilon\alpha \sum_{i=1}^N \frac{(1 - \phi_i) R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4\right) R_i^4} \right] \mathbf{v}_m \quad (\text{A.195})$$

Então, o inverso do tensor mobilidade é:

$$\mathbf{M}^{-1} = \left[-\frac{2\tau_0}{\varepsilon} \frac{\sum_{i=1}^N R_i}{\sum_{i=1}^N R_i^2 |\mathbf{v}_m|} + \frac{8\alpha}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N \frac{(1 - \phi_i) R_i^2}{\sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{4}{3}\phi_i + \frac{1}{3}\phi_i^4\right) R_i^4} \right] \mathbf{I} \quad (\text{A.196})$$

Se $\tau_0 = 0$:

$$\mathbf{m}_f = -8\varepsilon\alpha \sum_{i=1}^N \frac{R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^4} \mathbf{v}_m \quad (\text{A.197})$$

E o inverso do tensor mobilidade:

$$\mathbf{M}^{-1} = \frac{8\alpha}{\varepsilon} \sum_{i=1}^N \frac{R_i^2}{\sum_{i=1}^N R_i^4} \mathbf{I} \quad (\text{A.198})$$

Então, os resultados newtonianos são recuperados.