

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

FACULDADE DE TECNOLOGIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL E AMBIENTAL

**MODELAGEM DE PROBLEMAS DE FLUXO NA ESCALA
GRANULAR USANDO O MÉTODO LATTICE BOLTZMANN**

DIEGO ALEXANDER OCAMPO GÓMEZ

ORIENTADOR: MÁRCIO MUNIZ DE FARIAS

CO-ORIENTADOR: RAÚL DARÍO DURAND FARFÁN

DISSERTAÇÃO MESTRADO EM GEOTECNIA

PUBLICAÇÃO: G. DM – 228/13

BRASÍLIA/ DF: JULHO/2013

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL**

**MODELAGEM DE PROBLEMAS DE FLUXO NA ESCALA
GRANULAR USANDO O MÉTODO LATTICE BOLTZMANN**

DIEGO ALEXANDER OCAMPO GÓMEZ

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE.

APROVADA POR:

**MÁRCIO MUNIZ DE FARIAS, Ph.D. (UnB)
(ORIENTADOR)**

**RAÚL DARÍO DURAND FARFÁN, Ph.D. (UnB)
(CO-ORIENTADOR)**

**MANOEL PORFIRIO CORDÃO NETO, DSc. (UnB)
(EXAMINADOR INTERNO)**

**CARLOS ALEXANDER RE CAREY MORFA, Dr. Ing. (UCLV)
(EXAMINADOR EXTERNO)**

DATA: BRASÍLIA/DF, 19 DE JULHO DE 2013.

FICHA CATALOGRÁFICA

OCAMPO-GÓMEZ, DIEGO ALEXANDER

Modelagem de Problemas de Fluxo na Escala Granular Usando o Método Lattice Boltzmann. Distrito Federal, 2013.

xxviii, 118 p., 210x297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Geotecnia, 2013)

Dissertação de Mestrado - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Civil

- | | |
|------------------------------|-----------------------------|
| 1. Fluxo em meios porosos | 2. Método lattice Boltzmann |
| 3. Lei de Darcy- Forchheimer | 4. Parâmetros intrínsecos |
| I. ENC/FT/UnB | II. Título (série) |

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

OCAMPO-GÓMEZ, D.A. (2013). Modelagem de Problemas de Fluxo na Escala Granular Usando o Método Lattice Boltzmann. Dissertação de Mestrado, Publicação G.DM-228/13, Departamento de Engenharia Civil, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 118 p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Diego Alexander Ocampo Gómez

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO: Modelagem de Problemas de Fluxo na Escala Granular Usando o Método Lattice Boltzmann

GRAU / ANO: Mestre / 2013

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Diego Alexander Ocampo Gómez
CLN 209 Bloco B Apartamento 209
CEP: 70854-520 - Brasília/DF – Brasil
e-mail: elgodie24@gmail.com

A mi familia, son mi fuente de inspiración y de voluntad para superarme diariamente

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador, Professor Márcio Muniz de Farias, pela sua paciência, disponibilidade, acompanhamento e, principalmente, por ter confiado em mim para realizar este trabalho.

Ao Professor Raúl Durand, pela ajuda valiosa na fase de desenvolvimento do código computacional.

Ao Professor Hernán Martínez e à Professora Yamile Valencia, pelas indicações para entrar no curso de pós-graduação. Espero ter honrado os seus votos de confiança.

Ao Programa de Pós-Graduação em Geotecnia por me brindar esta oportunidade única.

Ao meu colega e amigo Marcelo Llano, pelas inúmeras discussões acadêmicas, diurnas e noturnas, e pela ajuda nos momentos mais críticos do meu trabalho.

À família Chaparro, pelo acolhimento, a ajuda incondicional e a alegria, vocês são parte da minha família no Brasil.

Aos meus colegas e amigos, pela força, a motivação e a companhia, especialmente ao “Luisk” e ao Daniel (Satán).

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

A todas as pessoas que de uma ou outra forma contribuíram à realização deste trabalho.

Muito Obrigado.

RESUMO

O fluxo de fluidos em meios porosos é um fenômeno comum na natureza e o seu estudo tem uma importância particular na área da geotecnia. A análise deste tipo de problema deve ser feita em uma escala em que as características do domínio que são relevantes ao fenômeno físico sejam levadas em consideração e a escala mais adequada é a do tamanho dos grãos. Simulações de fluxo de fluidos na escala dos grãos podem tornar-se impraticáveis quando são usados esquemas numéricos tradicionais como o método dos elementos finitos (MEF) ou o de volumes finitos (MVF), pois a geometria arbitrariamente complexa dos meios porosos dificulta a imposição de condições de contorno. O método lattice Boltzmann (LBM) é um método baseado em uma escala mesoscópica que consegue contornar este tipo de problema ao implementar uma dinâmica simples que incorpora facilmente geometrias muito complexas. Neste trabalho são apresentadas as equações macroscópicas que descrevem o fluxo de fluidos (Equações de Navier-Stokes) e as simplificações dessas equações para meios porosos (Lei de Darcy-Forchheimer); o método lattice Boltzmann também é introduzido. Com base em um processo de expansão multiescala é demonstrado que o método recupera a dinâmica macroscópica do fluxo de fluidos. Um código computacional baseado no LBM com operador de colisão BGK foi desenvolvido, validado e utilizado para simular fluxo em meios porosos gerados computacionalmente com diferentes estruturas de poros. São apresentadas estimativas da permeabilidade intrínseca, fator beta de Forchheimer e tortuosidade para esses meios porosos. Finalmente, foi comprovado que correlações empíricas baseadas apenas em parâmetros macroscópicos podem fornecer estimativas com erros significativos. Portanto, o método lattice Boltzmann constitui uma ferramenta simples, mas poderosa para esta tarefa.

PALAVRAS CHAVES: Fluxo em meios porosos, Método lattice Boltzmann, Lei de Darcy-Forchheimer, parâmetros intrínsecos.

ABSTRACT

Fluid flow through porous media is a common phenomenon in nature. Understanding this phenomenon is particularly important in geotechnical applications. Seepage problems analysis should be carried out in a scale that accounts for the features of the porous media that are relevant for this phenomenon, i.e. pore size scale. Fluid flow simulations at grain scale could be unpractical when traditional numerical techniques such as finite elements methods (FEM) or volume finite methods (VFM) are used, because several difficulties arise when imposing boundary conditions for complex porous media geometries. Lattice Boltzmann method (LBM) is a mesoscopic approach that can overcome this difficulties. By implementing a straightforward dynamics, lattice Boltzmann methods can easily incorporate complex geometries. The equations governing fluid flow (Navier-Stokes equations) and simplifications for the case of porous media (Darcy-Forchheimer law) are presented in this work along with the lattice Boltzmann method. A multiscale procedure shows that the LBM recovers the macroscopic dynamics of fluid flows. A computational code based on lattice Boltzmann method with BGK collision operator was also developed and validated. This code was used for simulating flux through computer generated package of grains with different pore structures (grain size and grain distribution). Estimates of intrinsic permeability, Forchheimer beta factor, and tortuosity for that media are computed. It is noted that estimating these parameters by empirical correlations based on macroscopic parameters may lead to significant errors. LBM provides a powerful tool for measuring these intrinsic parameters.

KEYWORDS: Fluid flow in porous media, lattice Boltzmann method, Darcy- Forchheimer law, intrinsic parameters.

ÍNDICE

	Página
1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 MOTIVAÇÃO.....	2
1.2 OBJETIVOS	2
1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	2
2 MODELAGEM DE FLUXO DE FLUIDOS NA ENGENHARIA.....	5
2.1 ESCALAS DE DESCRIÇÃO FÍSICA DE FLUIDOS.....	5
2.2 MODELOS NUMÉRICOS PARA SIMULAÇÃO DE FLUIDOS	6
2.2.1 MODELOS NUMÉRICOS MACROSCÓPICOS.....	7
2.2.1.1 MODELO MATEMÁTICO.....	7
2.2.1.2 PROCESSO DE DISCRETIZAÇÃO	7
2.2.1.3 MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS.....	8
2.2.1.4 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS.....	9
2.2.1.5 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS.....	10
2.2.2 MODELOS MICROSCÓPICOS	11
2.2.2.1 MÉTODOS DE MONTE CARLO	11
2.2.2.2 MÉTODOS DA DINÂMICA MOLECULAR.....	12
2.2.3 MODELOS MESOSCÓPICOS.....	13
2.2.3.1 MODELOS LATTICE BOLTZMANN.....	14
2.3 MODELOS NUMÉRICOS NA SIMULAÇÃO DE FLUXO EM MEIOS POROSOS....	15
2.3.1 MÉTODO LATTICE BOLTZMANN PARA SIMULAR FLUXO EM MEIOS POROSOS.....	17
2.3.1.1 PROBLEMAS DE ACOPLAMENTO HIDROMECAÂNICO	17
2.3.1.2 PROBLEMAS EM MEIOS POROSOS NÃO SATURADOS	18
2.3.1.3 ESTIMATIVA DE PARÂMETROS EM MEIOS POROSOS SATURADOS	18
3 EQUAÇÕES MACROSCÓPICAS GOVERNANTES DO PROBLEMA DE FLUXO DE FLUIDOS	21

3.1	NOTAÇÃO UTILIZADA.....	21
3.2	EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO.....	22
3.2.1	FORMA GERAL DE UMA EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO	22
3.2.2	CONSERVAÇÃO DA MASSA.....	23
3.2.3	CONSERVAÇÃO DO MOMENTO LINEAR	23
3.2.4	CONSERVAÇÃO DA ENERGIA	24
3.2.5	FLUXOS ISOTÉRMICOS E INCOMPRESSÍVEIS.....	25
3.2.6	FORMULAÇÃO ADIMENSIONAL	26
3.3	EQUAÇÃO DE DARCY-FORCHHEIMER.....	27
3.3.1	PERMEABILIDADE INTRÍNSECA OU COEFICIENTE DE DARCY	29
3.3.2	FATOR BETA OU COEFICIENTE DE FORCHHEIMER.....	29
3.3.3	TORTUOSIDADE.....	30
4	MODELO LATTICE BOLTZMANN PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO DE FLUIDOS.....	33
4.1	VARIÁVEIS DISCRETAS	33
4.2	MODELOS LATTICE BOLTZMANN	34
4.3	ESTRUTURA DA MALHA.....	36
4.4	ANÁLISE MULTI-ESCALA DE CHAPMAN-ENSKOG	37
4.4.1	EXPANSÃO EM SÉRIES COM SEPARAÇÃO DE ESCALAS	37
4.4.1.1	SIMETRIAS DA MALHA	38
4.4.1.2	EXPANSÃO MULTIESCALA.....	40
4.4.1.3	LEIS DE CONSERVAÇÃO	41
4.5	FLUXO DE FLUIDOS: ANSATZ DE CHAPMAN-ENSKOG	45
4.6	ACURÁCIA DOS MÉTODOS LATTICE BOLTZMANN.....	48
4.6.1	ACURÁCIA DO MODELO PARA FLUIDOS INCOMPRESSÍVEIS	49
4.7	CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO	50
4.7.1	CONDIÇÕES DE CONTORNO	50
4.7.1.1	CONDIÇÕES DE CONTORNO PERIÓDICAS	51
4.7.1.2	CONDIÇÕES DE BOUNCE-BACK (REFLEXÃO).....	52
4.7.1.3	CONDIÇÕES DE VELOCIDADE OU DE VON NEUMANN	53
4.7.1.4	CONDIÇÕES DE PRESSÃO OU DE DIRICHLET	55
4.7.1.5	CONDIÇÕES INICIAIS	56

5 METODOLOGIA	57
5.1 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DO MODELO LATTICE BOLTZMANN BGK	58
5.1.1 ALGORITMO	58
5.2 SIMULAÇÃO DE PROBLEMAS DE REFERÊNCIA E VALIDAÇÃO DO MÉTODO	60
5.2.1 ESCOLHA DAS UNIDADES	60
5.2.2 FLUXO POISEUILLE.....	61
5.2.2.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA E DISCRETIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS	62
5.2.2.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS	63
5.2.2.3 RESULTADOS	63
5.2.3 FLUXO PASSANDO AO REDOR DE UM CILINDRO CIRCULAR.....	65
5.2.3.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA E DISCRETIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS	65
5.2.3.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS	66
5.2.3.3 RESULTADOS	66
5.3 APLICAÇÃO PARA A DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES INTRÍNSECAS....	70
5.3.1 ANÁLISE DA RESOLUÇÃO E DO PARÂMETRO DE RELAXAÇÃO	70
5.3.1.1 GEOMETRIA DO PROBLEMA PARA ANÁLISE DA RESOLUÇÃO	70
5.3.1.2 EFEITO DA RESOLUÇÃO E DO PARÂMETRO DE RELAXAÇÃO NO CÁLCULO DA PERMEABILIDADE E DA TORTUOSIDADE	72
5.3.2 ESTUDO DA LEI DE DARCY FORCHHEIMER.....	76
5.3.2.1 GEOMETRIA DOS MEIOS POROSOS SIMULADOS	76
5.3.2.2 SIMULAÇÕES E CÁLCULOS	78
6 APRESENTAÇÃO DE RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	81
6.1 ARRASTO.....	81
6.2 PERMEABILIDADE INTRÍNSECA	85
6.2.1 CONDUTIVIDADE HIDRAULICA.....	87
6.3 FATOR BETA	87
6.4 TORTUOSIDADE	88
6.5 LINHAS DE FLUXO	91
7 CONCLUSÕES.....	95

7.1 LIMITAÇÕES	96
7.2 SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS	97
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	99
A – CÓDIGO DE IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO LATTICE BOLTZMANN COM OPERADOR DE COLISÃO BGK	105
B – CÓDIGO PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO POISEUILLE.....	111
C – CÓDIGO PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO PASSANDO POR UM CILINDRO CIRCULAR	113
D.1- CÓDIGO PARA GERAÇÃO DE ARRANJOS DE PARTÍCULAS CIRCULARES DISTRIBUÍDAS REGULARMENTE.....	115
D.2- CÓDIGO PARA GERAÇÃO DE ARRANJOS DE PARTÍCULAS CIRCULARES DISTRIBUÍDAS ALEATORIAMENTE.....	117

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Exemplo de uma malha estruturada em 2D (Ferziger & Peric, 2001).....	8
Figura 2.2. Exemplo de uma malha triangular desestruturada em 2D (Zienkiewicz <i>et al.</i> , 2005a).	8
Figura 3.1. Relação entre o gradiente de pressão e a média volumétrica da velocidade para fluxo em meios porosos (modificado de Chukwudozie (2011)).	28
Figura 4.1. Discretização espacial de uma sub-amostra cúbica em um modelo lattice Boltzmann.	34
Figura 4.2. Malha bidimensional com 9 velocidades (D2Q9) (Durand <i>et al.</i> , 2012).....	35
Figura 4.3. Nó no topo de uma malha D2Q9, a região sombreada está fora do domínio. As populações desconhecidas são representadas pelos vetores lattice com traço descontínuo (Latt <i>et al.</i> , 2008).	51
Figura 4.4. Topologia cilíndrica do domínio computacional quando aplicadas condições periódicas em uma direção, a fenda no cilindro é meramente ilustrativa, enfatizando como o domínio se enrola ao redor de si mesmo (Sukop & Thorne, 2006).....	51
Figura 4.5. Topologia toroidal de um domínio computacional periódico em ambas as direções. As fendas no toróide ilustram como o domínio se enrola ao redor de si mesmo (Sukop & Thorne, 2006).	52
Figura 4.6. Condição de não-escorregamento nas paredes com a regra de reflexão em um lattice D2Q9 (Durand <i>et al.</i> , 2012).	53
Figura 5.1. Fluxograma da metodologia seguida no presente estudo.	57
Figura 5.2. Perfil de velocidade tipo Poiseuille.	62
Figura 5.3. Campo vectorial de velocidades e campo escalar de densidades em um fluxo tipo Poiseuille simulado pelo método lattice Boltzmann com $Re = 5$	64
Figura 5.4. Perfil teórico de velocidades em um fluxo tipo Poiseuille com $Re = 5$ e perfis obtidos com o LBM.	64
Figura 5.5. Configuração geométrica usada para simulação de fluxo ao redor de um cilindro circular.	66
Figura 5.6. Processo do desenvolvimento da estela por trás de um cilindro circular (Taneda, 1956).	67
Figura 5.7. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 5$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em	

unidades da malha.	67
Figura 5.8. Gráfico da relação entre o diâmetro do cilindro, o comprimento dos vórtices gêmeos e o número de Reynolds (modificado de Taneda, 1956).	68
Figura 5.9. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 20$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em unidades da malha.	68
Figura 5.10. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 40$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em unidades da malha.	69
Figura 5.11. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 50$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em unidades da malha.	69
Figura 5.12. Arranjo uniforme de círculos usado para estudar a resolução e parâmetro de relaxação.	71
Figura 5.13. Variação da permeabilidade com a resolução da malha.	73
Figura 5.14. Variação da tortuosidade com a resolução da malha.	74
Figura 5.15. Variação da permeabilidade com o parâmetro de relaxação.	75
Figura 5.16. Variação da tortuosidade com o parâmetro de relaxação.	75
Figura 5.17. Máximo número de Reynolds que pode ser simulado em função do tempo de relaxação e da resolução com $u_{lb\max} = 0.06$	76
Figura 5.18. Arranjo regular de partículas usado para estudar a lei de Darcy-Forchheimer. ...	77
Figura 5.19. Curvas granulométricas dos arranjos gerados aleatoriamente com diferentes porosidades ϕ . Classificação de tamanhos segundo (Lambe, 2004).....	78
Figura 6.1. Resultados do arraste de Darcy-Forchheimer para várias porosidades e números de Reynolds em um arranjo com distribuição regular.	81
Figura 6.2. Resultados do arraste de Darcy-Forchheimer para várias porosidades e números de Reynolds em arranjos gerados aleatoriamente.	82
Figura 6.3. Fração do arrasto de Forchheimer em relação ao arrasto total no modelo de Ergun para camadas de partículas granulares.	83
Figura 6.4. Fração do arraste de Forchheimer para o arranjo regular com o método de lattice Boltzmann.	84
Figura 6.5. Fração do arraste de Forchheimer para o arranjo aleatório com o método de lattice Boltzmann.	84

Figura 6.6. Permeabilidade normalizada em meios porosos com distribuição regular de partículas e com distribuição aleatória, calculada com o método lattice Boltzmann.	85
Figura 6.7. Comparação entre o alfa de simulações com lattice Boltzmann, os resultados de Ergun (1952) e os de Lee e Yang (1997).....	86
Figura 6.8. Fator beta de ambos os arranjos, calculado com o método lattice Boltzmann e com a correlação de Ergun para camadas granulares.	88
Figura 6.9. Tortuosidades calculadas para um arranjo regular de partículas com diferentes porosidades.....	89
Figura 6.10. Tortuosidades calculadas para arranjos de partículas de diâmetro aleatório, distribuídas aleatoriamente.	89
Figura 6.11. Dados de tortuosidade média em função da porosidade do arranjo e ajuste de Nabovati e Souza (2007).....	90
Figura 6.12. Variação da tortuosidade média com o fator beta de Forchheimer para arranjos regulares e arranjos aleatórios.....	90
Figura 6.13. Variação da tortuosidade com a permeabilidade normalizada.	91
Figura 6.14. Linhas de fluxo no estado estacionário no contorno inferior de um arranjo com distribuição regular com $\phi = 67\%$ e $Re = 30$	92
Figura 6.15. Linhas de fluxo no estado estacionário para um arranjo aleatório com $\phi = 70\%$ e $Re = 15$	93

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1. Notação usada para operações entre vetores e tensores	22
Tabela 4.1. Estrutura da malha D2Q9	37
Tabela 5.1. Algoritmo utilizado na implementação de um código para o modelo lattice Boltzmann BGK.	59
Tabela 5.2. Características do computador usado nas simulações	60
Tabela 5.3. Parâmetros do sistema físico adimensional e do sistema lattice usados na simulação de fluxo Poiseuille.	63
Tabela 5.4. Parâmetros do problema para análise da resolução em unidades físicas e unidades lattice.	71
Tabela 6.1. Condutividade hidráulica com o método lattice Boltzmann para meios porosos conformados por partículas circulares com $\mu = 1.0 \times 10^{-3} Pa \cdot s$ e $\gamma = 9.8 kN / m^3$	87

LISTA DE SÍMBOLOS, NOMENCLATURA E ABREVIACÕES

ABREVIACÕES

DFC	Dinâmica de fluidos computacional
LBM	Método lattice Boltzmann (<i>Lattice Boltzmann method</i>)
MDF	Método das diferenças finitas
MEF	Método dos elementos finitos
MVF	Método dos volumes finitos
Tol	Tolerância
2D	Bidimensional
3D	Tridimensional

LETRAS ARÁBICAS

a	Distância entre a parede e o centro de um canal com um fluxo Poiseuille
a^*	Fator do termo de força no operador de colisão BGK
a_s	Área superficial dos grãos
A	Fator geométrico de Kozeny-Carman
b	Fator do termo de força no operador de colisão BGK
c	Fator do termo de correção no operador de colisão BGK
\vec{c}_i	Vetores de malha ($i = 0, 1, 2, \dots, q$)
c_s	Velocidade do som
\mathcal{C}	Vetores de malha no espaço \mathbb{R}^q
CT_i	Termo de correção no operador de colisão BGK
d	Diâmetro médio de um sólido circular em uma simulação lattice Boltzmann
D	Número de dimensões de um espaço
e	Quantidade física escalar genérica
\vec{e}_i	Vetores base de um espaço euclidiano ($i=1,2,3$)
E	Energia
E_m	Energia por unidade de massa
ϵ	Parâmetro de expansão nas séries
$f(\vec{r}_{ijk}, t_{Nt})$	Aproximação numérica de uma função f
f_i	Função discreta de distribuição de partículas na direção do vetor de malha \vec{c}_i

f_i^{eq}	Função discreta de distribuição de equilíbrio de partículas na direção do vetor de malha \vec{c}_i
\vec{F}	Termo fonte de forças externas
FT_i	Termo de força no operador de colisão BGK
\vec{g}	Vetor de aceleração por forças externas
g_i	Populações de partículas desconhecidas em um nó no contorno de uma simulação
G	Gradiente de pressão em um fluxo Poiseuille
h_i	Função de distribuição sem ponderar
h_x	Ordem de acurácia espacial
h_t	Ordem de acurácia temporal
F	Frequência de um fluxo periódico
\mathbf{I}	Tensor unitário
\vec{j}	Momento de primeira ordem da função de distribuição de partículas
k	Condutividade hidráulica
K	Permeabilidade intrínseca
Kn	Número de Knudsen
l_0	Comprimento característico de um problema
L	Separação entre os grãos em arranjos de partículas circulares distribuídos regularmente
L_e	Comprimento realmente percorrido por uma partícula de fluido em um meio poroso
L_m	Comprimento do meio poroso em uma dada direção do fluxo
\vec{m}	Grandeza vectorial física genérica
Ma	Número Mach
N	Número de pontos de discretização de um comprimento característico
N_f	Número de nós fluidos em uma simulação com lattice Boltzmann
N_n	Número total de nós em uma simulação com lattice Boltzmann
N_t	Número de passos para discretizar um tempo característico
p	Pressão
p^*	Pressão adimensionalizada
\bar{p}	Pressão média

q	Número de funções de distribuição de partículas em uma malha
q_H	Fontes de calor diferentes de condução térmica
\vec{r}, \vec{r}_{ijk}	Vetor de posição
\vec{r}^*	Vetor de posição adimensionalizado
R^2	Coefficiente de determinação em um ajuste linear por mínimos quadrados
Re	Número adimensional de Reynolds
\vec{Q}_e	Vazão (fluxo) de uma quantidade física escalar genérica
\mathbf{Q}_m	Vazão (fluxo) de uma grandeza física vectorial genérica
\mathbf{Q}	Tensor de segunda ordem formado pelo produto diádico dos vetores de malha
s	Fontes ou sorvedouros de uma quantidade física escalar
\vec{s}	Fontes ou sorvedouros de uma grandeza física vectorial
S	Comprimento dos vórtices gêmeos formados no fluxo por trás de um cilindro circular
\mathbf{S}	Tensor de taxa de deformação do fluido
t	Tempo
t^*	Tempo adimensionalizado
t_0	Tempo característico de um problema
t_i	Pesos de ponderação dos vetores de malha
T	Temperatura
$T_{\alpha\beta}$	Tensor arbitrário de segunda ordem
\vec{u}	Vetor velocidade
\vec{u}^*	Vetor velocidade adimensionalizado
\bar{u}	Velocidade média
u_{lb}	Velocidade no sistema lattice Boltzmann
u_f	Velocidade de fluxo de Darcy
u_{\perp}	Projeção da velocidade sobre a normal ao contorno de uma simulação que aponta para fora do domínio

LETRAS GREGAS

α	Constante do termo de arraste viscoso na equação de Darcy-Forchheimer
$\alpha(\vec{r}, t)$	Campo escalar genérico

$\alpha_{ijk}(t_n)$	Aproximação numérica de um campo escalar genérico
β	Fator beta de Forchheimer
γ	Peso unitário de um fluido
δ_x	Espaçamento da malha
δ_t	Passo de tempo no sistema lattice Boltzmann
$\delta_{\alpha\beta}$	Delta de Kronecker
ζ	Tortuosidade
θ	Ângulo de formação de vórtices gêmeos no fluxo por trás de um cilindro circular
κ	Condutividade térmica
λ	Parâmetro de viscosidade por compressibilidade
λ_f	Caminho livre médio de uma molécula de gás
μ	Viscosidade dinâmica
ν	Viscosidade cinemática
ρ	Densidade
$\bar{\rho}$	Densidade média
ρ_x	Soma das populações de partículas desconhecidas em um nó no contorno de uma simulação LBM
ρ_-	Soma das populações de partículas na direção oposta às partículas desconhecidas em um nó no contorno de uma simulação LBM
ρ_+	Soma das populações de partículas com vetor nulo ou tangencial em um nó no contorno de uma simulação LBM
σ	Tensor de tensões internas no fluido
τ	Tempo de relaxação do método lattice Boltzmann
τ	Tensor desvio das tensões interna no fluido
ϕ	Porosidade
ψ	Constante no cálculo da acurácia do modelo numérico
ω	Parâmetro de relaxação do método lattice Boltzmann
Ω_i	Operador de colisão na direção do vetor de malha \vec{c}_i
$\vec{\omega}$	Vetor de vorticidade
Π	Momento de segunda ordem da função de distribuição de partículas

1 INTRODUÇÃO

O fluxo de fluidos em meios porosos é um fenômeno comum na natureza e em muitos campos da ciência e da engenharia. Processos técnicos economicamente importantes como a recuperação de petróleo demandam um entendimento aprimorado dos fenômenos de fluxo em meios porosos. Nas aplicações da engenharia e particularmente na geotecnia, este tema é relevante em várias frentes, p. ex., na avaliação de volumes de infiltração, análise da erosão, previsão da evolução de plumas de contaminantes, análise da sucção, adesividade entre emulsões asfálticas e agregados, etc.

Na maioria aplicações, parâmetros intrínsecos do meio poroso como a permeabilidade ajudam a quantificar o fluxo de fluidos monofásicos. Correlações empíricas como a de Ergun (1952) podem fornecer estimativas dos parâmetros intrínsecos do meio poroso, mas estas relações foram desenvolvidas para condições específicas e são baseadas em parâmetros macroscópicos, o que pode levar a erros significativos.

Simulações numéricas de fluxo de fluidos no nível dos poros podem produzir estimações acuradas dos parâmetros intrínsecos, se houver um modelo acurado da geometria do meio real. Tradicionalmente a simulação de fluxo na engenharia tem seguido uma abordagem macroscópica, na qual o modelo matemático consiste em um conjunto de equações diferenciais parciais ou integral-diferenciais discretizadas com um método como diferenças finitas (MDF), volumes finitos (MVF) ou elementos finitos (MEF). Em uma escala em que só alguns poros são observados ainda é possível usar a abordagem macroscópica, porém quando o domínio inclui muitos poros a implementação das condições de contorno constitui um desafio, devido à complexidade arbitrária dos contornos que são definidos por cada partícula sólida individualmente.

Métodos mesoscópicos representam uma abordagem mais adequada para simulação de fluxo na escala dos grãos, sendo o lattice Boltzmann uma das técnicas mais destacadas. Nesta abordagem a ideia fundamental é construir modelos cinéticos simplificados, que incorporem a física essencial dos processos microscópicos ou mesoscópicos, de forma que a média das propriedades macroscópicas obedeça às equações macroscópicas desejadas (Chen & Doolen, 1998). A superioridade do método lattice Boltzmann decorre de sua simplicidade, pois geometrias complexas são implementadas com a simples designação dos nós como sendo sólidos.

1.1 MOTIVAÇÃO

Esta pesquisa é motivada pela necessidade de estudar o fluxo na escala dos grãos, de forma que todas as características da estrutura porosa sejam levadas em conta na descrição deste fenômeno. A descrição do fluxo a partir da escala granular permite que parâmetros intrínsecos sejam calculados com maior acurácia e que parâmetros macroscópicos possam ser relacionados com a estrutura dos poros. Como a abordagem macroscópica pode tornar-se impraticável na simulação de fluxo em domínios porosos, a abordagem mesoscópica do método lattice Boltzmann é a opção mais adequada neste caso, devido à sua simplicidade.

1.2 OBJETIVOS

O objetivo desta pesquisa é desenvolver e validar um código computacional que implemente o método lattice Boltzmann para ser usado na simulação de problemas de fluxo na escala granular, com o intuito de obter estimativas dos parâmetros intrínsecos de meios porosos.

Os objetivos específicos desta pesquisa são:

- Escrever e validar um código computacional fundamentado no método lattice Boltzmann que possa ser usado para simulação de fluxo em meios porosos.
- Simular problemas de fluxo na escala granular em diferentes tipos de estruturas porosas para obter parâmetros intrínsecos dos arranjos analisados.
- Analisar as diferenças entre os parâmetros obtidos pelo método lattice Boltzmann com propostas baseadas em propriedades macroscópicas.
- Analisar as relações entre os parâmetros intrínsecos calculados e as propriedades da estrutura porosa.

1.3 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO

A presente dissertação está dividida em sete capítulos. O primeiro capítulo introduz o problema de fluxo de fluidos em meios porosos e descreve a importância dos parâmetros intrínsecos para a quantificação do fluxo. O método lattice Boltzmann é apresentado como técnica adequada para obter estimativas acuradas destes parâmetros.

No capítulo 2 são apresentadas e analisadas algumas abordagens de uso comum na descrição de fluidos na engenharia. Também são apresentados os princípios de alguns dos modelos numéricos usados comumente em cada uma das abordagens. Finalmente, é discutida a adequabilidade destes modelos numéricos para simular fluxo em meios porosos, dando

ênfase ao modelo lattice Boltzmann.

No capítulo 3 é apresentada a forma básica diferencial da equação de conservação de uma quantidade física. Equações de conservação para massa, momento e energia de um fluido são derivadas a partir desta expressão. A equação de Navier-Stokes para fluidos isotérmicos e incompressíveis é derivada e levada à forma adimensional, a qual permite introduzir o conceito de similaridade dinâmica. Finalmente, são apresentadas as equações de Darcy e Darcy –Forchheimer para modelar o fluxo em meios porosos, fazendo ênfase nos parâmetros do meio poroso que são objeto desta pesquisa.

No capítulo 4 é descrito o método lattice Boltzmann, apresentando a estrutura da malha e a equação de evolução. A análise multiescala de Chapman-Enskog é introduzida para mostrar como o lattice Boltzmann recupera a dinâmica da equação de Navier Stokes. Por último a acurácia do método é analisada e são apresentadas as condições de contorno.

A metodologia seguida nesta pesquisa é descrita no capítulo 5, o qual está dividido basicamente em duas partes: (1) implementação e validação do código para o método lattice Boltzmann e (2) aplicação a problemas de fluxo em meios porosos.

O capítulo 6 contém os resultados e discussões das simulações de aplicação e no capítulo 7 aparecem as conclusões, limitações e sugestões para pesquisas futuras.

2 MODELAGEM DE FLUXO DE FLUIDOS NA ENGENHARIA

Neste capítulo são apresentadas e analisadas algumas abordagens de uso comum na descrição de fluidos na engenharia. Também são apresentados os princípios de alguns dos modelos numéricos usados comumente em cada uma das abordagens. Finalmente, é discutida a adequabilidade destes modelos numéricos para simular fluxo em meios porosos, dando ênfase ao modelo lattice Boltzmann.

2.1 ESCALAS DE DESCRIÇÃO FÍSICA DE FLUIDOS

A matéria, conceitualmente classificada como fluidos ou sólidos, pode ser completamente descrita pela física microscópica de seus átomos ou moléculas constituintes. Nesta abordagem, fluidos são descritos considerando o movimento dos átomos ou das moléculas individuais. Na descrição molecular as variáveis fundamentais são aquelas que definem o movimento de cada molécula, p. ex., as velocidades moleculares e o número de partículas por unidade de volume. Este tipo de descrição leva à definição de temperatura, como uma medida da energia cinética média das moléculas de gás; de pressão, como a resultante do impulso das moléculas nas paredes do corpo que contém o gás; e de viscosidade como resultante da troca de momento devido ao movimento molecular térmico (Hirsch, 2007).

Na maioria das aplicações da engenharia uma descrição macroscópica é usualmente suficiente, devido à grande disparidade entre a dinâmica molecular subjacente e as escalas espaciais e temporais relevantes às aplicações. Neste caso, a física microscópica simplesmente determina propriedades do material como a viscosidade do fluido ou as constantes elásticas de um sólido. A teoria que ajuda a descrever os fenômenos macroscópicos, negligenciando a estrutura do material em pequena escala, é conhecida como teoria do contínuo. Nesta teoria a matéria é considerada como indefinidamente divisível, e os pontos no espaço contínuo descrevem volumes infinitesimais do material (Lai *et al.*, 2009). As propriedades intrínsecas do fluido não podem ser derivadas com uma abordagem macroscópica, mas a natureza qualitativa da dinâmica macroscópica com frequência é insensível aos detalhes das interações microscópicas subjacentes.

O retrato tradicional dos papéis da física macroscópica e microscópica está sendo desafiado com o surgimento de novos problemas multifísicos e multi-escala (Hoekstra *et al.*, 2010). Por exemplo, em sistemas na nanoescala a teoria macroscópica é inadequada, pois a suposição de separação de escalas deixa de ser válida, enquanto que a teoria microscópica pode ser impraticável em termos computacionais. Métodos baseados na escala mesoscópica

conectam as descrições microscópica e macroscópica, fornecendo uma abordagem promissória para este tipo de problema.

2.2 MODELOS NUMÉRICOS PARA SIMULAÇÃO DE FLUIDOS

A abordagem tradicional na investigação de processos físicos baseia-se em observações, experimentos e medições. A quantidade de informação que pode ser obtida desta forma usualmente é limitada e sujeita a erros de medição. Por outro lado, investigações experimentais podem levar muito tempo, às vezes são perigosas, extremamente custosas ou simplesmente impossíveis de serem executadas (Kuzmin, 2010).

Alternativamente, pode ser executado um estudo analítico usando um modelo matemático adequado. Os modelos de fluxo de fluidos mais detalhados são baseados em princípios básicos como a conservação da massa, momento e energia. As equações matemáticas que descrevem esses princípios fundamentais são conhecidas há muito tempo, mas elas permaneceram praticamente inúteis devido à sua complexidade. Até o surgimento dos métodos numéricos e dos computadores digitais só era possível obter soluções analíticas em alguns casos ideais, como fluxo totalmente estacionário com geometrias bastante simples.

Na segunda metade do século vinte ocorreu o surgimento da dinâmica de fluidos computacional (Ferziger & Peric, 2001; Hirsch, 2007; Wesseling, 2009), um novo ramo da matemática aplicada que trata da simulação numérica de fluxo de fluidos. A dinâmica de fluidos computacional (DFC) permite prever o comportamento do fluxo e outros processos de forma qualitativa e quantitativa em alguns casos, usando ferramentas matemáticas e numéricas. No campo da física estatística, o uso de ferramentas computacionais na simulação de líquidos na escala atômica ou molecular é conhecido como simulação computacional de líquidos (Gubbins, 1985; Allen & Tildesley, 1989).

Atualmente, códigos de computador baseados em modelos numéricos são usados rotineiramente para prever uma grande e complexa variedade de fenômenos de fluxo. Um modelo numérico completo é composto por três elementos básicos: o modelo matemático, o método numérico e as ferramentas computacionais (Latt, 2007).

O modelo matemático geralmente consiste em um conjunto de equações diferenciais parciais (com condições de contorno e iniciais), que descrevem a evolução das quantidades físicas observáveis no fluxo, baseados em considerações fenomenológicas e/ou teóricas. Como alternativa, um modelo microscópico pode ser simulado em um computador sem usar uma equação parcial diferencial explicitamente.

O método numérico fornece uma forma matemática de encontrar soluções aproximadas da

equação diferencial parcial, ou de resolver a dinâmica de um modelo microscópico.

As ferramentas computacionais consistem em algoritmos especializados usados para implementar algumas partes do modelo numérico. Utilidades de pré e pós-processamento são requeridas para inicializar uma simulação e para analisar os dados simulados.

2.2.1 MODELOS NUMÉRICOS MACROSCÓPICOS

Tradicionalmente na engenharia, a simulação de fluxo de fluidos, e outros processos físicos, tem seguido uma abordagem macroscópica.

2.2.1.1 MODELO MATEMÁTICO

Na abordagem macroscópica o modelo matemático consiste em um conjunto de equações diferenciais parciais ou integral-diferenciais. Essas equações expressam leis de conservação, derivadas a partir de uma representação macroscópica padrão na qual é assumida a hipótese de meio contínuo e de equilíbrio termodinâmico. O modelo matemático pode incluir simplificações das leis de conservação exatas. Uma vez escolhido o modelo mais adequado para a aplicação desejada (fluxo incompressível, fluxo não viscoso, turbulência, etc.) é definido o método numérico apropriado para solucionar as equações discretamente.

2.2.1.2 PROCESSO DE DISCRETIZAÇÃO

O método de discretização aproxima as equações diferenciais como um sistema de equações algébricas das variáveis, em um conjunto de posições e tempos discretos. Existem vários métodos para discretizar as equações do modelo matemático, sendo os mais relevantes o método das diferenças finitas (MDF), o método dos volumes finitos (MVF) e o método dos elementos finitos (MEF). Se a malha numérica da discretização for muito refinada todos os métodos produzem aproximadamente a mesma solução, porém alguns métodos podem ser mais convenientes para determinados problemas.

As variáveis são calculadas em posições definidas da numérica, que é uma representação discreta do domínio geométrico da solução do problema. A malha divide o domínio da solução em um número finito de subdomínios (elementos, volumes de controle, etc.). Em domínios com geometrias simples é comum usar malhas estruturadas que consistem em famílias de linhas (Figura 2.1), onde os membros de uma mesma família não se cruzam entre si e se cruzam uma única vez com os membros de outras famílias. Malhas estruturadas em bloco, com vários níveis de divisão do domínio da solução, são usadas em geometrias mais complexas.

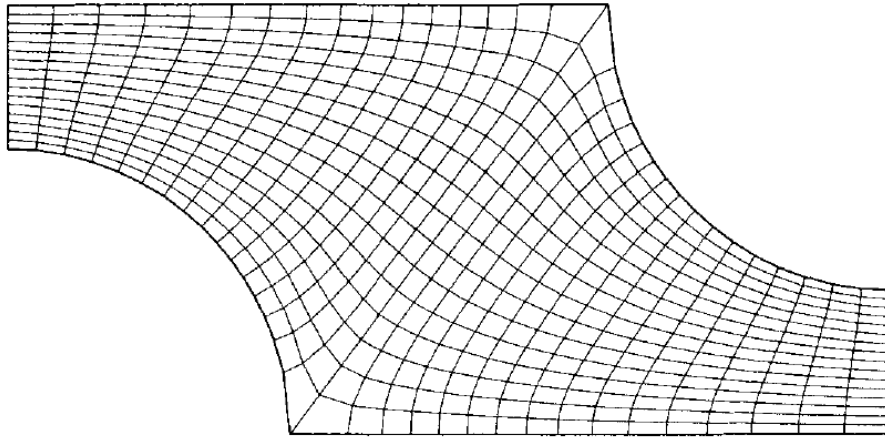


Figura 2.1. Exemplo de uma malha estruturada em 2D (Ferziger & Peric, 2001).

Uma grade desestruturada, como a apresentada na Figura 2.2, é usada em geometrias complexas com qualquer um dos esquemas de discretização das equações, porém ela é mais adequada para o esquema de elementos finitos ou de volumes finitos.

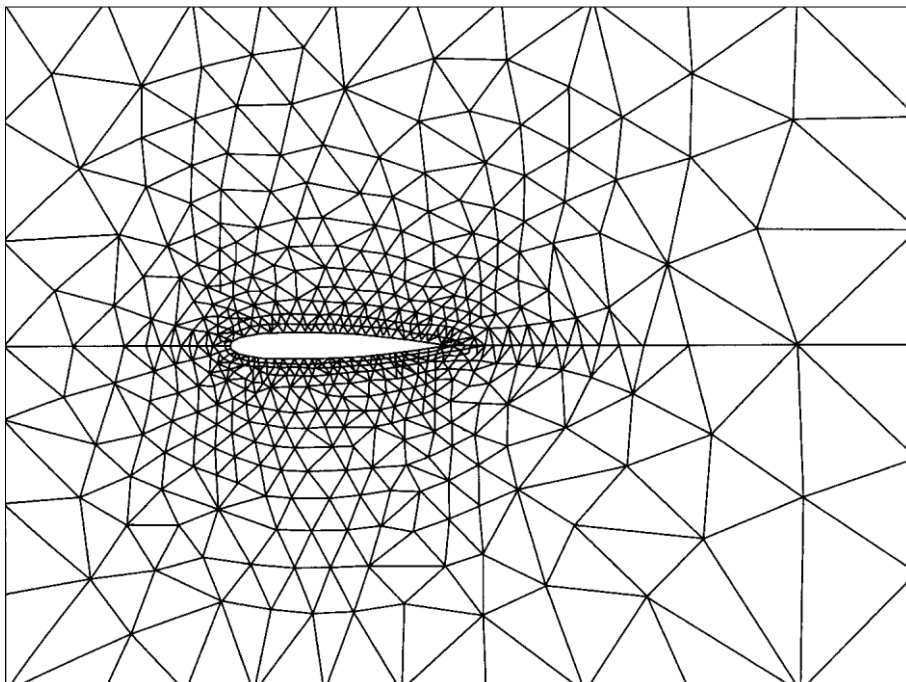


Figura 2.2. Exemplo de uma malha triangular desestruturada em 2D (Zienkiewicz *et al.*, 2005a).

2.2.1.3 MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

O método das diferenças finitas é a técnica mais antiga usada para discretizar equações diferenciais parciais e acredita-se que ela foi introduzida por Euler no século 18 (Ferziger &

Peric, 2001). A partir das aproximações por diferenças finitas, desenvolvidas entre o final da década de 50 e o começo da década de 80, surgiram muitos esquemas numéricos modernos da dinâmica de fluidos computacional. A derivação e implementação deste método é particularmente simples para malhas estruturadas, que são topologicamente equivalentes a uma malha cartesiana uniforme.

O ponto de partida é a equação de conservação na forma diferencial e o domínio da solução é coberto por uma grade numérica. Em cada ponto da malha a equação diferencial é aproximada substituindo as derivadas parciais por aproximações em termos do valor da função nos nós. O resultado é uma equação algébrica para cada nó da malha, onde os valores da variável nos nós e em alguns nós vizinhos são desconhecidos.

O método das diferenças finitas pode ser aplicado em qualquer tipo de malha, porém, ele geralmente é aplicado em malhas estruturadas, onde as linhas da grade servem de coordenadas locais.

Expansão em séries de Taylor ou ajuste polinomial são usados para obter aproximações das derivadas das variáveis em relação às coordenadas. Estes métodos também são usados para interpolar valores em posições que não correspondem a nós da grade.

O método das diferenças finitas é simples e efetivo para malhas estruturadas, mas a restrição para geometrias simples é um inconveniente na simulação de fluxos complexos. Segundo Kuzmin (2010), este método eventualmente perdeu a sua posição de liderança devido à demanda por simulações numéricas em domínios 2D e 3D com forma complexa.

2.2.1.4 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

De acordo com Hirsch (2007) o método dos volumes finitos é amplamente usado na dinâmica de fluidos computacional, devido à sua simplicidade conceitual e facilidade de implementação em malhas arbitrárias, estruturadas ou não.

O domínio da solução é subdividido em um número finito de volumes de controle e as equações de conservação, na sua forma integral, são aplicadas em cada um deles. O valor da variável é calculado no centroide de cada volume de controle, onde existe um nó computacional. Interpolação é usada para expressar os valores da variável na superfície do volume de controle, em termos dos valores nodais. Integrais de volume e de superfície são aproximadas usando uma fórmula de quadratura adequada, obtendo uma equação algébrica para cada volume de controle.

O método do volume finito pode ser usado em qualquer tipo de malha, portanto ele serve para qualquer geometria. Neste caso, a malha só define o contorno do volume de controle e

não precisa estar relacionada com nenhum sistema coordenado. O método é conservativo por construção, contanto que as integrais de superfície (que representam o fluxo convectivo e difusivo) sejam as mesmas para os volumes de controle que compartilham um contorno. Este método requer de três níveis de aproximação: interpolação, diferenciação e integração, o que faz com que seja difícil desenvolver métodos em 3D de terceira ordem ou superior.

2.2.1.5 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

O método dos elementos finitos (Zienkiewicz *et al.*, 2005b) é muito similar ao método dos volumes finitos, pois o domínio também é particionado em um conjunto de volumes discretos, ou elementos finitos. A malha numérica geralmente é desestruturada, formada por triângulos ou quadriláteros em 2D e tetraedros ou hexaedros em 3D.

A característica distintiva do método dos elementos finitos é que geralmente as equações são multiplicadas por uma função de ponderação antes de serem integradas sobre o domínio total. Na forma mais simples do método a solução em cada elemento é aproximada por uma função de interpolação linear de forma, de modo que se garanta a continuidade ao longo do contorno do mesmo. Essa função pode ser construída a partir dos valores na esquina, a função de ponderação usualmente tem a mesma forma da função de interpolação (elementos isoparamétricos). A aproximação anterior é substituída na integral da lei de conservação ponderada e as equações a serem resolvidas são definidas forçando um valor nulo da derivada da integral em relação a cada valor nodal. Isto corresponde a escolher a melhor solução do conjunto de funções permitidas e o resultado em um conjunto de equações algébricas não lineares.

Uma vantagem característica do método dos elementos finitos é a sua habilidade para lidar com geometrias arbitrárias e a literatura dedicada à construção de malhas é prolixa (Zienkiewicz *et al.*, 2005b). Além disso, o método é fácil de analisar matematicamente e possui propriedades excelentes para tratar alguns tipos de equações.

Um inconveniente comum nos métodos que usam malhas desestruturadas é que as matrizes das equações linearizadas não ficam bem estruturadas, quando comparadas com as matrizes de malhas regulares, dificultando uma solução eficiente.

Elementos finitos e volumes finitos têm muito em comum, eles são praticamente equivalentes no caso de polinômios de baixa ordem. Os pontos fortes tradicionais de ambos os métodos são complementares, quando aplicados às equações de fluxo. Por tanto muitos esquemas híbridos têm sido propostos, p. ex., funções de forma de elementos finitos podem ser usadas para interpolar os fluxos em um método de volumes finitos (Ferziger & Peric,

2001).

2.2.2 MODELOS MICROSCÓPICOS

Os métodos de Monte Carlo e os métodos da dinâmica molecular são as abordagens mais usadas na física estatística para a simulação computacional de fluidos. Ambas as técnicas são reconhecidas como ferramentas importantes na ciência, complementando a teoria analítica e os experimentos. A simulação computacional tem um papel particularmente importante no complexo problema da física estatística: explicar as propriedades macroscópicas da matéria que resultam da interação de um grande número de átomos (Gubbins, 1985).

Uma grande variedade de técnicas de modelagem no nível molecular foi desenvolvida ao longo dos anos. Além da dinâmica molecular e do método clássico de Monte Carlo existem técnicas baseadas na mecânica quântica; algumas delas usam a integral de trajetórias com o método de Monte Carlo, outras combinam a dinâmica molecular com a teoria da função de densidade (Rapaport, 2004).

2.2.2.1 MÉTODOS DE MONTE CARLO

O método de Monte Carlo foi desenvolvido por von Neumann, Ulam e Metropolis no final da segunda guerra mundial para estudar a difusão de nêutrons em material fissionável. O nome de “Monte Carlo” foi cunhado por Metropolis em 1947, devido ao frequente uso de números aleatórios nos cálculos (Allen & Tildesley, 1989).

Uma simulação de Monte Carlo tenta acompanhar a dependência no tempo de um modelo cuja mudança ou crescimento não segue uma tendência rigorosamente predefinida (p.ex. de acordo as equações de movimento de Newton), mas uma tendência estocástica, que depende de uma sequência de números aleatórios gerados durante a simulação. Gerando uma nova sequência de números aleatórios a simulação não terá resultados idênticos, mas produz valores que concordam com os obtidos na primeira sequência dentro de um “erro estatístico”.

Muitos problemas se enquadram nesta categoria, p. ex., em percolação, uma malha vazia é preenchida gradualmente colocando uma partícula em uma posição aleatória a cada “avanço do tempo”. Muitas questões surgem acerca dos clusters resultantes, compostos de locais contíguos ocupados por partículas. A determinação do limiar de percolação é especialmente interessante, ele é definido como a concentração crítica de nós ocupados na qual aparece um primeiro “cluster de percolação infinito”. Um cluster de percolação é aquele que vai desde um contorno (macroscópico) de um sistema até o contorno oposto. As propriedades desses clusters são interessantes no contexto de diversos problemas físicos tais como a condutividade de misturas aleatórias, fluxo através de rochas porosas e comportamento de ímãs dissolvidos

(Landau & Binder, 2009).

Números aleatórios também podem ser utilizados para gerar uma sequência de configurações moleculares com uma determinada distribuição, e estimativas das propriedades são obtidas calculando médias aritméticas sobre essas configurações. O método de Monte Carlo só é adequado para tratar propriedades estatísticas e tem a vantagem de poder ser usado em vários conjuntos (*ensembles*), p. ex., o conjunto canônico (temperatura T , número de partículas N e volume V fixos), o grande canônico (temperatura T , potencial químico μ e volume V fixos) ou o isobárico (temperatura T , número de partículas N e pressão p fixas) (Gubbins, 1985).

É claro que na prática os números aleatórios acabam sendo pseudoaleatórios, ou seja, são uma sequência de números produzidos em um computador com um procedimento determinístico adequado a partir de uma semente (*seed*) adequada. Números verdadeiramente aleatórios são imprevisíveis em avanço e produzidos por um processo físico adequado, tal como o decaimento radioativo. Séries de tais números têm sido documentadas, mas o seu uso no método de Monte Carlo seria muito complexo (Binder, 1997).

2.2.2.2 MÉTODOS DA DINÂMICA MOLECULAR

A base teórica da dinâmica molecular (Rapaport, 2004) envolve muitos dos resultados importantes produzidos por os grandes nomes da mecânica analítica: Euler, Hamilton, Lagrange e Newton. Alguns desses resultados contêm observações fundamentais sobre o funcionamento aparente da natureza, outros são reformulações elegantes que geram desenvolvimentos teóricos adicionais. A forma mais simples da dinâmica molecular é a de partículas desestruturadas e envolve pouco mais do que a segunda lei de Newton. Moléculas rígidas requerem o uso das equações de Euler, talvez expressadas em termo de quaterniões de Hamilton. Moléculas com graus de liberdade internos, sujeitas a restrições estruturais, podem envolver o método de Lagrange para incorporar restrições geométricas nas equações dinâmicas.

Na dinâmica molecular as equações de Newton para movimento translacional e rotacional são resolvidas numericamente para cada molécula. As propriedades físicas são obtidas ao calcular a média temporal da função apropriada de posição molecular, orientação, velocidades linear e angular. A dinâmica molecular tem a vantagem de obter tanto as propriedades estáticas quanto as dependentes do tempo, mas o seu uso é restrito ao conjunto microcanônico (energia E , número de partículas N e volume V fixos). Em algumas situações, p. ex., no estudo do equilíbrio gás-líquido ou líquido-líquido, onde a energia livre precisa ser calculada, isto

pode ser uma desvantagem, sendo mais fácil usar o método de Monte Carlo com o ensemble canônico ou o isobárico (Gubbins, 1985).

Líquidos representam o estado da matéria mais frequentemente estudado com dinâmica molecular, isto acontece por razões históricas, pois enquanto gases e sólidos tem bases teóricas bem desenvolvidas não existe uma teoria geral para os líquidos. Para os sólidos, a teoria começa supondo que os elementos atômicos sofrem pequenas oscilações ao redor de posições fixas de uma malha. Nos gases, são assumidos átomos independentes e as interações são introduzidas como perturbações fracas. No caso dos líquidos as interações são tão importantes quanto no estado sólido, mas não existe uma estrutura subjacente ordenada para começar.

Rapaport (2004) menciona as aplicações da dinâmica molecular a problemas com fluidos em três áreas fundamentais: dinâmica de fluidos, transição de fase e fluidos complexos. Na dinâmica de fluidos é simulado fluxo laminar, comportamento de camadas de fluido nos contornos e reologia de fluidos não newtonianos. Os estudos de transição de fase lidam com problemas como coexistência de fases e parâmetros de ordem de fenômenos críticos. Estrutura e dinâmica de vidros, líquidos moleculares, água pura e soluções aquosas, cristais líquidos, interfaces de fluidos, películas e monocamadas são trabalhados na área de fluidos complexos.

2.2.3 MODELOS MESOSCÓPICOS

De acordo com Hoekstra *et al.* (2010), métodos mesoscópicos são candidatos promissórios para ligar efetivamente a escala macroscópica com a microscópica, estendendo a capacidade das simulações numéricas.

Exemplos de métodos mesoscópicos são: o método lattice gás celular autômata, o método lattice Boltzmann, o método das velocidades discretas da equação de Boltzmann, esquemas gás cinéticos, o método de hidrodinâmica de partículas suavizadas e o de dinâmica de partículas dissipativas. Estes métodos foram derivados para a hidrodinâmica macroscópica e não são baseados nas equações de Navier-Stokes, mas estão intimamente ligados à teoria cinética e a equação de Boltzmann.

O método lattice Boltzmann ocupa uma posição de destaque entre os modelos mesoscópicos como uma alternativa para solucionar equações diferenciais parciais não lineares. Modelos lattice Boltzmann têm uma notável habilidade para simular fluidos monofásicos e multifásicos, comportamentos como fluxos não estacionários, separação de fluxo, evaporação, condensação, cavitação e interações com superfícies (Sukop & Thorne,

2006).

O método lattice Boltzmann atrai, cada vez mais, pesquisadores em diversas áreas, que vão desde modelagem de fluxos turbulentos até fluxo em meios porosos. Vários livros de texto a respeito do método foram escritos (Succi, 2001; Wolf-Gladrow, 2005; Sukop & Thorne, 2006; Wagner, 2008), mostrando a necessidade de aprender esta técnica relativamente recente. Novos modelos, investigações de modelos antigos e aplicações de interesse usando o lattice Boltzmann são publicados em artigos a cada mês.

2.2.3.1 MODELOS LATTICE BOLTZMANN

O método lattice Boltzmann (McNamara & Zanetti, 1988; Higuera & Jimenez, 1989; Chen *et al.*, 1992) segue uma abordagem mesoscópica, onde a dinâmica de fluidos é aproximada por interações entre partículas fictícias em uma malha (lattice) regular.

Historicamente, o primeiro método lattice Boltzmann surgiu como resposta a um dos principais inconvenientes dos modelos lattice gás celular autômata (Frisch *et al.*, 1987), qual seja, o ruído estatístico provocado por operações aleatórias. Pouco tempo depois, tornou-se evidente que outras anomalias presentes nos modelos lattice gás podiam ser corrigidas naturalmente usando a abordagem do método lattice Boltzmann. Como resultado, o método evoluiu rapidamente como uma área de pesquisa independente, cada vez mais afastada do lattice gás autômata celular.

He & Luo (1997) mostraram que a equação de lattice Boltzmann pode ser obtida a partir da equação contínua de Boltzmann usando velocidades discretas e uma expansão para número de Mach baixos. O ponto inicial desta derivação é a equação de lattice Boltzmann BGK (Bhatnagar *et al.*, 1954).

Nos últimos anos, o método lattice Boltzmann tem se tornado uma alternativa promissora para a simulação de fluxo de fluidos e a modelagem física de fluidos. Este esquema é particularmente bem sucedido em aplicações de fluxo de fluidos que envolvem dinâmica de interfaces e contornos complexos. Ao contrário dos esquemas numéricos convencionais, baseados na discretização de equações contínuas, o método lattice Boltzmann é baseado em modelos microscópicos e em equações cinéticas mesoscópicas.

A ideia fundamental do método lattice Boltzmann é construir modelos cinéticos simplificados, que incorporem a física essencial dos processos microscópicos ou mesoscópicos, de forma que a média das propriedades macroscópicas obedeça às equações macroscópicas desejadas. A premissa básica para usar este tipo de modelos na simulação de fluxo de fluidos macroscópicos é que a dinâmica macroscópica de um fluido é insensível aos

detalhes subjacentes na física microscópica, pois ela é o resultado do comportamento coletivo de muitas partículas microscópicas no sistema (Chen & Doolen, 1998).

Desenvolvendo uma versão simplificada da equação cinética são evitadas equações complicadas, como a forma completa da equação de Boltzmann, pois não é necessário seguir cada partícula, como é feito nas simulações de dinâmica molecular.

Embora o método lattice Boltzmann seja baseado em um esquema de partículas, o foco principal dele é o comportamento macroscópico médio. A equação cinética fornece muitas das vantagens da dinâmica molecular, tais como uma representação física clara, fácil implementação das condições de contorno e algoritmos totalmente paralelizáveis.

Segundo Chen & Doolen (1998), a natureza cinética do método lattice Boltzmann introduz três características importantes que o diferenciam de outros métodos numéricos. A primeira é que o operador de convecção (ou processo de propagação) do lattice Boltzmann é linear no espaço fase. Esta característica é herdada da teoria cinética e contrasta com os termos de convecção não lineares usados nas representações macroscópicas. A combinação do processo de convecção simples com o processo de relaxação permite recuperar a advecção macroscópica não linear usando expansões multi-escala.

A segunda característica é que a equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis pode ser obtida perto do limite incompressível do método lattice Boltzmann. No método lattice Boltzmann a pressão é calculada usando uma equação de estado. Na simulação numérica direta da equação incompressível de Navier-Stokes, a equação de Poisson é solucionada em um processo que geralmente requer um tratamento especial como iteração ou relaxação.

A terceira característica do método lattice Boltzmann é que ele utiliza um conjunto discreto de velocidades no espaço fase (espaço de posições e momentos lineares) e não um espaço funcional completo como na teoria cinética tradicional. O método lattice Boltzmann só usa duas velocidades e algumas direções de propagação, o que simplifica a transformação que relaciona a função de distribuição microscópica com a macroscópica, pois ela consiste em simples cálculos aritméticos.

2.3 MODELOS NUMÉRICOS NA SIMULAÇÃO DE FLUXO EM MEIOS POROSOS

A escolha de um modelo computacional para simular fluidos é ditada pela natureza do processo físico a ser simulado, pelos objetivos do estudo numérico e pelos recursos disponíveis. Como regra geral, o modelo matemático deve ser tão detalhado quanto possível,

sem ser muito custoso computacionalmente. O uso de um modelo de aplicação universal dificulta o desenvolvimento e implementação de um algoritmo numérico eficiente. Em muitos dos casos, a informação desejada pode ser obtida usando uma versão simplificada que explora o conhecimento *a priori* do padrão do fluxo ou que incorpora correlações empíricas suportadas teórica ou experimentalmente. Portanto, em problemas particularmente difíceis, como no caso da simulação numérica de turbulência, usualmente é usada a seguinte hierarquia: modelos fundamentais, fenomenológicos e empíricos (Kuzmin, 2010).

Segundo Jambhekar (2011), o tratamento de problemas de fluxo em estruturas porosas é altamente dependente da escala considerada. O fluxo em meios porosos é um fenômeno multi-escala típico, que chega a envolver até quatro níveis de descrição básicos (Succi, 2001): microscópico (nível molecular), mesoscópico (nível dos poros), macroscópico (muitos poros, nível do tamanho da amostra) e megascópico (nível do tamanho no campo). Claramente, uma abordagem que envolva todas as escalas está fora de discussão e, portanto foram desenvolvidas técnicas independentes para cada um desses níveis.

Tradicionalmente, nas descrições mega e macroscópica a estrutura interna do meio poroso é ignorada e o conhecimento microscópico é reunido em quantidades médias, como o volume de sólido/fluido, usando procedimentos chamados de homogeneização. Um resultado típico desta análise é que o meio poroso permite o fluxo de fluidos, em função das quantidades médias mencionadas. O nível megascópico é descrito usualmente por um agrupamento de unidades macroscópicas com propriedades de transporte que variam localmente. A relação governante no nível macroscópico é a lei de Darcy ou a lei de Darcy-Forchheimer.

Simulações numéricas de fluxo de fluidos no nível dos poros podem prover estimações acuradas dos parâmetros intrínsecos se houver um modelo acurado da geometria do meio real. Em uma escala em que só alguns poros são observados ainda é possível usar a abordagem macroscópica para descrever os fenômenos de fluxo nos espaços fluidos. Em uma escala maior o campo de visão pode incluir muitos poros, constituindo um desafio para implementar modelos macroscópicos, devido à complexidade arbitrária dos contornos que são definidos por cada partícula sólida individualmente.

Ao contrário dos métodos macroscópicos convencionais o método lattice Boltzmann usa uma equação mesoscópica para determinar a dinâmica macroscópica do fluido. A equação é flexível para a especificação de variáveis em contornos complexos, os contornos sólidos são tratados em termos de simples reflexões das partículas que chegam a um nó na superfície da partícula real.

Na dinâmica molecular o objetivo é simular o comportamento macroscópico de fluidos

reais ao considerar um modelo que descreve às interações microscópicas da melhor forma possível, obtendo equações de estado realistas. O método lattice-Boltzmann só possui relações isotérmicas entre a massa, densidade e pressão, porém a complexidade das interações simuladas pelos métodos microscópicos restringe o número de partículas e o tempo de integração.

Métodos baseados em partículas, como a lattice Boltzmann, não só são vantajosos para tratar problemas discretos em materiais granulares, mas também para problemas contínuos com interfaces internas, problemas de interação fluido-sólido ou modelagem de superfícies livres (Mier Torrecilla, 2010).

Existe um amplo consenso em afirmar que o método lattice Boltzmann está entre os melhores métodos para simular fluxos hidrodinâmicos em meios porosos (Succi, 2001).

2.3.1 MÉTODO LATTICE BOLTZMANN PARA SIMULAR FLUXO EM MEIOS POROSOS

A primeira simulação de lattice Boltzmann em meios porosos foi executada por Succi *et al.* (1989), em uma malha cúbica de baixa resolução (32^3). Essas simulações permitiram avaliar a validade da lei de Darcy e também forneceram estimações razoáveis da permeabilidade em função da porosidade. Cancelliere *et al.* (1990) refinaram a resolução melhorando a representação da microgeometria, definida por uma coleção aleatória de esferas. Apesar da representação grossa das superfícies esféricas, as simulações forneceram uma boa correspondência com resultados analíticos para proporções de sólidos altas e baixas. Os últimos também demonstraram que o regime de porosidade intermediária, inacessível para os cálculos analíticos, conecta suavemente as regiões com baixa e alta proporção de sólidos.

Dardis & McCloskey (1998) desenvolveram um esquema lattice Boltzmann que permite resolver problemas na escala macroscópica ao parametrizar o meio poroso em termos da sua densidade sólida. Fraturas, macroporos e fluxos não estacionários em escalas com números de Reynolds altos podem ser simulados com este tipo de métodos.

Guo & Zhao (2002) desenvolveram um modelo lattice Boltzmann que reproduz as equações macroscópicas para fluxos incompressíveis em meios porosos (lei de Darcy).

2.3.1.1 PROBLEMAS DE ACOPLAMENTO HIDROMECAÂNICO

Esquemas numéricos de acoplamento hidromecânico oferecem uma poderosa ferramenta para simular a deformação de um meio poroso submetido ao fluxo de fluidos. É comum o uso de modelos lattice Boltzmann para a fase líquida enquanto a fase sólida é modelada por

técnicas tradicionais. Haslam *et al.* (2008) e Khan & Aidun (2010) acoplaram o método lattice Boltzmann com o método dos elementos finitos para simular meios porosos deformáveis. Velloso (2010) usou o lattice Boltzmann para modelar a fase líquida enquanto os sólidos foram tratados com método dos elementos discretos. Este tipo de abordagens é usada para investigar relações constitutivas em geometrias complexas e permite validar modelos teóricos.

2.3.1.2 PROBLEMAS EM MEIOS POROSOS NÃO SATURADOS

Modelos lattice Boltzmann multifásicos e multicomponentes, os quais utilizam diferentes equações de estado, tem sido implementados para estudar diversos problemas em meios não saturados. Os resultados ajudam ao entendimento dos fenômenos físicos que acontecem em meios porosos. A seguir são mencionados alguns dos trabalhos nesta área.

Sukop & Or (2003) analisaram o comportamento de interfaces líquido-sólido e líquido-vapor em problemas de percolação em geometrias de meios porosos reais.

Seguindo esta linha de trabalho, Pan *et al.* (2004) usou resultados experimentais para avaliar simulações de fluxo multifásico e multicomponente na escala granular usando geometrias esféricas e modelo proposto por Shan & Chen (1994), os resultados concordaram acuradamente com os resultados experimentais. Galindo-Torres *et al.* (2013) também usou o modelo de Shan & Chen (1994) para estudar os ciclos de molhagem e secagem em solos não saturados, com o objetivo de melhorar a formulação dos modelos constitutivos existentes. Um modelo baseado em medidores de campo foi proposto por Wolf (2005), o método foi implementado para estudar fenômenos de molhabilidade e capilaridade em meios porosos.

2.3.1.3 ESTIMATIVA DE PARÂMETROS EM MEIOS POROSOS SATURADOS

Modelos lattice Boltzmann são adequados para estimar parâmetros em meios porosos saturados. Os resultados deste tipo de simulação numérica são usados para estudar a relação entre os parâmetros macroscópicos e a configuração geométrica do meio poroso. Correlações e modelos constitutivos existentes podem ser avaliados usando esta abordagem.

Com frequência, o método é usado para estimar ou validar os parâmetros de meios porosos reais como solos ou rochas. Neste caso, as geometrias são obtidas usando técnicas como a micro tomografia de raios-X (Rustichelli & Skrzypek, 2010). Os parâmetros obtidos desta forma também podem ser comparados com correlações empíricas ou teóricas, como feito por Chukwudozie (2011).

Os resultados das simulações podem ser comparados com outros métodos, ou modelos de acurácia reconhecida como feito por Aaltosalmi (2005). Outra possibilidade é a validação

experimental (Camargo *et al.*, 2012; Rozas *et al.*, 2012).

Configurações regulares que possuem correlações empíricas ou configurações geradas aleatoriamente são de interesse na análise da dependência dos parâmetros macroscópicos na geometria dos arranjos. Por exemplo, Nabovati & Sousa (2007) desenvolveram correlações entre a porosidade e tortuosidade gerando retângulos aleatórios com diferentes relações de forma.

Simulações em meios porosos também são úteis para avaliar a estabilidade e acurácia da implementação de uma condição de contorno, como feito por Grucelski & Pozorski (2013).

3 EQUAÇÕES MACROSCÓPICAS GOVERNANTES DO PROBLEMA DE FLUXO DE FLUIDOS

Neste capítulo é apresentada a forma básica diferencial das equações de conservação de massa, momento e energia de um fluido. A partir destas expressões a equação de Navier-Stokes para fluidos isotérmicos e incompressíveis é derivada e reformulada em forma adimensional, a qual permite introduzir o conceito de similaridade dinâmica. Finalmente, são apresentadas as equações de Darcy e Darcy –Forchheimer para modelar o fluxo em meios porosos, dando ênfase aos parâmetros do meio poroso que são objeto desta pesquisa.

3.1 NOTAÇÃO UTILIZADA

Ao longo deste trabalho, vetores no espaço euclidiano são representados por caracteres arábicos com uma seta, p.ex., \vec{a} , tensores de ordem superior são denotados com negrito, p.ex., \mathbf{A} . Notação indicial pode ser usada em algumas partes do texto, em expressões mais complexas que envolvem tensores de ordem superior. Nesta notação os subscritos são letras gregas, p. ex., a_α representa um vetor e $A_{\alpha\beta}$ um tensor de segunda ordem. O símbolo de somatório é omitido e a soma deve ser efetuada quando aparecer um índice é repetido duas vezes no mesmo termo. O produto diádico, geralmente denotado com o símbolo \otimes , fica implícito quando não houver algum símbolo indicando operação entre dois vetores, p. ex. $\mathbf{A} = \vec{a}\vec{b}$.

A notação de Euler é utilizada para expressar as derivadas funcionais, portanto, $\partial_x f$ indica a derivada parcial da função f em relação à variável x . Em concordância com as definições anteriores, o operador diferencial nabla é denotado como $\vec{\nabla} = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$. Derivadas de ordem superior são denotadas por múltiplos subscritos, p. ex., ∂_{xy} indica a derivada em relação a y da derivada de f em relação a x . Então, o Laplaciano de uma função f fica denotado como $\nabla^2 f = (\partial_{xx} f + \partial_{yy} f + \partial_{zz} f)$. A grandeza das variáveis utilizadas ao longo do texto é expressa ao lado da definição de cada uma, seguida pelas unidades da variável no sistema internacional, p. ex., pressão p ($\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$, N/m^2). A Tabela 3.1 apresenta vários exemplos de notação das operações entre vetores e tensores em ambas as notações:

Tabela 3.1. Notação usada para operações entre vetores e tensores

	Notação simbólica	Notação indicial
Produto escalar	$\lambda = \vec{a} \cdot \vec{b}$	$\lambda = a_\alpha b_\beta$
Contração dupla de tensores	$\lambda = \mathbf{A} : \mathbf{B}$	$\lambda = A_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta}$
Produto diádico entre vetores	$\mathbf{A} = \vec{a}\vec{b}$	$A_{\alpha\beta} = a_\alpha b_\beta$
Gradiente de uma função escalar f	$\vec{a} = \vec{\nabla}f$	$a_\alpha = \partial_\alpha f$
Divergente de uma função vetorial \vec{a}	$f = \vec{\nabla} \cdot \vec{a}$	$f = \partial_\alpha a_\alpha$
Divergente de um tensor (ordem 2)	$\vec{a} = \vec{\nabla} \cdot \mathbf{A}$	$a_\alpha = \partial_\beta A_{\alpha\beta}$
Divergente de um tensor (ordem 3)	$\mathbf{A} = \vec{\nabla} \cdot \mathbf{T}$	$A_{\alpha\beta} = \partial_\gamma T_{\alpha\beta\gamma}$

3.2 EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

O problema de fluxo de fluidos é descrito geralmente por leis de conservação de quantidades físicas no fluido. Como estas equações não possuem solução conhecida é comum obter soluções aproximadas nas quais só são consideradas as forças dominantes que agem no interior dos fluidos sob condições particulares de fluxo.

O fluxo de fluidos monofásicos em meios porosos é controlado por forças viscosas e por forças inerciais. As equações governantes neste caso podem ser derivadas a partir da equação de Navier-Stokes seguindo uma abordagem macroscópica, resultando na lei de Darcy e na lei de Darcy-Forchheimer. A aplicação de uma ou de outra depende do regime de fluxo que por sua vez é descrito pelo número adimensional de Reynolds.

O estado de um fluido simples é descrito pelas seguintes variáveis macroscópicas: a densidade do fluido ρ (ML^{-3} , kg/m^3 no SI), o vetor de velocidade do fluido \vec{u} (LT^{-1} , m/s), a pressão p ($\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$, N/m^2), a energia E (ML^2T^{-2} , J) e a temperatura T (θ , K).

3.2.1 FORMA GERAL DE UMA EQUAÇÃO DE CONSERVAÇÃO

As equações governantes do problema podem ser derivadas por métodos da física estatística, a partir das equações de movimento do modelo microscópico. Alternativamente, elas podem ser interpretadas como leis de conservação das quantidades físicas envolvidas, escritas em forma integral ou diferencial. A forma diferencial de uma equação de conservação de uma quantidade escalar e por unidade de volume (p. ex. temperatura ou massa por unidade de volume), derivada em um volume de controle, é:

$$\partial_t e + \vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_e = s \quad (3.1)$$

onde $\partial_t e$ indica a variação por unidade de tempo da quantidade física no volume de controle, $\vec{\nabla} \cdot \vec{Q}_e$ representa o balanço resultante do *fluxo* da quantidade física através do volume de controle e s é a contribuição de fontes ou sorvedouros. Se a quantidade conservada for uma grandeza vetorial física \vec{m} (p. ex. momento linear), a equação de conservação assume a forma seguinte:

$$\partial_t \vec{m} + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{Q}_m = \vec{s} \quad (3.2)$$

onde \mathbf{Q}_m é um tensor de segunda ordem.

3.2.2 CONSERVAÇÃO DA MASSA

A lei de conservação da massa é uma expressão geral de natureza cinemática, ou seja, ela é independente da natureza do fluido, ou das forças agindo nele. Ela expressa o fato empírico de que a massa no sistema fluido não pode ser nem criada nem destruída. Na conservação da massa a quantidade física transportada é a densidade e o fluxo difusivo (relativo à agitação molecular) é nulo, pois a massa só pode ser transportada por convecção. Na ausência de fontes ou sorvedouros de massa no volume de controle a equação de convecção- difusão se simplifica para:

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (3.3)$$

3.2.3 CONSERVAÇÃO DO MOMENTO LINEAR

O momento linear é uma quantidade vetorial, definida como o produto do vetor velocidade pela massa, ou pela densidade, quando expressado por unidade de volume. É assumido que o momento linear não sofre difusividade, ou seja, o momento linear não é transportado por agitação térmica molecular. Pela lei de Newton, as fontes da variação do momento são as forças agindo sobre ele. Essas forças consistem em forças externas por unidade de volume e forças internas. Desta forma obtém-se:

$$\partial_t (\rho \vec{u}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \vec{u} + \boldsymbol{\sigma}) = \rho \vec{g}_e \quad (3.4)$$

onde \vec{g}_e (LT^{-2} , m/s^2) é o vetor de aceleração devida às forças externas, o termo $\rho \vec{g}_e$ ($ML^{-2}T^{-2}$, N/m^3) é o somatório das forças externas agindo no volume de controle, expressadas por unidade de volume. As forças internas dependem da deformabilidade do meio fluido e são obtidas a partir do tensor de tensões internas no volume de fluido que se

escreve:

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} \quad (3.5)$$

onde \mathbf{I} é o tensor unitário e $-p\mathbf{I}$ ($\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$, N/m^2) expressa a componente de pressão isotrópica, o sinal negativo indica que as pressões agem para dentro do volume de controle. O tensor desvio $\boldsymbol{\tau}$ ($\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$, N/m^2) representa os esforços cisalhantes viscosos, decorrentes da força de atrito interno entre as camadas de fluido. Assumindo que o fluido é isotrópico e linear (Newtoniano) o tensor de desvio se escreve:

$$\boldsymbol{\tau} = \lambda(\nabla \cdot \vec{u})\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{S} \quad (3.6)$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) \quad (3.7)$$

onde \mathbf{S} (T^{-1} , $\text{m}/(\text{m}\cdot\text{s})$) é o tensor de taxa de deformação, análogo à deformação infinitesimal em mecânica de sólidos, μ ($\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}$, $\text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$) é a viscosidade dinâmica, análoga ao módulo de cisalhamento (G) da teoria da elasticidade linear e o parâmetro λ ($\text{ML}^{-1}\text{T}^{-1}$, $\text{N}\cdot\text{s}/\text{m}^2$) está associado à viscosidade por compressibilidade do fluido. A relação a seguir é válida, exceto para faixas de temperatura ou pressão muito altas:

$$2\mu + 3\lambda = 0 \quad (3.8)$$

A viscosidade cinemática ν (M^2T^{-1} , m^2/s) é definida como:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (3.9)$$

Quando o tensor de desvio para fluidos newtonianos, Eq. (3.6), é introduzido na equação de conservação, Eq. (3.4), é obtida a equação de Navier-Stokes, onde os esforços viscosos agem como uma difusão, com a viscosidade cinemática como coeficiente de difusão.

3.2.4 CONSERVAÇÃO DA ENERGIA

Da análise termodinâmica dos meios contínuos é sabido que o conteúdo de energia de um sistema é medido pela energia interna por unidade de massa E_m (L^2T^{-2} , J/kg). A energia interna é uma variável de estado do sistema, portanto a variação desta durante uma transformação termodinâmica depende só no estado inicial e final do mesmo. Em um fluido, a quantidade conservada é a energia total definida como a soma da energia interna com a energia cinética por unidade de massa:

$$E = E_m + \frac{\vec{u}^2}{2} \quad (3.10)$$

A primeira lei da termodinâmica diz que as fontes que causam variação da energia total são o trabalho das forças agindo no sistema e o calor transmitido ao sistema. A equação de conservação da energia se escreve:

$$\partial_t \rho E + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} E) = \vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T) + \vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{u}) + \rho \vec{g}_e \cdot \vec{u} + q_H \quad (3.11)$$

onde ρE ($\text{ML}^{-1}\text{T}^{-2}$, J/m^3) é a energia total por unidade de volume, o termo $\kappa \vec{\nabla} T$ é a lei de Fourier, que descreve a difusão de calor em um meio em repouso devido a condução térmica molecular, κ ($\text{MLT}^{-3}\theta^{-1}$, $\text{J}/(\text{s} \cdot \text{m} \cdot \text{K})$) é a condutividade térmica. As fontes de energia são: os esforços internos no fluido, $\vec{\nabla} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \vec{u})$, o trabalho das forças por unidade de volume, $\rho \vec{g}_e \cdot \vec{u}$, e as fontes de calor diferentes de condução, q_H , p. ex., radiação ou calor devido a reações químicas.

As leis de conservação representam um sistema de $D+2$ equações para $D+4$ incógnitas em um espaço com D dimensões, pois o momento linear é um vetor. O sistema deve ser completado com equações que relacionam a pressão com a temperatura e a temperatura com a energia.

3.2.5 FLUXOS ISOTÉRMICOS E INCOMPRESSÍVEIS

Em um fluxo isotérmico, o efeito da temperatura é negligenciado e a equação de conservação da energia, Eq.(3.11), não é levada em consideração. Neste caso deve ser desenvolvida uma equação de estado para relacionar a pressão e a densidade no fluido. Por exemplo, pode ser usada uma equação na qual a pressão é proporcional à densidade:

$$p = c_s^2 \rho \quad (3.12)$$

onde c_s é a velocidade do som do sistema.

Em um fluido homogêneo e incompressível a densidade é constante ($\rho = \rho_0$) no tempo. Portanto, a lei de conservação de massa é simplificada para uma expressão que indica que o divergente do campo de velocidades é igual a 0 (*campo solenoidal*):

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \quad (3.13)$$

Esta equação é usada com frequência para definir a incompressibilidade de um fluido. Quando aplicada a simplificação anterior à lei de conservação do momento, Eq. (3.4), obtém-se a equação de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis:

$$\partial_t \vec{u} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = -\frac{1}{\rho_0} \vec{\nabla} p + \nu \nabla^2 \vec{u} \quad (3.14)$$

Aplicando o divergente em ambos os lados da Eq. (3.14) e supondo um campo de velocidade solenoidal, Eq. (3.13), a derivada temporal e o termo de viscosidade são cancelados. A expressão resultante é:

$$\nabla^2 p = -\rho_0 (\vec{\nabla} \vec{u}) : (\vec{\nabla} \vec{u})^T \quad (3.15)$$

que é chamada de equação de Poisson. Esta equação, que é independente do tempo, substitui a equação de conservação de massa para fluidos incompressíveis, Eq.(3.13). No cálculo numérico da evolução de um fluxo compressível a Eq. (3.15) deve ser resolvida com um procedimento iterativo em cada passo discreto. Neste procedimento o valor da pressão é ajustado de forma a manter um campo de velocidades solenoidal durante a evolução no tempo.

3.2.6 FORMULAÇÃO ADIMENSIONAL

Antes de resolver computacionalmente as equações governantes para o fluxo de fluidos é preciso se livrar das unidades físicas das variáveis macroscópicas, o que leva a um conjunto de equações diferenciais parciais que agem sobre variáveis adimensionais. As propriedades destas equações são ajustadas com parâmetros adimensionais genéricos. A título de ilustração as equações de conservação para fluidos isotérmicos incompressíveis (Eq. (3.13) e Eq. (3.14)) serão convertidas a seguir para a forma adimensional. São introduzidas uma escala de comprimento e uma escala de tempo representativas da configuração do fluxo, l_0 e t_0 , respectivamente. O comprimento l_0 pode representar o comprimento de um obstáculo imerso no fluido ou de qualquer dimensão característica da configuração geométrica; o tempo t_0 seria o tempo necessário para que uma partícula de fluido percorra esse comprimento. As variáveis físicas para tempo e posição, t e \vec{r} , são substituídas pelas seguintes variáveis:

$$t^* = \frac{t}{t_0} \quad (3.16)$$

$$\vec{r}^* = \frac{\vec{r}}{l_0} \quad (3.17)$$

Da mesma forma, são realizadas as seguintes mudanças de variáveis, onde a estrela indica a variável no sistema adimensional:

$$\vec{u} = \frac{l_0}{t_0} \vec{u}^* \quad (3.18)$$

$$\partial_t = \frac{1}{t_0} \partial_t^* \quad (3.19)$$

$$\vec{\nabla} = \frac{1}{l_0} \vec{\nabla}^* \quad (3.20)$$

$$p = \frac{\rho_0 l_0^2}{t_0^2} p^* \quad (3.21)$$

Substituindo as equações anteriores na equação de Navier-Stokes para fluidos isotérmicos incompressíveis, Eq. (3.14), obtêm-se a equação adimensional de Navier-Stokes:

$$\partial_i^* \vec{u}^* + (\vec{u}^* \cdot \vec{\nabla}^*) \vec{u}^* = -\vec{\nabla}^* p^* + \frac{1}{Re} \nabla^{2*} \vec{u}^* \quad (3.22)$$

e a equação de continuidade ou condição de campo solenoidal:

$$\vec{\nabla}^* \cdot \vec{u}^* = 0. \quad (3.23)$$

onde Re é o número adimensional de Reynolds, que expressa a relação entre forças inerciais e forças viscosas:

$$Re = \frac{l_0^2}{t_0 \nu}. \quad (3.24)$$

Dois problemas que obedecem à mesma equação de Navier-Stokes e com o mesmo número de Reynolds são dinamicamente similares. O fato de fluxos serem caracterizados pelo seu número de Reynolds e pela lei de similaridade dinâmica foi inicialmente reconhecido por Stokes em 1851 e por Reynolds em 1883. A lei da similaridade dinâmica permite que as soluções de equações em sistemas adimensionais sejam válidas para sistemas reais.

3.3 EQUAÇÃO DE DARCY-FORCHHEIMER

O fluxo de fluidos monofásicos em meios porosos é controlado por duas forças: a força viscosa que age entre as camadas do fluido e a força inercial entre os fluidos e a fase sólida. Como mostrado na Figura 3.1, as forças viscosas são predominantes em um regime de baixo gradiente de pressão ($Re \approx 1.0$), com uma relação linear entre o gradiente de pressão e a velocidade. Nesta região dominada pela viscosidade, equação de Navier-Stokes (negligenciando as forças inerciais) é simplificada para a equação de Stokes, a partir da qual é possível derivar a equação de Darcy, originalmente desenvolvida a partir de observações experimentais em areias uniformes:

$$u_f = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (3.25)$$

onde u_f (LT^{-1} , m/s) é a velocidade de fluxo, o símbolo ∇ (sem seta) representa o gradiente direcional de uma quantidade, neste caso representa a queda de pressão em uma

determinada direção de fluxo, K (L^2, m^2) é a permeabilidade intrínseca do meio poroso. A partir da permeabilidade intrínseca é definida a condutividade hidráulica do meio poroso como:

$$k = K \frac{\gamma}{\mu} \quad (3.26)$$

onde γ ($ML^{-2}T^{-2}, N/m^3$) é o peso específico do fluido e k ($LT^{-1}, m/s$) é a condutividade hidráulica, que é uma medida física macroscópica que descreve a influencia da viscosidade na aderência na superfície dos grãos sólidos.

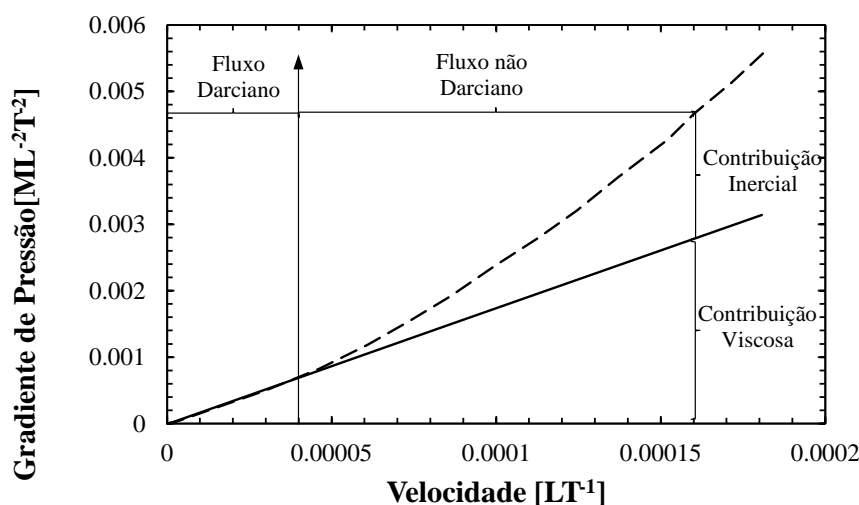


Figura 3.1. Relação entre o gradiente de pressão e a média volumétrica da velocidade para fluxo em meios porosos (modificado de Chukwudozie (2011)).

Quando o gradiente de pressão aumenta as forças inerciais tornam-se dominantes e a relação entre o gradiente e a velocidade deixa de ser linear. Nestas condições a lei de Stokes não consegue representar a influência dos efeitos inerciais. Forchheimer (1914) estendeu a lei de Darcy para este tipo de regime de fluxo ao adicionar um termo quadrático de velocidade, análogo ao termo usado para fluxos turbulentos na mecânica dos fluidos:

$$\nabla p = -\frac{\mu}{K} u_f - \rho \beta u_f^2 \quad (3.27)$$

onde β é uma propriedade do meio chamado de fator de Forchheimer que também será analisado posteriormente. Embora as equações de Darcy e de Darcy-Forchheimer tenham sido desenvolvidas empiricamente, elas podem ser obtidas por uma técnica de média das equações de transporte microscópico sobre um volume de controle de tamanho finito que contém ambas as fases (Whitaker, 1996).

3.3.1 PERMEABILIDADE INTRÍNSECA OU COEFICIENTE DE DARCY

A permeabilidade é determinada no laboratório a partir de ensaios de permeabilidade ou indiretamente a partir de ensaios de adensamento. Este coeficiente é altamente dependente do tamanho, distribuição e conectividade entre os poros. Portanto, a previsão quantitativa e qualitativa desta propriedade requer de um modelo microscópico acurado do meio poroso, além do entendimento da contribuição da microestrutura do meio à distribuição do fluxo.

Os métodos experimentais na escala macroscópica não capturam o efeito da tortuosidade, as irregularidades dos poros e outros detalhes microscópicos, nem fornecem a distribuição interna do fluxo nos poros. Devido às dificuldades para medir a permeabilidade de meios porosos, surgiram algumas relações empíricas para estimá-lo. A abordagem mais simples na microescala é derivada da equação de Hagen-Poiseuille para fluxo em uma tubulação e é conhecida como a equação de Kozeny-Carman. Neste caso o meio é considerado como isotrópico e a permeabilidade é calculada como:

$$K = \frac{\phi^3 d^2}{A^2 (1-\phi)^2} \quad (3.28)$$

onde ϕ é a porosidade do meio, d (L, m) é o diâmetro da partícula e A é um fator geométrico que combina a área superficial específica a_s e a tortuosidade ζ :

$$A = 8\zeta a_s^2 = 72\zeta \quad (3.29)$$

$A = 150$ para a equação de Ergun (1952) e 180 na de Kozeny-Carman.

3.3.2 FATOR BETA OU COEFICIENTE DE FORCHHEIMER

O coeficiente beta de Forchheimer quantifica a magnitude do desvio de um fluxo em relação ao regime linear de Darcy. Geralmente o fator beta é assumido como uma constante e é obtido ao manipular a equação de Darcy-Forchheimer para obter a expressão seguinte:

$$\frac{\nabla p}{\mu u_f} = \frac{1}{K} + \beta \frac{\rho u_f^2}{\mu} \quad (3.30)$$

Esta é a equação de uma linha reta, onde o coeficiente β (L^{-1} , m^{-1}) é a inclinação e o inverso da permeabilidade intrínseca é o intercepto. A expressão adimensional da equação anterior é:

$$\frac{\nabla p d^2}{\mu u_f} = \frac{d^2}{K} + d \beta Re \quad (3.31)$$

onde d é o diâmetro médio do grão. Na prática o fator beta é encontrado com os dados de velocidade e gradiente de pressão para vários números de Reynolds. β também é uma propriedade do meio poroso e é constante no regime de Forchheimer. Uma série de expressões empíricas e analíticas foram propostas para estimar o fator beta e a mais simples delas é a equação de Ergun. A equação de Ergun foi modelada para uma coleção de esferas e para condutos cilíndricos com ajuda de um modelo tubular. Nesta proposta tanto o fator beta quanto a permeabilidade são proporcionais ao diâmetro da partícula e à porosidade do meio. A correlação de Ergun é:

$$\nabla p = 150 \frac{\mu(1-\phi)^2 u_f}{\phi^3 d^2} + 1.75 \frac{\rho(1-\phi) u_f^2}{\phi^3 d} \quad (3.32)$$

β e K são obtidos por similaridade com a equação de Darcy-Forchheimer (Eq. (3.30)):

$$\beta = 1.75 \frac{(1-\phi)}{\phi^3 d} \quad (3.33)$$

$$K = \frac{\phi^3 d^2}{150(1-\phi)^2} \quad (3.34)$$

A equação de Ergun, assim como outras correlações empíricas disponíveis na literatura, foi desenvolvida para um meio poroso particular, portanto ela não é aplicável em qualquer caso. As correlações empíricas tratam o meio poroso como um meio contínuo, e como resultado, tanto a distribuição de fluxo quanto a das partículas não são identificadas. Por outro lado, os métodos numéricos podem resolver as equações de fluxo em cada poro e no contorno dos sólidos, de forma a produzir a distribuição de fluxo no domínio a partir da qual podem ser formuladas ou verificadas correlações empíricas.

3.3.3 TORTUOSIDADE

O fluxo de fluidos através de meios porosos é influenciado por propriedades microscópicas do meio como o volume e a estrutura do espaço poroso. A quantidade de espaços vazios é quantificada pela porosidade do meio enquanto que o percurso complexo por estes espaços é quantificado com uma propriedade conhecida como tortuosidade, definida por Kozeny-Carman como o seguinte fator:

$$\zeta = \left(\frac{L_e}{L_m} \right)^2 \quad (3.35)$$

L_m é o comprimento do meio poroso em uma direção enquanto que L_e é o comprimento realmente percorrido pelas partículas de fluido dentro do meio poroso. Maior tortuosidade de

um meio poroso implica em menor permeabilidade e em fatores betas maiores, ou seja, a tortuosidade não está presente na equação de Darcy-Forchheimer, mas fica refletida no coeficiente de permeabilidade e no fator beta de Forchheimer. Não há métodos estabelecidos para medir a tortuosidade, porém ela tem sido estimada experimentalmente usando ressonância magnética nuclear (Rigby e Gladden, 1996) e numericamente a partir de simulações de fluxo (Nabovati & Sousa, 2007).

4 MODELO LATTICE BOLTZMANN PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO DE FLUIDOS

Os modelos lattice-Boltzmann são métodos para simulação de fluxo de fluidos e de uma grande variedade de processos que podem ser descritos no nível macroscópico com equações diferenciais parciais. Neste capítulo é apresentado o modelo lattice Boltzmann BGK, mediante uma expansão multi-escala é demonstrado que o método recupera adequadamente a hidrodinâmica macroscópica de um fluido a partir de uma descrição mesoscópica, o que o valida para simular este tipo de problemas. Condições de contorno e acurácia do método também são analisadas.

4.1 VARIÁVEIS DISCRETAS

Os problemas da dinâmica de fluidos possuem um número infinito de graus de liberdade, pois as quantidades consideradas são campos espacialmente estendidos. Por sua vez, os computadores manipulam um número finito de variáveis e as representam com uma precisão finita. Então, os campos estendidos espacialmente devem ser substituídos por uma série de valores escalares que são apropriados para a investigação numérica do problema em um processo chamado *de discretização espacial* do problema.

Uma forma de discretizar o espaço é dividi-lo em células. Neste caso, uma representação numérica do fluido consiste de uma série de números que representam o valor médio de uma variável do fluido em uma célula.

Outra abordagem consiste em substituir os campos espacialmente estendidos pelo seu valor em uma dada população finita de pontos no espaço. O método de Lattice-Boltzmann segue este ponto de vista em que o espaço é discretizado em uma malha regular com espaçamento fixo entre os pontos.

Para uma sub-amostra cúbica de um sistema tridimensional de tamanho $l_0 \times l_0 \times l_0$ (Figura 4.1) o sistema coordenado é definido de forma a se ter um vértice do cubo posicionado na origem e o vértice oposto na posição $l_0\vec{e}_1 + l_0\vec{e}_2 + l_0\vec{e}_3$. Neste caso, l_0 pode representar um comprimento característico do domínio geométrico do problema, como mencionado na adimensionalização da equação de Navier-Stokes.

O cubo é representado numericamente por N pontos \vec{r}_{ijk} , com $i, j, k = 0 \dots N - 1$, posicionados em $\vec{r}_{ijk} = i\vec{e}_1\delta_x + j\vec{e}_2\delta_x + k\vec{e}_3\delta_x$. Esses pontos são chamados de pontos da malha. O espaçamento da malha $\delta_x = l_0 / (N - 1)$ que é igual à distância entre dos pontos vizinhos da

malha. Um campo escalar $\alpha(\vec{r}, t)$ é representado por N^3 valores $\alpha_{ijk}(t)$, que são aproximações numéricas de $\alpha(\vec{r}_{ijk}, t)$.

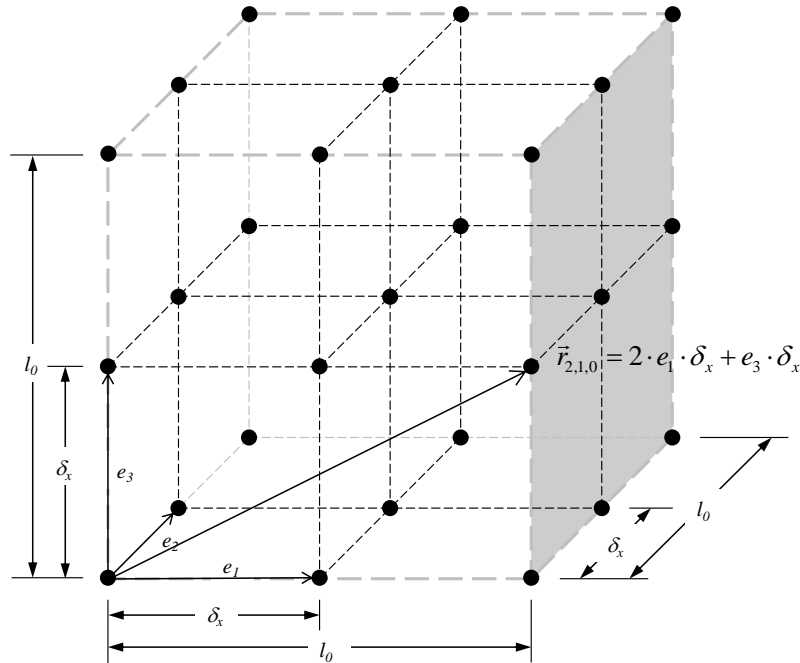


Figura 4.1. Discretização espacial de uma sub-amostra cúbica em um modelo lattice Boltzmann.

O eixo temporal também é discretizado com um conjunto finito de passos de tempo distribuídos em intervalos iguais tal que $t_{N_t} = N_t \delta_t$. Na representação numérica adotada aqui a variável dependente do tempo $f(t)$ é substituída por uma aproximação numérica. Finalmente, a expressão $f(\vec{r}_{ijk}, t_{N_t})$ é usada para representar a aproximação numérica (e não o valor exato) de f na posição \vec{r}_{ijk} no passo de tempo t_{N_t} .

4.2 MODELOS LATTICE BOLTZMANN

Os modelos lattice Boltzmann são baseados nos modelos lattice Gás Autômata Celular (LGAC), ambos utilizam a mesmo tipo de malha e executam a colisão da mesma forma. Porém, os modelos LGAC usam partículas individuais enquanto que o lattice Boltzmann usa funções contínuas de distribuição de partículas que interagem localmente se propagando para os nós vizinhos logo após da colisão (Wolf-Gladrow, 2005).

As fórmulas do modelo lattice Boltzmann são derivadas teoricamente por meio de diferentes abordagens. O método pode ser visto como uma versão contínua dos modelos

lattice gás autômata celular ou derivado da equação contínua de Boltzmann (He & Luo, 1997). A equação de Boltzmann considera o movimento de moléculas em um gás e descreve seu comportamento estatisticamente no nível contínuo. Por este motivo, a teoria por trás da equação de Boltzmann é frequentemente chamada de teoria cinética. Por extensão, o método de lattice Boltzmann às vezes é chamado de esquema cinético de malha e as quantidades estudadas de variáveis cinéticas.

Cada nó de uma simulação de lattice Boltzmann tem um conjunto de q variáveis f_i , $i = 0 \dots q - 1$, chamadas de funções de distribuição de partículas. Cada uma dessas funções é responsável por levar a informação de um nó para os vizinhos, a posição do nó vizinho é definida por um vetor \vec{c}_i que aponta na direção do nó da malha. O vetor \vec{c}_i é característico da malha e não depende do espaço ou do tempo. A Figura 4.2 apresenta um modelo bidimensional com nove direções denotado como D2Q9. A seguinte regra geral para a evolução de um modelo lattice Boltzmann mostra o papel do vetor \vec{c}_i :

$$f_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t + 1) - f_i(\vec{r}, t) = \Omega_i \quad (4.1)$$

onde os termos da esquerda indicam a propagação das distribuições de partículas na direção do vetor \vec{c}_i e Ω_i é o operador de colisão, que descreve como interagem os q valores de f_i definidos no mesmo nó em um passo de tempo t . A Eq. (4.1) está escrita em unidades de malha, nas quais tanto o espaçamento entre dois nós adjacentes como os intervalos de tempo entre uma iteração e a subsequente são unitários. Esta abordagem difere da usada comumente em outros esquemas numéricos nos quais é usado um sistema de unidades adimensional (item 3.2.6).

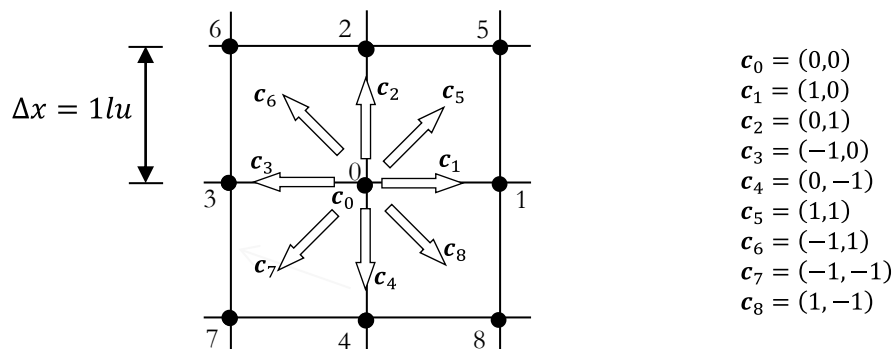


Figura 4.2. Malha bidimensional com 9 velocidades (D2Q9) (Durand *et al.*, 2012).

As variáveis macroscópicas densidade (ρ) e velocidade (\vec{u}) são definidas localmente

como momentos das funções distribuição:

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{q-1} \vec{c}_i f_i \quad (4.2)$$

$$\rho = \sum_{i=0}^{q-1} f_i \quad (4.3)$$

Para manter a notação mais simples a faixa de variação da variável i não se fará explícita quando apareça uma somatória de todas as funções de distribuição, p. ex., a soma dos q elementos da variável f_i , $\sum_{i=0}^{q-1} f_i$ é escrita como $\sum_i f_i$. O operador de colisão mais usado é chamado de operador de BGK e implementa uma dinâmica de relaxação para um equilíbrio local com um parâmetro de relaxação ω :

$$\Omega_i^{BGK} = \omega(f_i - f_i^{eq}) \quad (4.4)$$

O parâmetro de relaxação ω está diretamente ligado à viscosidade cisalhante dinâmica do fluido pela equação:

$$\nu = c_s^2 \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.5)$$

O equilíbrio local é definido como:

$$f_i^{(eq)} = \rho t_i \left(1 + \frac{1}{c_s^2} \vec{c}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2c_s^4} \mathbf{Q}_i : \vec{u}\vec{u} \right) \quad (4.6)$$

que é uma aproximação da função de Maxwell-Boltzmann para temperatura constante e número Mach baixo. Esta função descreve a distribuição das velocidades das partículas em um gás. O tensor \mathbf{Q} é definido como

$$\mathbf{Q} = \vec{c}_i \vec{c}_i - c_s^2 \mathbf{I} \quad (4.7)$$

a constante c_s é a velocidade do som do modelo e este parâmetro, assim como os q parâmetros t_i , são constantes da malha. Conceitualmente, a constante c_s pode ser escolhida livremente adotando-se um valor do peso da partícula no repouso t_0 que permita recuperar algumas simetrias da malha. Na prática $c_s^2 = 1/3$ é o valor numericamente mais estável, portanto é o mais usado. O modelo de lattice Boltzmann é definido por dois ingredientes básicos: os detalhes do operador de colisão Ω_i e a estrutura da malha, definida pelas constantes q, c_s, \vec{c}_i e t_i .

4.3 ESTRUTURA DA MALHA

Uma malha (lattice) com q direções discretas em um nó, definida em um espaço com D

dimensões é comumente identificada pelo nome de “malha DDQq”. A simetria da malha é importante para recuperar assintoticamente as equações macroscópicas, p. ex., um tensor de quarta ordem, formado pelo produto dos vetores da malha, faz parte do termo de advecção e deve ser isotrópico, outras restrições serão explicadas na expansão de Chapman-Enskog (item 4.4.1.1). Em fluxos isotérmicos basta considerar estruturas nas quais os vetores da malha \vec{c}_i apontam para os nós na vizinhança imediata, chamados de vizinhos mais próximos. Os pesos t_i são usados para considerar vetores de comprimentos diferentes. Toda malha tem três tipos de pesos: o peso correspondente ao vetor de velocidade zero $\vec{c}_i = 0$, pesos para baixas velocidades e pesos para as altas velocidades. Em 2D as baixas velocidades são aquelas paralelas aos lados da malha e tem comprimento igual a 1, enquanto que as altas velocidades seguem direções diagonais e tem comprimento igual a $\sqrt{2}$. A Tabela 4.1 resume as variáveis da estrutura mais utilizada na simulação de fluxos isotérmicos em duas dimensões, a D2Q9 (Figura 4.2).

Tabela 4.1. Estrutura da malha D2Q9

$$\begin{aligned}
 c_s^2 &= \frac{1}{3} \\
 \vec{c}_0 &= (0,0) \rightarrow t_i = \frac{4}{9} \\
 \vec{c}_1 &= (1,0); \vec{c}_2 = (0,1); \vec{c}_3 = (-1,0); \vec{c}_4 = (0,-1) \rightarrow t_i = \frac{1}{9} \\
 \vec{c}_5 &= (1,1); \vec{c}_6 = (-1,1); \vec{c}_7 = (-1,-1); \vec{c}_8 = (1,-1) \rightarrow t_i = \frac{1}{36}
 \end{aligned}$$

4.4 ANÁLISE MULTI-ESCALA DE CHAPMAN-ENSKOG

Derivar a equação de Navier-Stokes a partir da equação de Boltzmann é de interesse fundamental e prático, p. ex., ao aplicar alguns modelos dos processos de colisão microscópica são obtidas fórmulas explícitas para os coeficientes de transporte. A derivação da equação de Navier-Stokes a partir da equação de Boltzmann é conhecida como a expansão de Chapman-Enskog. Este método foi desenvolvido por Chapman e Enskog entre 1910 e 1920.

4.4.1 EXPANSÃO EM SÉRIES COM SEPARAÇÃO DE ESCALAS

Neste item é inspecionada a equação de evolução dos métodos de lattice-Boltzmann (Eq. (4.1)) por meio de uma expansão de Taylor truncada e uma análise multi-escala. Os resultados

são usados para mostrar que um método lattice-Boltzmann específico resolve assintoticamente a dinâmica da equação diferencial parcial macroscópica desejada.

4.4.1.1 SIMETRIAS DA MALHA

Para que a malha seja adequada para uma simulação de lattice Boltzmann, um conjunto de condições de simetria deve ser verificado para que a simulação reproduza assintoticamente a equação diferencial parcial. Por exemplo, o modelo BKG para fluidos requer uma constante c_s e um conjunto de pesos (t_i) para as velocidades da malha (\vec{c}_i) que verifiquem as seguintes relações:

$$\begin{aligned} (a) \sum_i t_i = 1 \quad (c) \sum_i t_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (e) \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) \\ (b) \sum_i t_i c_{i\alpha} = 0 \quad (d) \sum_i t_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = 0 \quad (f) \sum_i t_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} c_{i\epsilon} = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

Notação indicial foi usada nas expressões anteriores para indicar as componentes dos tensores, onde foi introduzido o tensor simétrico delta de Kronecker ($\delta_{\alpha\beta}$), que é equivalente à matriz identidade (I), portanto a expressão $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta}$ equivale a $\sum_i \vec{c}_i \vec{c}_i = c_s^2 I$. Observa-se que na notação indicial é omitido o símbolo do somatório. A repetição do subscrito i indica a soma sobre os tensores resultantes das operações indicadas pela notação indicial, a qual usa os algarismos gregos. Como dito anteriormente, existe liberdade na escolha do valor de c_s , em deduções posteriores será mostrado que este parâmetro é igual à velocidade do som em uma simulação.

As equações (4.8) também podem ser vistas como propriedades de ortogonalidade entre vetores da malha definidos no espaço vetorial \mathbb{R}^q . O primeiro desses vetores de malha é chamado de \mathcal{C}^0 e é definido como:

$$\mathcal{C}_i^0 = 1 \quad \forall i = 0 \dots q. \quad (4.9)$$

O segundo é um conjunto de d vetores de malha definidos como:

$$\mathcal{C}_{i,\alpha}^1 = c_{i\alpha} \text{ para } \alpha = 0 \dots D-1 \text{ e } i = 0 \dots q. \quad (4.10)$$

Por último, é introduzido um conjunto de D^2 vetores de malha:

$$\mathcal{C}_{i,\alpha\beta}^2 = Q_{i\alpha} \text{ para } \alpha, \beta = 0 \dots D-1 \text{ e } i = 0 \dots q, \quad (4.11)$$

onde o tensor simétrico $Q_{i\alpha} = \mathbf{Q}$ foi definido na Eq. (4.7) e os vetores $\mathcal{C}_{i\alpha\beta}^2$ cumprem a relação

$\mathcal{C}_{i\alpha\beta}^2 = \mathcal{C}_{i\beta\alpha}^2$ devido à simetria do tensor, logo a Eq. (4.11) define só $D(D+1)/2$ vetores

independentes em vez de D^2 .

Define-se aqui o produto escalar entre dos vetores \vec{a} e \vec{b} no espaço \mathbb{R}^q como sendo:

$$\langle \vec{a} | \vec{b} \rangle = \sum_i t_i a_i b_i. \quad (4.12)$$

Com isto, é fácil concluir que os vetores de malha definidos na Eq. (4.8) são ortogonais entre si, mas não necessariamente unitários:

$$\langle \mathcal{C}^0 | \mathcal{C}_\alpha^0 \rangle = 0 \quad (4.13)$$

$$\langle \mathcal{C}^0 | \mathcal{C}_{\alpha\beta}^2 \rangle = 0 \quad (4.14)$$

$$\langle \mathcal{C}_\alpha^1 | \mathcal{C}_{\beta\gamma}^2 \rangle = 0 \quad (4.15)$$

$$\langle \mathcal{C}^0 | \mathcal{C}^0 \rangle = 1 \quad (4.16)$$

$$\langle \mathcal{C}^1 | \mathcal{C}^1 \rangle = c_s^2 \mathbf{I} \quad (4.17)$$

$$\langle \mathcal{C}_{\alpha\beta}^2 | \mathcal{C}_{\gamma\delta}^2 \rangle = c_s^4 (\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) \quad (4.18)$$

O fato de a Eq. (4.18) expressar uma relação de ortogonalidade entre todos os vetores da família \mathcal{C}^2 fica claro quando o tensor resultante de um produto escalar entre estes vetores é contraído com um tensor arbitrário $T_{\gamma\delta}$:

$$\langle \mathcal{C}_{\alpha\beta}^2 | \mathcal{C}_{\gamma\delta}^2 \rangle T_{\gamma\delta} = c_s^4 (T_{\alpha\beta} + T_{\beta\alpha}). \quad (4.19)$$

O espaço vetorial com q dimensões introduzido neste capítulo é de interesse teórico e técnico. Para explicar isto são introduzidas as funções de distribuição de partículas não ponderadas:

$$h_i = f_i / t_i \quad (\text{sem soma implícita em } i) \quad (4.20)$$

As funções são interpretadas como vetores em \mathbb{R}^q , portanto o subscrito i pode ser ignorado. As variáveis hidrodinâmicas em um modelo lattice-Boltzmann, introduzidas como momentos das funções de distribuição nas Eq. (4.2) e Eq. (4.3), podem ser reinterpretadas como projeções de h sobre os vetores da malha. Por exemplo, a densidade de massa é calculada como $\rho = \langle \mathcal{C}^0 | h \rangle$ e o momento como $\rho \vec{u} = \langle \mathcal{C}^1 | h \rangle$. Este ponto de vista é útil porque os termos que desaparecem nos cálculos algébricos a seguir podem ser interpretados como projeções entre vetores ortogonais.

A pesar de as equações (4.8) serem fundamentais para os modelos de lattice Boltzmann BGK existem modelos Boltzmann que trabalham em malhas com simetrias fracas. Por

exemplo, o modelo apresentado por d’Humières *et al.* (2001), trabalha bem em uma malha com treze velocidades em três dimensões (D3Q13). Por outro lado, modelos chamados de térmicos requerem propriedades de simetria adicionais, e devem usar um conjunto de velocidades que inclui interações com os vizinhos ao lado dos vizinhos mais próximos.

4.4.1.2 EXPANSÃO MULTIESCALA

Os modelos Lattice-Boltzmann com um operador de colisão genérico (Ω_i) são definidos pela equação de evolução Eq. (4.1). O lado esquerdo desta equação pode ser expandido em uma série de Taylor de segunda ordem:

$$\begin{aligned}\Omega_i &= f_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t+1) - f_i(\vec{r}_i, t) \\ &\approx (\partial_t + \vec{\nabla} \cdot \vec{c}_i) f_i + \frac{1}{2} (\partial_t^2 + 2\partial_t \vec{\nabla} \cdot \vec{c}_i + \vec{\nabla} \vec{\nabla} : \vec{c}_i \vec{c}_i) f_i\end{aligned}\quad (4.21)$$

Para relacionar a equação de lattice-Boltzmann com alguma equação diferencial parcial é necessário separar formalmente escalas de tempo diferentes. Desta forma os fenômenos físicos que acontecem nas diferentes escalas são discutidos separadamente, contribuindo individualmente para as equações de movimento finais. Para conseguir isto a derivada no tempo é expandida em termos de um parâmetro ϵ :

$$\partial_t = \epsilon \partial_{t1} + \epsilon^2 \partial_{t2} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (4.22)$$

onde o parâmetro ϵ é a quantidade pequena ($|\epsilon| \ll 1$), que é frequentemente identificado como o número adimensional de Knudsen (Kn):

$$Kn = \frac{\lambda_f}{l_0} \quad (4.23)$$

onde λ_f é o caminho livre médio de uma molécula de gás e l_0 é uma escala de comprimento macroscópica. Esta terminologia é motivada por uma análise dimensional da equação de Boltzmann. Como resultado da expansão multi-escala truncada a equação de lattice Boltzmann (e a de Navier-Stokes) só é válida para fluxos com número de Knudsen baixos não sendo adequada para gases diluídos ou microfluidos. O símbolo ϵ também pode ser considerado como uma identificação (*label*) da ordem de magnitude dos erros relativos de cada termo, sendo dispensado ao final dos cálculos fazendo $\epsilon=1$ (Wolf-Gladrow, 2005).

A derivada espacial não é expandida além do termo de primeira ordem:

$$\vec{\nabla} = \epsilon \vec{\nabla}^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (4.24)$$

A função de distribuição é expandida de forma similar começando com uma contribuição

de ordem zero:

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (4.25)$$

Da expansão em séries de Taylor Eq. (4.21), conclui-se que o termo de colisão Ω_i não possui contribuições constantes em relação ao parâmetro ϵ , ou seja, $\Omega_i^{(0)} = 0$, então:

$$\Omega_i = \epsilon \Omega_i^{(1)} + \epsilon^2 \Omega_i^{(2)} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (4.26)$$

Uma expansão até os termos de segunda ordem em relação ao parâmetro ϵ parece ser suficiente para recuperar a equação de Navier-Stokes, mas na dinâmica do lattice Boltzmann aparecem termos de ordem superior, conhecidos como termos de Burnett, que também podem ser calculados. Substituindo as expansões em escalas separadas, Eqs. (4.22), (4.24), (4.25) e (4.26), na expansão em séries de Taylor, e negligenciando os termos de ordem $\mathcal{O}(\epsilon^3)$, chega-se na versão em escalas separadas da equação de evolução:

$$\epsilon \Omega_i^{(1)} + \epsilon^2 \Omega_i^{(2)} = (\epsilon \partial_{t1} + \epsilon^2 \partial_{t2} + \epsilon \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{c}_i + \frac{1}{2} \epsilon^2 \partial_{t2}^2 + \epsilon^2 \partial_{t1} \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{c}_i + \frac{1}{2} \epsilon^2 \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_1 : \vec{c}_i \vec{c}_i)(f_i^{(0)} + f_i^{(1)}) \quad (4.27)$$

4.4.1.3 LEIS DE CONSERVAÇÃO

As variáveis macroscópicas do fluxo são definidas como momentos das funções de distribuição de partículas. Isto leva à definição do momento escalar de ordem zero ρ , momento vetor de primeira ordem \vec{j} e momento tensor de segunda ordem Π :

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (4.28)$$

$$\vec{j} = \sum_I \vec{c}_i f_i \quad (4.29)$$

$$\Pi = \sum_i \mathcal{Q}_i f_i \quad (4.30)$$

A dinâmica do fluxo pode ser expressa as leis de conservação aplicadas a alguns desses momentos. A conservação global de uma quantidade macroscópica é expressa localmente por um invariante de colisão, p. ex., a conservação de massa em um fluido é forçada pela conservação de massa durante a colisão entre partículas. O invariante de colisão significa que a projeção do operador de colisão não ponderado (Ω_i / t_i) sobre os correspondentes vetores é nula.

Balço do momento de ordem zero (conservação da massa): A conservação da massa é garantida pelo invariante local de colisão

$$\sum_i \Omega_i = 0 \quad (4.31)$$

e pela seguinte condição:

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{(0)} \quad (4.32)$$

Desta forma se entende intuitivamente que as variáveis conservadas são momentos das funções de distribuição de partículas de ordem zero ($f^{(0)}$), como o operador de colisão age sobre as distribuições $f^{(1)}$, as variáveis conservadas permanecem iguais durante a colisão. Alternativamente, as Eqs. (4.31) e (4.32) podem ser vistos como simples requisitos técnicos para achar um esquema de lattice-Boltzmann que leve à equação de Navier-Stokes.

Se o invariante de colisão, Eq. (4.31), é expandido separadamente sobre as escalas ϵ e ϵ^2 , partindo da Eq. (4.27), chega-se na seguinte expressão para a escala ϵ :

$$\begin{aligned} \sum_i \Omega_i^{(1)} &= \partial_{t1} \sum_i f_i^{(0)} + \bar{\nabla}_1 \cdot \sum_i \bar{c}_i f_i^{(0)} \\ \sum_i \Omega_i^{(1)} &= \partial_{t1} \rho + \bar{\nabla}_1 \cdot \bar{j}^{(0)} = 0 \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde foi aplicado o somatório e o momento das funções de ordem zero, Eq. (4.32), foi substituído. No caso da escala ϵ^2 alguns termos são eliminados por ficarem com o pequeno parâmetro no numerador.

$$\begin{aligned} \sum_i \Omega_i^{(2)} &= \partial_{t1} \sum_i f_i^{(1)} + \partial_{t2} \sum_i f_i^{(0)} + \bar{\nabla}_1 \cdot \sum_i \bar{c}_i f_i^{(1)} + \frac{1}{2} \partial_{t1}^2 \sum_i f_i^{(0)} + \bar{\nabla}_1 \cdot \sum_i \bar{c}_i f_i^{(0)} \\ &\quad + \frac{1}{2} \bar{\nabla}_1 \bar{\nabla}_1 : \sum_i (\mathcal{Q}_i + c_s^2 \mathcal{I}) f_i^{(0)} \end{aligned} \quad (4.34)$$

Ao aplicar o somatório e substituir os momentos Eqs. (4.28), (4.29) e (4.30), chega-se na expressão seguinte:

$$\sum_i \Omega_i^{(2)} = \partial_{t2} \rho + \bar{\nabla}_1 \cdot \bar{j}^{(1)} + \frac{1}{2} \partial_{t1}^2 \rho + \partial_{t1} \bar{\nabla}_1 \cdot \bar{j}^{(0)} + \frac{1}{2} \bar{\nabla}_1 \bar{\nabla}_1 : \mathbf{\Pi}^{(0)} + \frac{1}{2} c_s^2 \nabla_1^2 \rho = 0 \quad (4.35)$$

que também é igual a zero pela condição de invariante. Ao combinar as expressões para as duas escalas, Eq. (4.33) e (4.35), elimina-se o termo de segunda ordem da derivada temporal ($\partial_{t1}^2 \rho$) ficando a expressão:

$$\partial_{t2} \rho + \bar{\nabla}_1 \cdot \bar{j}^{(1)} + \partial_{t1} \bar{\nabla}_1 \cdot \bar{j}^{(0)} + \frac{1}{2} \bar{\nabla}_1 \bar{\nabla}_1 : \mathbf{\Pi}^{(0)} + \frac{1}{2} c_s^2 \nabla_1^2 \rho = 0 \quad (4.36)$$

Conservação do momento de primeira ordem (momento linear): Um termo fonte de

primeira ordem é adicionado ao momento de primeira ordem:

$$\vec{F} = \epsilon \vec{F}^{(1)} \quad (4.37)$$

Este termo fonte representa uma força externa agindo sobre o fluido. Dependendo dos requerimentos específicos para o modelo numérico um termo fonte correspondente pode ainda ser adicionado ao momento de ordem zero. Isto permitiria, por exemplo, chegar à equação de advecção-difusão com termos fonte. O invariante de colisão de primeira ordem neste caso é:

$$\sum_i \vec{c}_i \Omega_i = \vec{F} \quad (4.38)$$

Analogamente ao momento de ordem zero, o momento de primeira ordem só deverá depender da função de distribuição de partículas de ordem zero. Um termo de correção devido à força \vec{F} deve ser adicionado por motivos que ficarão claros mais adiante:

$$\vec{j} = \sum_i \vec{c}_i f_i = \sum_i \vec{c}_i f_i^{(0)} - \frac{\vec{F}}{2} \quad (4.39)$$

A contribuição da escala ϵ à equação anterior é:

$$\sum_i \vec{c}_i \Omega_i^{(1)} = \partial_{t1} \sum_i \vec{c}_i f_i^{(0)} + \vec{\nabla}_1 \cdot \sum_i (\mathbf{Q}_i + c_s^2 \mathbf{I}) f_i^{(0)} \quad (4.40)$$

Substituindo os somatórios pelos momentos das funções obtém-se:

$$\sum_i \vec{c}_i \Omega_i^{(1)} = \partial_{t1} \vec{j}^{(0)} + \vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{\Pi}^{(0)} + c_s^2 \vec{\nabla}_1 \rho = \vec{F}^{(1)} \quad (4.41)$$

Aplicando o operador gradiente na expressão anterior e reorganizando os termos, obtém-se:

$$\partial_{t1} \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{j}^{(0)} = \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{F}^{(1)} - \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_1 : \mathbf{\Pi}^{(0)} - c_s^2 \nabla_1^2 \rho \quad (4.42)$$

A Eq. (4.39) é operada da mesma forma para chegar à seguinte expressão para a escala ϵ :

$$\vec{\nabla}_1 \cdot \vec{j}^{(1)} = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{F}^{(1)} \quad (4.43)$$

As Eqs. (4.43) e (4.42) são substituídas na expressão do balanço de massa, Eq. (4.36), cancelando a derivada temporal:

$$\partial_{t2} \rho = 0 \quad (4.44)$$

Ou seja, a expressão do invariante de colisão para o balanço de massa, Eq. (4.33), reúne todas as contribuições das derivadas temporais, portanto pode ser expressa como:

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{j}^{(0)} = 0. \quad (4.45)$$

que é a equação de continuidade ou de balanço de massa. O termo de força adicionado na Eq.

(4.39) foi requerido para cancelar as contribuições errôneas da força à equação de continuidade. As contribuições de ordem $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ à Eq. (4.39) são:

$$\begin{aligned} \sum_i \bar{c}_i \Omega_i^{(2)} &= \partial_{t1} \sum_i \bar{c}_i f_i^{(1)} + \partial_{t2} \sum_i \bar{c}_i f_i^{(0)} + \vec{\nabla}_1 \cdot \sum_i (\mathbf{Q}_i + c_s^2 \mathbf{I}) f_i^{(1)} \\ &+ \frac{1}{2} \partial_{t1}^2 \sum_i \bar{c}_i f_i^{(0)} + \partial_{t1} \vec{\nabla}_1 \cdot \sum_i (\mathbf{Q}_i + c_s^2 \mathbf{I}) f_i^{(0)} + \frac{1}{2} \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{\Pi}^{(0)} : \mathbf{R}^{(0)} \end{aligned} \quad (4.46)$$

onde foi introduzido o tensor de terceira ordem $\mathbf{R}^{(0)} = R_{\alpha\beta\gamma} = \sum_i \bar{c}_{i\alpha} \bar{c}_{i\beta} \bar{c}_{i\gamma} f_i^{(0)}$. Para eliminar a derivada de segunda ordem no tempo da expressão anterior, obtém-se a derivada temporal da Eq.(4.41):

$$\partial_{t1}^2 \vec{j}^{(0)} = \partial_{t1} \left(F^{(1)} - \vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{\Pi}^{(0)} - c_s^2 \vec{\nabla}_1 \rho \right) \quad (4.47)$$

O mesmo procedimento é aplicado à equação do momento de primeira ordem, Eq. (4.39). Tais expressões simplificam a Eq. (4.46) para:

$$\partial_{t2} \vec{j}^{(0)} + \vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{\Pi}^{(1)} + \frac{1}{2} \partial_{t1} \vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{\Pi}^{(0)} + \frac{1}{2} c_s^2 \partial_{t1} \vec{\nabla}_1 \rho + \frac{1}{2} \vec{\nabla}_1 \vec{\nabla}_1 : \mathbf{R}^{(0)} = 0. \quad (4.48)$$

Finalmente, os termos $\mathcal{O}(\epsilon)$ e $\mathcal{O}(\epsilon^2)$, Eqs. (4.40) e (4.46), são combinados para formar a equação completa de conservação de momento:

$$\epsilon \partial_t \vec{j}^{(0)} + \epsilon \vec{\nabla} \cdot \left(\mathbf{\Pi} + c_s^2 \rho \mathbf{I} + \frac{\epsilon}{2} \left(\partial_{t1} (\mathbf{\Pi}^{(0)} + c_s^2 \rho \mathbf{I}) + \vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{R}^{(0)} \right) \right) = \epsilon \vec{F} \quad (4.49)$$

Esta equação está escrita na forma de divergência. No próximo item será desenvolvido um operador de colisão de forma a obter uma correspondência exata entre os termos na Eq.(4.49) e é obtida a equação de conservação macroscópica, Eq. (3.4), onde o termo de primeira ordem $\mathbf{\Pi}^{(0)} + c_s^2 \rho \mathbf{I}$ pode ser identificado com $\rho \vec{u} \vec{u} + p \mathbf{I}$ e os termos restantes de segunda ordem com $-\boldsymbol{\tau}$.

Uma característica atraente dos modelos Lattice-Boltzmann é que eles conseguem a reproduzir as leis de conservação sem erro. De fato, as leis de conservação prescritas para o operador de colisão, Eq. (4.31) e Eq.(4.38), decorrem do fato de que as variáveis conservadas ρ e \vec{j} produzem o mesmo valor independentemente de serem calculados a partir de funções de distribuição de entrada f_i ou de funções de distribuição de saída $f_i + \Omega_i$. Isto implica que a média espacial destas variáveis não muda durante a evolução do tempo, a não ser que um termo fonte seja introduzido no contorno do domínio ou por uma fonte externa de momento \vec{F} . Porém, é claro que uma implementação numérica dos modelos LB exhibe erros nas leis de

conservação devido à precisão limitada das representações de ponto flutuante em um computador (Latt, 2007).

4.5 FLUXO DE FLUIDOS: ANSATZ DE CHAPMAN-ENSKOG

O operador de colisão é representado pelo termo de relaxação BGK (Bhatnagar, Gross & Krook) com correções:

$$\Omega_i = -\omega(f_i - f_i^{eq}) + FT_i + CT_i \quad (4.50)$$

Os termos de força FT_i e de correção CT_i são produzidos sobre os vetores de primeira e segunda ordem \mathcal{C}^1 e \mathcal{C}^2 , segundo a abordagem descrita por Guo *et al.* (2002), da seguinte forma:

$$FT_i = t_i \frac{a^*}{c_s^2} \vec{c}_i \cdot \vec{F} + t_i \frac{b}{2c_s^4} \mathbf{Q}_i : (\vec{F}\vec{u} + \vec{u}\vec{F}) \quad (4.51)$$

onde o termo com o fator a^* é acrescentado ao momento total do sistema e representa a contribuição de uma força na conservação do momento linear de momento e o termo com o fator b age sobre o momento de terceira ordem, corrigindo os erros numéricos do termo de força devido às derivadas temporais de segunda ordem. O termo de correção é:

$$CT_i = t_i \frac{c}{2c_s^4} \mathbf{Q}_i : \delta\Pi. \quad (4.52)$$

onde foi introduzido um termo $\delta\Pi$ que corrige a deficiência numérica do modelo.

A função de distribuição de equilíbrio f_i^{eq} é construída de forma a ter um termo de colisão Ω_i que respeite as leis de conservação apresentadas no item anterior. Os momentos das funções de distribuição de partículas devem ser tais que a equação de conservação de momento, Eq. (4.49), seja equivalente à equação de Navier-Stokes. Para lograr isto, os momentos das funções de distribuição são expandidos sobre os vetores base \mathcal{C}^0 , \mathcal{C}^1 e \mathcal{C}^2 obtendo-se a expressão definida na Eq. (4.6).

A dinâmica descrita pelas equações (4.50), (4.52) e (4.6) só pode ser usada para resolver a equação de Navier-Stokes quando a velocidade relativa \vec{u}/c_s é pequena. Essa relação é da mesma ordem de grandeza do número adimensional de Mach (Ma) e erro numérico de escala até a terceira ordem do número de Mach $\mathcal{O}(Ma^3)$. Portanto, os termos que multiplicam até a terceira ordem do número de Mach serão negligenciados. Adicionalmente, assume-se que as variações da densidade com o tempo são de uma ordem de grandeza igual ou inferior à do número de Mach:

$$\mathcal{O}(\partial_i) \leq \mathcal{O}(Ma) \quad (4.53)$$

Esta suposição é compatível com os resultados da teoria cinética dos gases próximos do limite isotérmico (Landau & Lifshitz, 1976). Perto do limite incompressível as variações da densidade escalam como o quadrado do número Mach, a restrição da Eq. (4.53) é menos restritiva e permite que o modelo possa ser levado além do seu limite de incompressibilidade.

No caso em que a equação de lattice Boltzmann também pode ser derivada por discretização da equação contínua de Boltzmann a distribuição de equilíbrio corresponde a uma distribuição Maxwelliana das velocidades (Wolf-Gladrow, 2005).

Algumas propriedades de simetria descritas na Eq. (4.8) permitem provar que o termo de colisão na Eq. (4.50) conserva a massa (Eq. (4.31)). A conservação do momento de primeira ordem (momento linear, Eq. (4.38)) é provada com as simetrias e a Eq. (4.39):

$$\sum_i \vec{c}_i \Omega_i = \left(a^* + \frac{\omega}{2} \right) \vec{F} \quad (4.54)$$

Para que a Eq. (4.38) seja respeitada o valor da constante a^* deve ser

$$a^* = 1 - \frac{\omega}{2}. \quad (4.55)$$

As equações governantes do modelo lattice Boltzmann para fluidos isotérmicos são a equação de continuidade, Eq. (4.45), e a de conservação do momento linear, Eq. (4.49). Para achar os demais termos nessas equações deve ser definida uma separação de escalas para a função de distribuição de partícula f_i . Na aproximação de Chapman-Enskog o modelo é expandido em torno do termo de equilíbrio local, ou seja, o termo de equilíbrio é identificado como $f^{(0)}$:

$$f_i^{(0)} = f_i^{eq}. \quad (4.56)$$

Ao usar todas as propriedades de simetria listadas na Eq. (4.8) obtêm-se os termos de ordem zero:

$$\vec{j}^{(0)} = \rho \vec{u} \quad (4.57)$$

$$\mathbf{\Pi}^{(0)} = \rho \vec{u} \vec{u} \quad (4.58)$$

$$\vec{\nabla}_1 \cdot \mathbf{R} = c_s^2 (\vec{\nabla}_1 (\rho \vec{u}) + (\vec{\nabla}_1 (\rho \vec{u}))^T + \vec{\nabla}_1 \cdot (\rho \vec{u}) \mathbf{I}) \quad (4.59)$$

Usando a Eq. (4.56) e escrevendo os termos da expansão em séries de Taylor de Ω_i até a primeira ordem, como feito na Eq. (4.27), obtêm-se:

$$\begin{aligned}
f_i^{(1)} &= \frac{t_i}{\omega} (\partial_{t1} + \vec{\nabla}_1 \cdot \vec{c}_i) \left[\rho \left(1 + \frac{1}{c_s^2} \vec{c}_i \cdot \vec{u} + \frac{1}{2c_s^4} \mathcal{Q}_i : \vec{u}\vec{u} \right) \right] + \frac{1}{\omega} (FT_i + CT_i) \\
&= -\frac{t_i}{\omega} \left(\partial_{t1} \rho + \frac{1}{c_s^2} \partial_{t1} (\vec{c}_i \cdot \rho \vec{u}) + \frac{1}{2c_s^4} \partial_{t1} (\mathcal{Q}_i : \rho \vec{u}\vec{u}) \right. \\
&\quad \left. + \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla}_1 \rho + \frac{1}{c_s^2} \vec{c}_i \vec{c}_i : \vec{\nabla}_1 (\rho \vec{u}) + (\vec{c}_i \cdot \vec{\nabla}_1) (\mathcal{Q}_i : \rho \vec{u}\vec{u}) \right) + \frac{1}{\omega} (FT_i + CT_i)
\end{aligned} \tag{4.60}$$

As derivadas temporais na equação anterior são substituídas por derivadas espaciais obtidas ao substituir as expressões a seguir. Da Eq. (4.33) combinada com a Eq. (4.57) obtém-se:

$$\partial_{t1} \rho = -\vec{\nabla}_1 \rho \vec{u}. \tag{4.61}$$

A Eq. (4.41) combinada com o momento de segunda ordem da função de distribuição (4.58) fornece:

$$\frac{1}{c_s^2} \partial_{t1} (\vec{c}_i \cdot \rho \vec{u}) = \frac{1}{c_s^2} \vec{c}_i \cdot \vec{F}^{(1)} - \frac{1}{c_s^2} \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla}_1 : \rho \vec{u}\vec{u} - \vec{c}_i \cdot \vec{\nabla}_1 \rho \tag{4.62}$$

Substituindo a derivada temporal da Eq. (4.61) e negligenciando os termos $\mathcal{O}(Ma^3)$ resultantes obtém-se:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2c_s^4} \mathcal{Q}_i : \partial_{t1} (\rho \vec{u}\vec{u}) &= \frac{1}{2c_s^4} \mathcal{Q}_i : (\partial_{t1} (\rho \vec{u}) \vec{u} + \vec{u} \partial_{t1} (\rho \vec{u}) - \overbrace{(\partial_{t1} \rho) \vec{u}\vec{u}}^{\mathcal{O}(Ma^3)}) \\
&= \frac{1}{c_s^4} \mathcal{Q}_i : \partial_{t1} (\rho \vec{u}) \vec{u} \quad (\text{por simetria de } \mathcal{Q}) \\
&= \frac{1}{c_s^4} \mathcal{Q}_i : \left(\vec{F}^{(1)} - \overbrace{\vec{\nabla}_1 : (\rho \vec{u}\vec{u})}^{\mathcal{O}(Ma^3)} - c_s^2 \vec{\nabla}_1 \rho \right) \vec{u} \quad (\text{da equação inicial}) \\
&= \frac{1}{c_s^4} \mathcal{Q}_i : \left(\vec{F}^{(1)} - c_s^2 \vec{\nabla}_1 \rho \right) \vec{u}.
\end{aligned} \tag{4.63}$$

Substituindo todos os termos na Eq.(4.60) obtém-se a seguinte expressão para as funções de distribuição de primeira ordem:

$$\begin{aligned}
f_i^{(1)} &= -\frac{t_i}{c_s^2 \omega} \left(\mathcal{Q}_i : \rho \vec{\nabla}_1 \vec{u} - \vec{c}_i \vec{\nabla}_1 : \rho \vec{u}\vec{u} + \frac{1}{2c_s^2} (\vec{c}_i \cdot \vec{\nabla}_1) (\mathcal{Q}_i : \rho \vec{u}\vec{u}) \right) \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{t_i}{c_s^2} \vec{c}_i \cdot \vec{F} + \frac{(b-1)t_i}{2c_s^4 \omega} \mathcal{Q}_i : (\vec{F}\vec{u} + \vec{u}\vec{F}) + \frac{ct_i}{2c_s^4 \omega} \mathcal{Q}_i : \delta \Pi
\end{aligned} \tag{4.64}$$

Quando as funções de distribuição são projetadas sobre os vetores de \mathcal{C}^2 usando a Eq. (4.18) chega-se em:

$$\mathbf{\Pi}^{(1)} = \sum_i \mathcal{Q}_i f_i^{(1)} = -\frac{2c_s^2}{\omega} \rho \mathbf{S} + \frac{(b-1)}{\omega} (\vec{F}\vec{u} + \vec{u}\vec{F}) + \frac{c}{\omega} \delta \mathbf{\Pi} \quad (4.65)$$

onde \mathbf{S} é o tensor de taxa de deformação definido na Eq.(3.7). Para achar o termo desconhecido se deriva o tensor $\mathbf{\Pi}^{(0)}$ com as mesmas considerações que levaram à Eq. (4.63), obtendo:

$$\partial_{i1} \mathbf{\Pi}^{(0)} = \partial_{i1} (\rho \vec{u}\vec{u}) - \vec{F}^{(1)} \vec{u} + \vec{u} \vec{F}^{(1)} - c_s^2 \left((\vec{\nabla}_1 \rho) \vec{u} + \vec{u} (\vec{\nabla}_1 \rho) \right) \quad (4.66)$$

Substituindo as expressões anteriores chega-se na seguinte equação para o momento linear:

$$\mathbf{\Pi}^{(1)} + \frac{1}{2} \partial_{i1} \mathbf{\Pi}^{(0)} = \left(\frac{b-1}{\omega} + \frac{1}{2} \right) (\vec{F}\vec{u} + \vec{u}\vec{F}) - \frac{2c_s^2}{\omega} \rho \mathbf{S} + \frac{1}{2} c_s^2 \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) \mathbf{I}. \quad (4.67)$$

Na equação anterior o termo de força está acompanhado de um termo não desejado que é eliminado assumindo o seguinte:

$$b = 1 - \frac{\omega}{2}. \quad (4.68)$$

O termo de correção $\delta \mathbf{\Pi}$ não é considerado e, portanto c é igualado a 0. Esta escolha de constantes leva às seguintes equações:

$$\partial_i \rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4.69)$$

$$\partial_i (\rho \vec{u}) + \vec{\nabla} \cdot (c_s^2 \rho \mathbf{I} + \rho \vec{u}\vec{u} - \boldsymbol{\tau}) = \vec{F} \quad (4.70)$$

onde o tensor de tensão desviadora é

$$\boldsymbol{\tau} = 2\nu \rho \mathbf{S} \quad (4.71)$$

e a viscosidade dinâmica cisalhante ν é relacionada com o parâmetro de relaxação assim:

$$\nu = c_s^2 \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right). \quad (4.72)$$

As equações diferenciais parciais derivadas na análise multiescala são iguais às equações de conservação macroscópicas introduzidas na seção 3.2.

4.6 ACURÁCIA DOS MÉTODOS LATTICE BOLTZMANN

Na análise multi-escala a equivalência entre o método lattice Boltzmann e a equação diferencial parcial macroscópica associada é alcançada desenvolvendo uma série de Taylor finita da equação de evolução $f_i(\vec{r} + \vec{c}_i t, t+1) - f_i(\vec{r}, t)$. Como a série é truncada no termo de segunda ordem é comum dizer que o “lattice Boltzmann é um método preciso até segunda

ordem em tempo e espaço”.

O significado da acurácia espacial de um método numérico fica mais claro quando considerado um sistema estacionário (independentes do tempo), onde uma solução numérica $\vec{u}_n(\vec{r})$ é comparada com uma solução exata do problema $\vec{v}(\vec{r})$. Uma abordagem comum para definir a acurácia numérica é dizer que o método é da ordem de h_x no espaço quando existe uma constante ψ que cumpre a relação seguinte:

$$\sqrt{\frac{\sum_{\vec{r}} (|\vec{u}_n(\vec{r}) - \vec{v}(\vec{r})|)^2}{N}} < \psi^{h_x} \quad (4.73)$$

onde a somatória é sobre todos os nós da malha.

A acurácia no tempo pode ser definida para fluxos periódicos, com frequência F . Analogamente, o método é dito com acurácia de ordem h_t no tempo quando existe uma constante ψ' que cumpre a relação seguinte:

$$F \sum_t \sqrt{\frac{\sum_{\vec{r}} (|\vec{u}_n(\vec{r}, t) - \vec{v}(\vec{r}, t)|)^2}{N}} < \psi'^{h_t} \quad (4.74)$$

onde o erro de discretização espacial é pequeno o suficiente como para ser negligenciado.

Em alguns métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais parciais as derivadas espaciais são substituídas por uma série finita de Taylor de ordem de h_x e as derivadas temporais por séries até a ordem h_t . Demonstrações formais indicam que a acurácia espacial desses métodos é da ordem de h_x e acurácia temporal é da ordem de h_t , no sentido das Eqs. (4.73) e (4.74). Intuitivamente, pode-se argumentar que o método lattice Boltzmann possui uma relação similar, embora não exista uma prova formal da acurácia do mesmo.

4.6.1 ACURÁCIA DO MODELO PARA FLUIDOS INCOMPRESSÍVEIS

Na simulação de fluidos incompressíveis deve ser escolhido um número de Mach baixo e é concluído que a derivada temporal da densidade relaciona-se com o quadrado do número Mach ($\partial_t \rho = \mathcal{O}(Ma^2)$), portanto a densidade é descrita assintoticamente como uma constante independente do tempo. No método lattice Boltzmann a velocidade do som é uma constante da malha e o número de Mach do sistema é:

$$Ma = \frac{\vec{u}}{c_s} \quad (4.75)$$

A velocidade \bar{u} no sistema lattice Boltzmann é proporcional aos parâmetros de discretização ($\bar{u} \propto \delta_x / \delta_t$), a velocidade do som é uma constante da malha e pode ser mudada adaptando o fator de peso para as partículas em repouso (t_0), porém velocidades do som diferentes de 1/3 induzem instabilidades numéricas. Finalmente, o número de Mach no sistema lattice é proporcional aos parâmetros de discretização e o erro por compressibilidade escala como $\varepsilon(Ma) \propto (\delta_x^2 / \delta_t^2)$.

Como o método lattice Boltzmann é de segunda ordem em acurácia o erro por discretização é proporcional ao quadrado da discretização espacial $\varepsilon(\delta_x) \propto \delta_x^2$. Se o erro por compressibilidade e o erro por discretização são mantidos da mesma ordem em uma simulação lattice Boltzmann, obtém-se a seguinte relação:

$$\delta_t \propto \delta_x^2 \quad (4.76)$$

que é uma restrição comum em outros esquemas numéricos de solução de problemas de fluxo.

4.7 CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO

Os modelos lattice Boltzmann não simulam diretamente a evolução de um fluxo, mas a dinâmica de populações de partículas que descrevem o fluido microscopicamente. A pressão macroscópica e os campos de velocidade são calculados facilmente a partir das populações de partículas, porém o procedimento oposto é bem mais complicado. Portanto, a implementação de uma condição de contorno se resume a achar uma forma de traduzir as variáveis de fluxo macroscópico para populações de partículas.

4.7.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO

No contorno de uma malha algumas populações de partículas são desconhecidas durante a evolução do método devido à falta de nós correspondentes. Esta situação é ilustrada na Figura 4.3 para um contorno no topo de uma malha D2Q9 onde três populações de *partículas desconhecidas* são indicadas por setas com traço descontínuo. O papel de uma condição de contorno é encontrar uma substituição para essas três populações e, potencialmente, para as seis populações restantes. A substituição feita deve ser consistente com a dinâmica do modelo e deve levar ao comportamento macroscópico desejado no contorno do domínio.

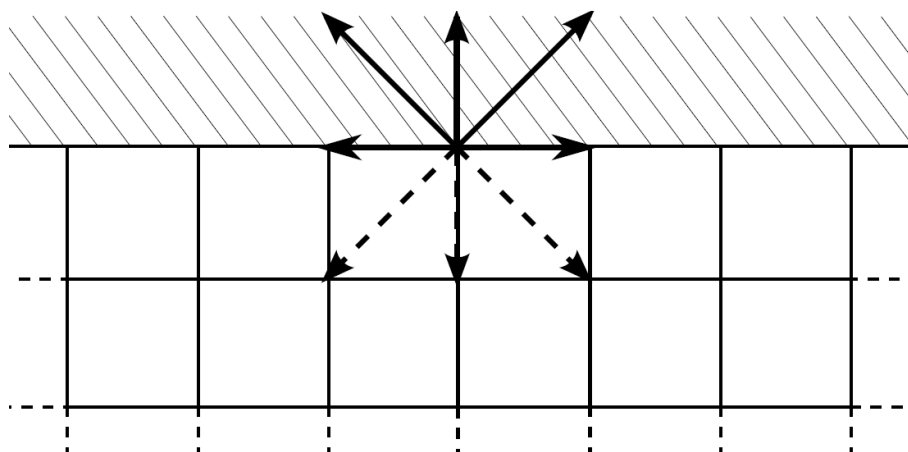


Figura 4.3. Nó no topo de uma malha D2Q9, a região sombreada está fora do domínio. As populações desconhecidas são representadas pelos vetores lattice com traço descontinuo (Latt *et al.*, 2008).

4.7.1.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO PERIÓDICAS

Condições periódicas são as mais simples entre todas e o domínio é tratado como um sistema fechado com bordas opostas conectadas. Desta forma as populações de partículas que saem de um contorno entram no contorno oposto e vice-versa. A topologia do domínio computacional é um cilindro quando a condição é aplicada em uma direção (Figura 4.4) e toroidal quando aplicada em ambas as direções (Figura 4.5).

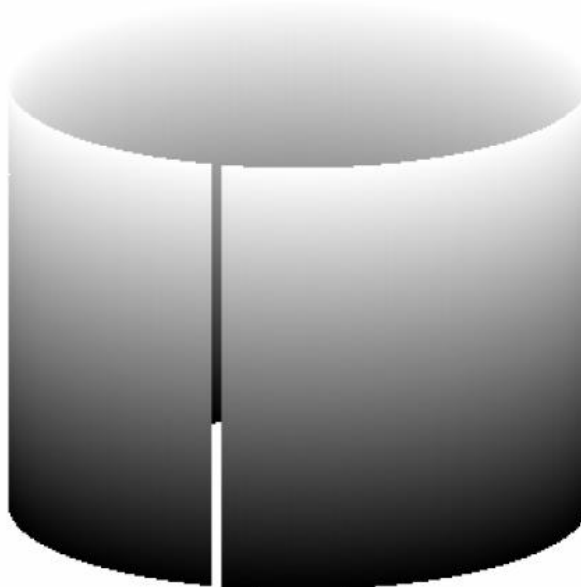


Figura 4.4. Topologia cilíndrica do domínio computacional quando aplicadas condições periódicas em uma direção, a fenda no cilindro é meramente ilustrativa, enfatizando como o domínio se enrola ao redor de si mesmo (Sukop & Thorne, 2006).

A implementação deste tipo de condições de contorno é extremamente simples, porém

sua aplicação é limitada a casos onde os domínios sejam infinitos ou semi-infinitos.

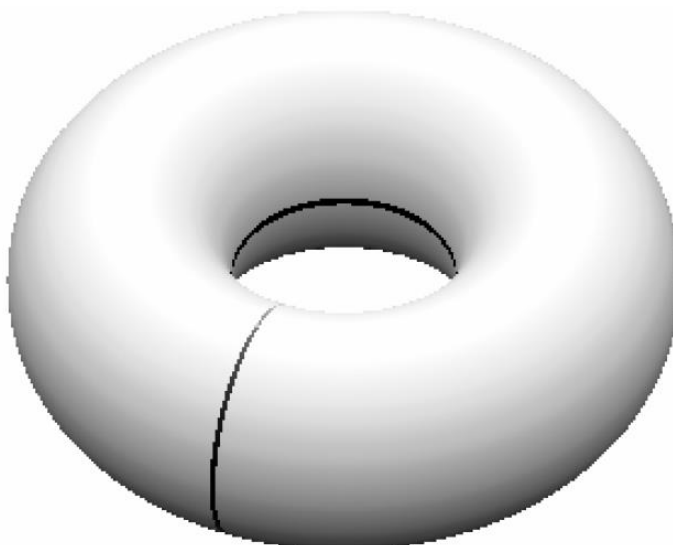


Figura 4.5. Topologia toroidal de um domínio computacional periódico em ambas as direções. As fendas no toróide ilustram como o domínio se enrola ao redor de si mesmo (Sukop & Thorne, 2006).

4.7.1.2 CONDIÇÕES DE BOUNCE-BACK (REFLEXÃO)

Nas paredes sólidas de uma simulação de fluxo geralmente é aplicada a condição de não escorregamento (*non-slip*) na qual a partícula de fluido se reflete na parede, retornando a direção oposta à de incidência. Esta condição é implementada no método lattice Boltzmann com um esquema conhecido como a regra do *bounce-back*. Para utilizar o esquema *bounce-back* pontos da malha devem ser nomeados como sólidos ou líquidos. Quando uma população de partículas parte de um nó fluido para um nó sólido ela refletida de volta ao nó fluido com a mesma direção de entrada como ilustrado na Figura 4.6 para um contorno em uma malha D2Q9. Durante o processo iterativo as populações de partículas são armazenadas temporariamente dentro dos sólidos e reemergem no passo posterior.

Para que o esquema *bounce-back* seja de segunda ordem em acurácia, o contorno físico deve ser considerado a meio caminho entre o nó sólido e o nó fluido. Essa suposição foi proposta por Zou & He (1997) e é conhecida como regra de *bounce-back* a meio caminho.

Condições de *bounce-back* são particularmente fáceis de implementar e são umas das responsáveis do sucesso do método lattice Boltzmann na simulação de fluidos em geometrias complexas como as encontradas em meios porosos. A implementação da condição simplesmente requer de nomear os nós sólidos e não há tratamento adicional, portanto a incorporação de imagens de meios porosos é trivial.

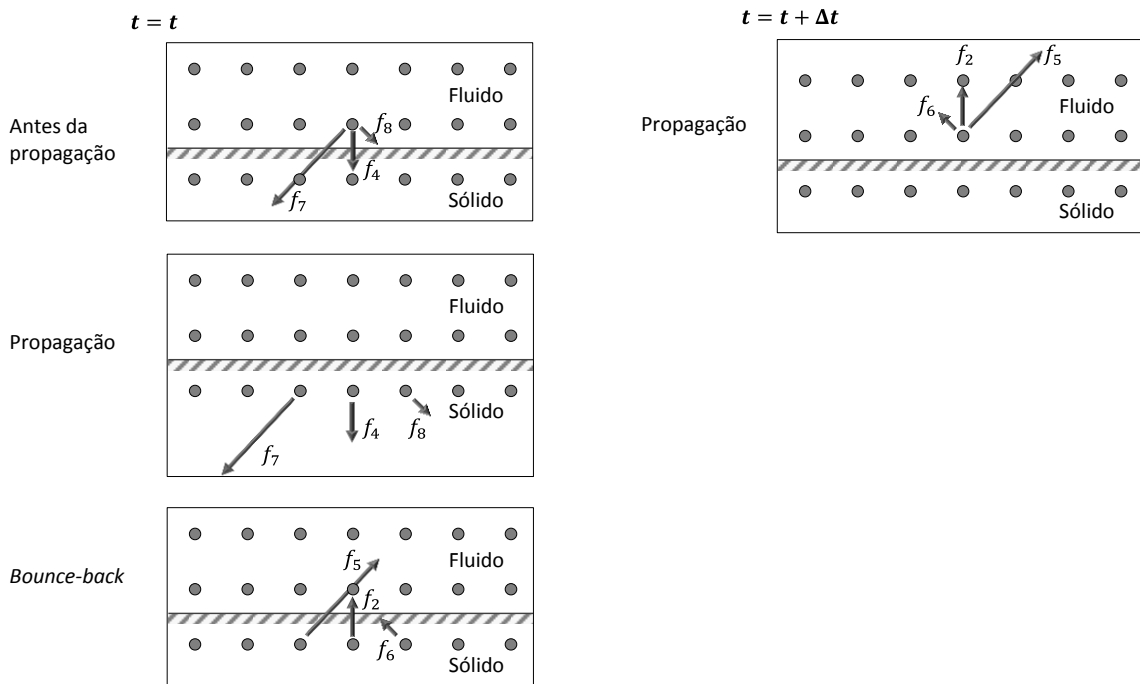


Figura 4.6. Condição de não-escorregamento nas paredes com a regra de reflexão em um lattice D2Q9 (Durand *et al.*, 2012).

4.7.1.3 CONDIÇÕES DE VELOCIDADE OU DE VON NEUMANN

Uma condição de von Neumann restringe o fluxo no contorno usando um vetor de velocidade \vec{u}_0 , as populações de partículas desconhecidas no contorno e a densidade (pressão) são calculadas de forma a manter a velocidade prescrita. Por outro lado, a densidade pode ser determinada a partir das populações conhecidas e da velocidade prescrita como explicado a seguir.

A densidade no contorno pode ser expressa como:

$$\rho = \rho_x + \rho_+ + \rho_- \tag{4.77}$$

onde ρ_x é a soma das populações de partículas desconhecidas, ρ_+ denota a soma das populações de partículas na direção oposta às desconhecidas e ρ_- é a soma das populações com vetor de malha nulo ou tangencial ao contorno. O momento normal ao contorno é calculado como:

$$\rho u_{\perp} = \rho_+ - \rho_x, \tag{4.78}$$

onde u_{\perp} é a projeção da velocidade sobre uma normal ao contorno que aponta para fora do domínio, p. ex., para um nó no topo do domínio (Figura 4.3) seria a componente vertical da velocidade na direção positiva. Ao combinar as equações (4.77) e (4.78) obtém-se a expressão

seguinte:

$$\rho = \frac{1}{1+u_{\perp}}(2\rho_{+} + \rho_{-}), \quad (4.79)$$

que é independente da quantidade ρ_x . Este método só pode ser aplicado em contornos retos; em outros tipos de contorno, p. ex., nós nas quinas, a informação local disponível pode ser insuficiente para calcular a densidade sendo necessário extrapolar a densidade com as das células vizinhas.

Existem na literatura vários tipos de condições de contorno para o modelo BGK. Latt *et al.* (2008) classificam as abordagens em dois tipos: métodos que conservam as populações conhecidas e métodos que substituem todas as populações. Nos métodos que conservam as partículas, a ação da condição de contorno pode ser pensada como o efeito de um fluido fictício localizado fora da malha numérica. Essa porção de fluido executa uma operação imaginária nos nós do contorno e atribui um valor às populações de partículas desconhecidas. No segundo tipo de condição de contorno, todas as populações de partículas no contorno são substituídas e a ideia de dinâmica imaginária é abandonada.

Os nós no contorno desenvolvem a mesma dinâmica que os nós no interior do domínio, portanto os dois podem ser analisados nos mesmos termos teóricos. Em particular, a análise multiescala também é válida para os nós no contorno e as populações de partículas no contorno podem ser divididas em uma componente em equilíbrio ($f_i^{(0)} = f_i^{eq}$) e uma contribuição que não está em equilíbrio $f_i^{(1)}$, Eq. (4.25). Uma restrição importante para determinar os valores das populações de partículas é dada pelas leis de conservação ou invariantes de colisão ($\sum_i \Omega_i = 0$ e $\sum_i \vec{c}_i \Omega_i = \vec{F}$). A conservação exata da massa local e do momento linear é o pilar do método lattice Boltzmann, portanto é desejável que isto também seja respeitado no contorno de uma simulação. A conservação da massa e do momento linear é automaticamente verificada fazendo que as equações $\rho = \sum_i f_i$ e $\vec{j} = \sum_i \vec{c}_i f_i$ produzam exatamente o valor desejado.

De acordo com Latt *et al.* (2008), condições de contorno que preservam as populações de partículas conhecidas são recompensadas por melhor acurácia em 2D, mas perdem essa vantagem em 3D; por outro lado, as últimas são mais estáveis quando são simulados números de Reynolds maiores.

O método usado para impor as condições de contorno neste trabalho conserva as populações de partículas conhecidas, foi proposto por Zou & He (1997) e é baseado na ideia

de aplicar a regra do bounce-back às partes fora do equilíbrio. No caso de um contorno superior em uma malha D2Q9 (Figura 4.3) a condição aplica a regra de bounce-back à população desconhecida na direção perpendicular ao contorno:

$$g_4^{(1)} = f_2^{(1)} \quad (4.80)$$

onde g_i denota às populações de partículas desconhecidas. As populações desconhecidas $g_7^{(1)}$ e $g_8^{(1)}$ são calculadas forçando o valor da velocidade prescrita com na Eq. (4.29).

$$g_7^{(1)} = f_5^{(1)} + \frac{1}{2}(f_1^{(1)} - f_3^{(1)}) \quad (4.81)$$

$$g_8^{(1)} = f_6^{(1)} + \frac{1}{2}(f_3^{(1)} - f_1^{(1)}) \quad (4.82)$$

O valor das populações de partículas desconhecidas é construído somando as partes em equilíbrio com as não equilibradas:

$$g_i = f_i^{eq}(\rho, \vec{u}_0) + g_i^{(1)} \quad \text{para } i = 4, 7, 8. \quad (4.83)$$

As populações conhecidas são mantidas iguais:

$$g_i = f_i \quad \text{para } i = 0, 1, 2, 3, 5, 6. \quad (4.84)$$

4.7.1.4 CONDIÇÕES DE PRESSÃO OU DE DIRICHLET

Uma condição de Dirichlet restringe a pressão/densidade no contorno do domínio numérico. A solução para este tipo de condição de contorno segue o mesmo enfoque anterior. Neste caso a densidade ρ_0 é prescrita e tanto as populações de partículas como a velocidade devem ser calculadas de forma a manter essa densidade prescrita. Assumindo que a componente da velocidade tangente ao contorno é igual a zero, calcula-se a componente normal da velocidade que aponta para o interior do domínio (u_{\perp}) a partir das populações conhecidas:

$$u_{\perp} = \pm \left(1 - \frac{\rho_- + 2\rho_+}{\rho_0} \right) \quad (4.85)$$

onde o símbolo negativo ou positivo é dado pela direção da componente da velocidade.

O método de Zou e He é usado novamente para resolver a condição de pressão no contorno esquerdo de uma malha com estrutura D2Q9. Neste caso a população desconhecida com vetor paralelo à normal do contorno é $f_1^{(1)}$, então:

$$g_1^{(1)} = f_3^{(1)} \quad (4.86)$$

As outras duas populações desconhecidas $g_5^{(1)}$ e $g_8^{(1)}$ são calculadas forçando a densidade e a componente da velocidade tangente ao contorno prescrita inicialmente, obtendo-se:

$$g_5^{(1)} = f_7^{(1)} + \frac{1}{2}(f_4^{(1)} - f_2^{(1)}) \quad (4.87)$$

$$g_8^{(1)} = f_6^{(1)} + \frac{1}{2}(f_2^{(1)} - f_4^{(1)}) \quad (4.88)$$

O valor das populações de partículas desconhecidas é construído ao adicionar ambas as partes em equilíbrio e as em desequilíbrio:

$$g_i = f_i^{eq}(\rho_0, \vec{u}) + g_i^{(1)} \quad \text{para } i = 1, 5, 8. \quad (4.89)$$

As populações conhecidas são mantidas iguais:

$$g_i = f_i \quad \text{para } i = 0, 2, 3, 4, 6, 7. \quad (4.90)$$

As soluções da condição de pressão/densidade e de velocidade podem ser derivadas analogamente para o resto dos contornos. O código de implementação destas condições é apresentado no Anexo A.

4.7.1.5 CONDIÇÕES INICIAIS

O estado inicial de um sistema só é importante quando são estudados fluxos dependentes do tempo. Segundo Mei *et al.* (2006), na simulação de fluidos incompressíveis com o método lattice Boltzmann BGK a abordagem comum consiste em usar a função de distribuição de equilíbrio para inicializar as populações de partículas. No caso de fluxos independentes, o campo de velocidades e o campo de densidade são definidos de forma a acelerar as simulações para alcançar mais rapidamente o estado estacionário.

No caso de fluxos dependentes do tempo Skordos (1993) propôs calcular as populações a partir da solução direta da equação de Poisson para obter a pressão e a densidade via a equação de estado e a parte não equilibrada com o procedimento de Chapman-Enskog.

De acordo com Mei *et al.* (2006), na prática a metodologia anterior é difícil de implementar, e propõem um procedimento iterativo para gerar condições iniciais consistentes. Nesta metodologia a densidade é a única variável conservada no sistema enquanto que o momento do fluxo é relaxado para o estado prescrito pelo campo de velocidades inicial.

Já que o objetivo desta pesquisa é calcular parâmetros, é desejável chegar a um estado estacionário. Portanto, a inicialização das funções de distribuição de partículas será feita de forma a acelerar as simulações para alcançar o estado estacionário.

5 METODOLOGIA

A metodologia usada nesta dissertação para aplicar o método lattice Boltzmann a problemas de fluxo em meios porosos pode ser resumida em dois estágios. O primeiro estágio abrangeu o desenvolvimento de um código que implementa o método de lattice Boltzmann com operador de colisão BGK. Este estágio inclui a validação do código mediante a simulação de problemas de referência que possuem soluções acuradas ou que foram amplamente estudados (“*benchmarks*”). O segundo estágio consistiu na aplicação do método a problemas de fluxo de fluidos em meios porosos, visando especificamente a estimação de parâmetros do meio poroso. O algoritmo descrito no fluxograma na Figura 5.1 descreve brevemente a metodologia seguida neste estudo:

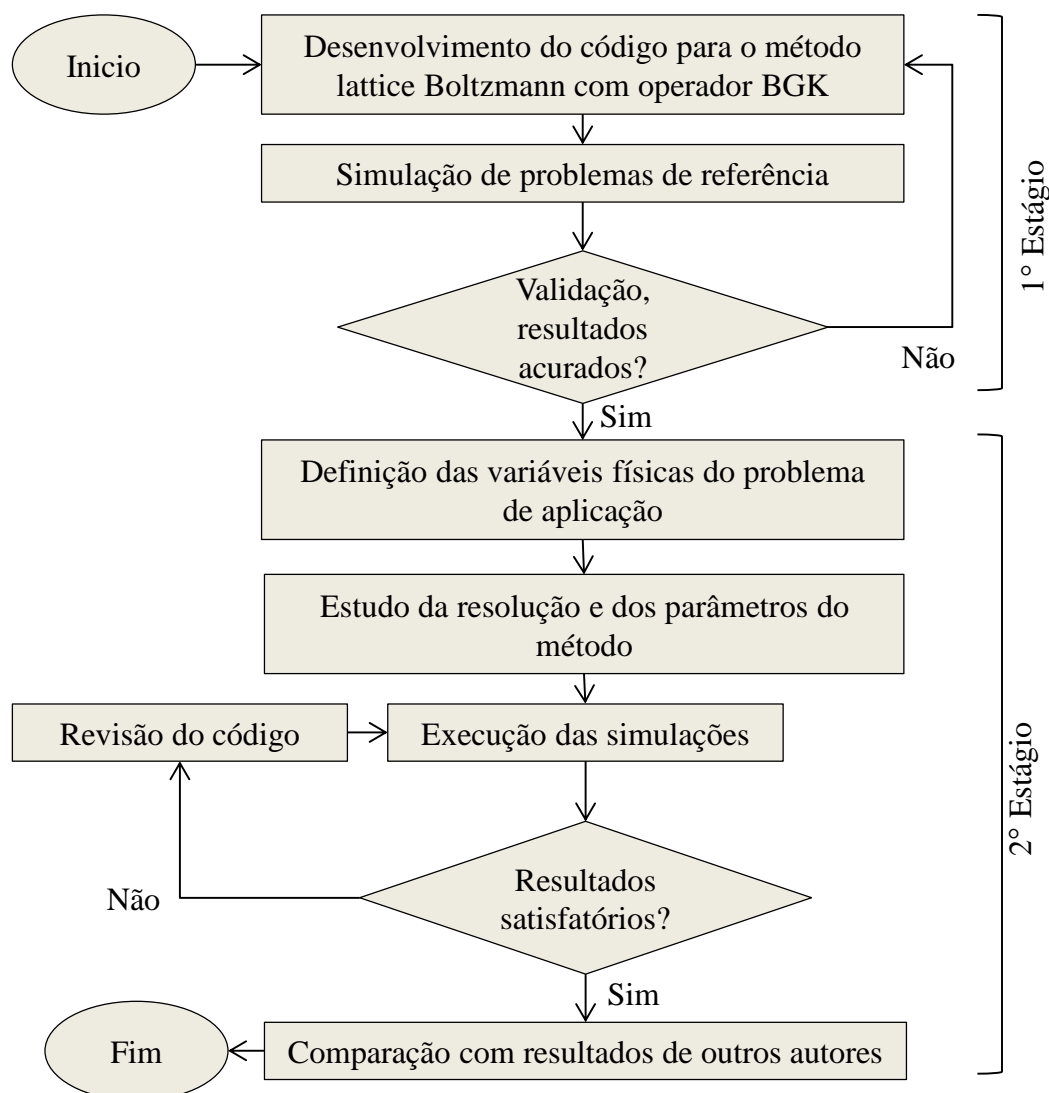


Figura 5.1. Fluxograma da metodologia seguida no presente estudo.

Os detalhes de cada uma das etapas no processo do desenvolvimento do código são

explicados nos itens a seguir.

5.1 IMPLEMENTAÇÃO NUMÉRICA DO MODELO LATTICE BOLTZMANN BGK

O modelo implementado nesta dissertação é o lattice Boltzmann com operador de colisão BGK e tempo de relaxação único. O esquema de malha usado é o D2Q9, que possui nove velocidades em um espaço bidimensional.

5.1.1 ALGORITMO

O algoritmo utilizado para implementar o modelo lattice Boltzmann em uma malha numérica com estrutura D2Q9 consiste em iterar a equação de evolução das funções de distribuição de partículas com operador de colisão BGK, expressa como:

$$f_i(\vec{r} + \vec{c}_i, t+1) - f_i(\vec{r}, t) = \omega(f_i(\vec{r}, t) - f_i^{eq}(\rho, \vec{u})) \quad (5.1)$$

onde o lado esquerdo da equação é o termo de propagação e o lado direito é o termo de colisão. Nos nós sólidos no interior do domínio numérico não se aplica o operador de colisão descrito na Eq. (5.1), que é substituído pela condição de reflexão, portanto a implementação deve ser dividida em duas partes (colisão e propagação) em cada iteração. Adicionalmente, condições de contorno devem ser aplicadas e variáveis macroscópicas devem ser calculadas durante cada iteração. As variáveis macroscópicas de velocidade e densidade são calculadas em cada iteração com as expressões:

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^8 \vec{c}_i f_i \quad (5.2)$$

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i \quad (5.3)$$

Usando os pesos da malha (t_i) e os vetores de velocidade (\vec{c}_i) apresentados na Tabela 4.1 para uma malha D2Q9 obtém-se a seguinte expressão para a função de equilíbrio:

$$f_i^{eq}(\rho, \vec{u}) = \rho t_i \left(1 + 3(\vec{c}_i \cdot \vec{u}) + \frac{9}{2}(\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2}\vec{u} \cdot \vec{u} \right) \quad (5.4)$$

A Tabela 5.1 apresenta o algoritmo seguido no código implementado nesta dissertação, dividido em cinco sub-rotinas. Os nós da malha são divididos em três tipos: nós de fluido, nós sólidos e nós com condição de contorno. Algumas sub-rotinas são executadas em todos os nós enquanto que outras só operam em um tipo de nó. As populações de partículas (nós sólidos) são inicializadas a partir da função de equilíbrio, pois não serão estudados fluxos dependentes

do tempo.

Tabela 5.1. Algoritmo utilizado na implementação de um código para o modelo lattice Boltzmann BGK.

Entrada: Valores iniciais de ρ_0 e \vec{u}_0 e de condições de contorno ρ_{bc} e \vec{u}_{bc}		
Saída: Valores atualizados de ρ e \vec{u} para cada passo de tempo		
0. Inicialização	$t = 0$ $f_i^* = f_i^{eq}(\rho_0, \vec{u}_0)$	Eq. (5.4)
1. Cálculo das variáveis macroscópicas. (<i>Todos os nós</i>)	Repetir: $t = t + 1$ $f_i^* \rightarrow \rho$ e \vec{u}	Eqs. (5.2) e (5.3)
2. Condições de contorno. (<i>Nós no contorno</i>).	f_i^*, ρ_{bc} e $\vec{u}_{bc} \rightarrow f_i^{bc}$	Eq. (4.77) a (4.90)
3. Bounce-back (<i>Nós sólidos</i>).	$f_i^* \rightarrow f_i^{bb}$	
4. Colisão. (<i>Nós fluidos</i>).	$f_i = f_i^* - \frac{1}{\tau} (f_i^* - f_i^{eq})$ $f_i^{bc*} = f_i^{bc} - \frac{1}{\tau} (f_i^{bc} - f_i^{eq})$	Eq. (5.4) com ρ e \vec{u} Eq. (5.4) com ρ_{bc} e \vec{u}_{bc}
5. Propagação para os nós vizinhos. (<i>Todos os nós</i>).	$f_i, f_i^{bb}, f_i^{bc*} \rightarrow f_i^*$	
	⊣ Imprimir ρ e \vec{u}	

f_i^{bc} : Função de distribuição após condição de contorno, f_i^{bb} : Função após do bounce-back

O processo de discretização do domínio e a escolha dos parâmetros da simulação constituem uma etapa prévia à simulação e será analisada em detalhe em itens posteriores.

O código desenvolvido nesta dissertação é apresentado detalhadamente no Anexo A. A linguagem de programação utilizada para a implementação do método foi Python na sua versão 2.7.3. A escolha desta linguagem de programação para o desenvolvimento do código foi feita com o intuito de usar uma linguagem de alto nível, livre, expressiva, fácil de ler e de escrever (Ceder, 2010). A baixa velocidade de execução de Python quando comparado com outras linguagens é uma desvantagem que chega a ser compensada pelo pouco tempo que deve ser investido no desenvolvimento dos códigos.

A escrita dos códigos foi feita sob o ambiente de desenvolvimento integrado do interpretador CPython, chamado de IDLE da sigla em inglês (*Integrated Development*

Environment). As rodadas dos códigos foram feitas no interpretador PyPy, o qual possui velocidade de execução maior quando comparado com CPython.

Os resultados das simulações foram escritos em arquivos com formatação *vtk*, que é a formatação requerida pela ferramenta de visualização e pós processamento dos dados, chamada de Paraview. O computador usado para as simulações possui as características listadas na Tabela 5.2.

Tabela 5.2. Características do computador usado nas simulações

Processador	Intel® Core™ i7-2600K CPU @3.40GHz
Memória RAM	16 GB
Tipo de sistema	64 Bits

5.2 SIMULAÇÃO DE PROBLEMAS DE REFERÊNCIA E VALIDAÇÃO DO MÉTODO

Para validar os resultados do código implementado foram simulados dois problemas de referência (*benchmarks*): fluxo tipo Poiseuille e fluxo ao redor de um cilindro sob vários números de Reynolds. Estes problemas são de grande interesse no campo da mecânica de fluidos computacional, pois possuem relações empíricas e/ou analíticas de acurácia reconhecida que podem ser usadas para validar um modelo numérico.

5.2.1 ESCOLHA DAS UNIDADES

As simulações com o método lattice Boltzmann devem representar a física de um dado sistema real em um sistema discreto. Portanto, as unidades do sistema lattice devem ser escolhidas de forma a obter equivalência com as unidades do sistema real. Esta conexão é feita com ajuda dos números adimensionais. Restrições próprias do modelo e algumas relações entre as variáveis da malha podem facilitar a escolha dos parâmetros de simulação.

Os efeitos da compressibilidade do modelo lattice Boltzmann aumentam com o quadrado do número Mach, Eq. (4.75), que é proporcional à velocidade. Portanto, deve ser escolhida uma velocidade de malha de forma a ter um número de Mach baixo e consequentemente reduzir o efeito da compressibilidade. Uma abordagem comum consiste em manter a velocidade lattice inferior a 0.1 (unidades de malha por unidade de tempo).

Uma segunda restrição é devida à relação entre a viscosidade no sistema lattice e o parâmetro de relaxação na Eq. (4.72). Como a viscosidade deve ser sempre positiva, o termo $\tau = 1/\omega$ deve ser mantido maior do que 0.5, porém valores próximos de 0.5 podem levar a

instabilidade numérica (Sukop & Thorne, 2006). Por outro lado, a relação entre a viscosidade do método ν_{lb} e a viscosidade real é dada pela expressão:

$$\nu_{lb} = \nu \frac{\delta_t}{\delta_x^2} \quad (5.5)$$

onde $\delta_x = l_o / N$, e $\delta_t = t_o / N_t$ são parâmetros de conversão entre o sistema real e o sistema lattice, l_o e t_o são o comprimento e o tempo de referência do sistema real, N é o número de células usadas para discretizar o comprimento característico e N_t o número de iterações necessárias para atingir o tempo característico. Naturalmente, a velocidade em unidades de malha é dada por:

$$u_{lb} = N / N_t \quad (5.6)$$

Para que o sistema lattice seja equivalente ao sistema real simulado, ambos os sistemas devem possuir a mesma geometria e o mesmo número de Reynolds. Então, a viscosidade também está relacionada com N e N_t por meio do número de Reynolds assim:

$$Re = \frac{u_{lb} N}{\nu_{lb}} \quad (5.7)$$

Têm-se então quatro parâmetros básicos Re , N , N_t e ω (ou ν_{lb}) e três graus de liberdade. Por exemplo, se em uma simulação o número de Reynolds e a velocidade são definidos *a priori*, a viscosidade fica em função do N (ou vice-versa, pela Eq. (5.7)), o parâmetro de relaxação é dado pela Eq. (4.72) e o N_t pela Eq. (5.6).

5.2.2 FLUXO POISEUILLE

O fluxo Poiseuille é um tipo de fluxo simples que acontece no interior de tubulações ou no espaço entre duas placas paralelas. A velocidade nas paredes de uma tubulação é nula (contorno não deslizante) e atinge um valor máximo no ponto meio, formando um perfil parabólico descrito pela equação:

$$u(x) = \frac{G}{2\mu} (a^2 - x^2) \quad (5.8)$$

onde $u(x)$ é a velocidade na direção do fluxo, G pode ser um gradiente linear de pressão $G = (P_0 - P_f) / L$, ou um gradiente de pressão gravitacional $G = \rho g$, μ é a viscosidade dinâmica do fluido e a é a metade do comprimento do canal como mostrado na Figura 5.2. As velocidades perpendiculares à direção de fluxo são iguais a zero.

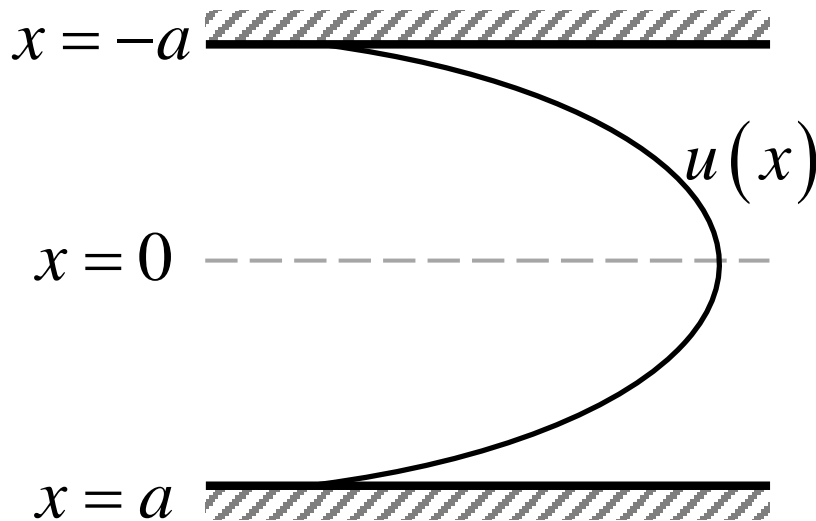


Figura 5.2. Perfil de velocidade tipo Poiseuille.

A velocidade média em um perfil de fluxo tipo Poiseuille é:

$$\bar{u} = \frac{G}{3\mu} a^2 \quad (5.9)$$

A velocidade máxima é atingida em $x=0$ e equivale a 1.5 vezes a velocidade média.

5.2.2.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA E DISCRETIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS

A implementação de um fluxo tipo Poiseuille com o método lattice Boltzmann requer somente da aplicação de condições de bounce-back nas paredes do canal e de condições de contorno na entrada e na saída. O código desenvolvido para este caso é apresentado no Anexo B.

A geometria do problema a ser discretizado é a de um caixa quadrada com nós sólidos no topo e na base e laterais abertas, o número de Reynolds foi escolhido como $Re=5$. Para manter o problema em termos gerais é considerado um sistema adimensional em que as variáveis características básicas l_0 e t_0 são unitárias, obtendo-se a seguinte expressão para a viscosidade:

$$\nu = \frac{1}{Re} \quad (5.10)$$

No sistema lattice o parâmetro de relaxação foi escolhido como $\omega=1.0$ e o comprimento unitário do canal foi discretizado com $N=20$. Os outros parâmetros são calculados como descrito no item 5.2.1 e são apresentados na Tabela 5.3. Note que a restrição de número de Mach baixo para fluidos incompressíveis é cumprida.

Tabela 5.3. Parâmetros do sistema físico adimensional e do sistema lattice usados na simulação de fluxo Poiseuille.

Sistema físico adimensional	Sistema lattice	Fator de conversão
$l_0 = 1$	$N = 20$	$\delta_x = 0.05$
$t_0 = 1$	$N_t = 480$	$\delta_t = 2.08 \times 10^{-3}$
$u_0 = 1$	$u_{lb} = 0.042$	$\delta_t / \delta_x = 0.042$
$\rho_0 = 1.0$	$\rho_{lb} = 1.0$	$\rho = \rho_{lb}$
$\nu = 0.2$	$\nu_{lb} = 1/6, \omega = 1.0$	$\delta_t / \delta_x^2 = 0.832$

5.2.2.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS

Condições de contorno e de não escorregamento (bounce-back) foram implementadas neste problema segundo a proposta de Zou & He (1997). Os nós no topo e na base de domínio foram definidos como nós sólidos com condição de não escorregamento. Na entrada do canal a condição de contorno é de um perfil de velocidade parabólico, segundo a Eq. (5.8). G foi obtido a partir da Eq. (5.9) com $\bar{u} = u_{lb}$. A condição na saída é de pressão (densidade) constante e igual a 1.0. As funções de distribuição de equilíbrio foram inicializadas com $\rho = 1.0$, $u_x = u_{lb}$ e $u_y = 0.0$.

5.2.2.3 RESULTADOS

O critério de parada do programa é o de estado estacionário, definido pela expressão (Zou & He, 1997):

$$\frac{\sum_i \sum_j |u_x(i, j, t + \Delta t) - u_x(i, j, t)| + |u_y(i, j, t + \Delta t) - u_y(i, j, t)|}{\sum_i \sum_j |u_x(i, j, t)| + |u_y(i, j, t)|} \leq Tol \quad (5.11)$$

onde a tolerância (Tol) foi fixada em 1×10^{-13} . Na Figura 5.3 aparece o campo escalar de densidades (pressão) obtidas com o método de lattice Boltzmann e representadas em uma escala de cores. Aparece também o campo vectorial de velocidades representado por setas cuja direção indica a direção da velocidade no nó correspondente e cujo comprimento indica a magnitude do vetor no ponto.

As velocidades ao longo do domínio seguem o perfil de fluxo teórico de Poiseuille, onde a componente vertical é zero e a velocidade máxima é atingida no meio da seção vertical. Por outro lado, a queda de pressão entre a entrada e a saída é descrita por uma variação sutil das densidades.

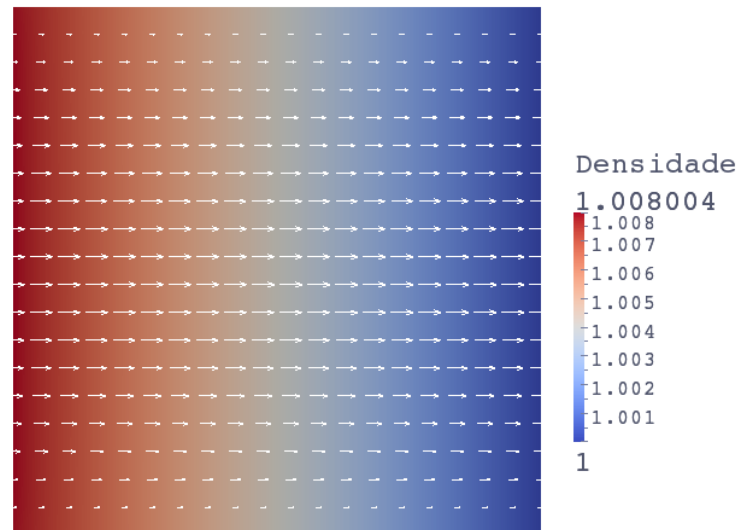


Figura 5.3. Campo vectorial de velocidades e campo escalar de densidades em um fluxo tipo Poiseuille simulado pelo método lattice Boltzmann com $Re = 5$.

Na Figura 5.4 foram plotados o perfil teórico de velocidades e os perfis obtidos com o método de lattice Boltzmann em seções na entrada, no meio e no final do domínio simulado. Note-se como na saída a restrição de pressão constante produz naturalmente o perfil de velocidades desejado. A correspondência entre os resultados teóricos e os resultados do método é notável. Segundo Zou & He (1997) o método é de segunda ordem em acurácia para este tipo de problema. Os resultados satisfatórios obtidos na simulação permitiram passar à fase seguinte que envolve problemas mais complexos.

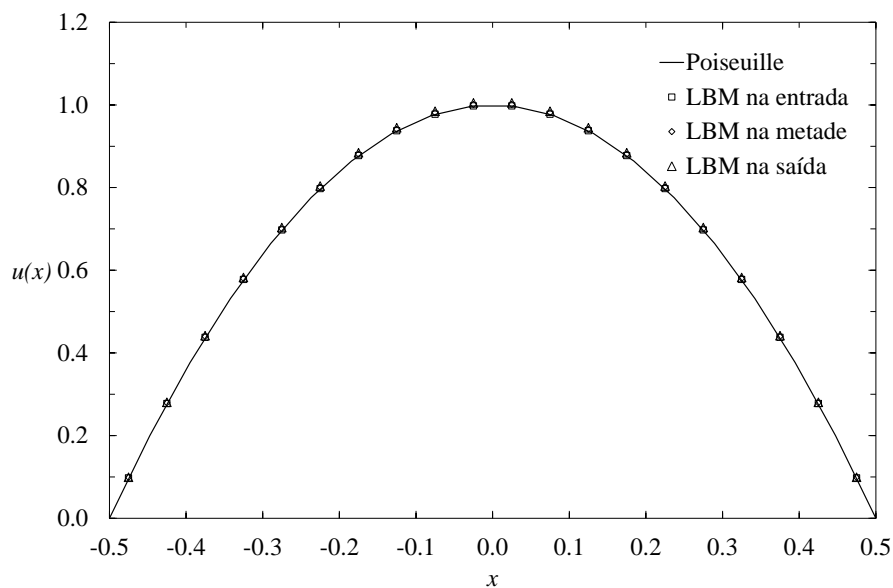


Figura 5.4. Perfil teórico de velocidades em um fluxo tipo Poiseuille com $Re = 5$ e perfis obtidos com o LBM.

5.2.3 FLUXO PASSANDO AO REDOR DE UM CILINDRO CIRCULAR

O fluxo ao redor de um cilindro (um disco em 2D) é um problema de grande interesse na dinâmica de fluidos computacional, pois ele tem sido amplamente estudado por meio de trabalhos empíricos. Uma das características mais interessantes deste problema é que para uma geometria simples fixa é possível observar diferentes fenômenos em função das condições de fluxo. Com frequência este problema é simulado para avaliar o desempenho de um esquema numérico sob diversas condições (p. ex., Zienkiewicz *et al.* (2005b) e Guo *et al.* (2000)). Por outro lado, os trabalhos empíricos desenvolvem relações entre a força de arraste exercida sobre o cilindro e o número de Reynolds (Lienhard, 1966). Em outros casos, o interesse é uma análise visual dos padrões de fluxo (Taneda, 1956, 1976). Esses resultados também podem ser usados para validar qualitativamente o comportamento de um determinado método numérico.

5.2.3.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA E DISCRETIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS

A implementação do problema de fluxo ao redor de um cilindro requer das mesmas condições usadas no fluxo Poiseuille e de condições de não escorregamento no contorno do cilindro. O código desenvolvido para este caso é apresentado no Anexo C.

A geometria do problema de fluxo passando por um cilindro é apresentada na Figura 5.5. Para manter o problema em termos simples a geometria a ser discretizada é definida em um sistema adimensional onde as variáveis características (l_0 , t_0) são unitárias. De novo, a viscosidade neste sistema pode ser calculada pela Eq. (5.10). Observe que o comprimento característico neste caso é o diâmetro do cilindro.

Foram simulados fluxos com vários números de Reynolds com o objetivo de analisar diferentes regimes e compará-los qualitativamente com as observações apresentadas por (Taneda, 1956). Os números de Reynolds simulados foram $Re = 5, 20, 40$ e 50 .

Inicialmente foi definida uma velocidade baixa no sistema lattice ($u_{lb} = 0.1$), de forma a cumprir com a restrição para a compressibilidade, o parâmetro de relaxação foi assumido como $\omega = 1.0$ e a viscosidade do método foi calculada com a Eq. (4.5). Pelas escolhas anteriores a resolução a ser utilizada em cada simulação fica definida em função do número de Reynolds:

$$N = \frac{v_{lb} Re}{u_{lb}} \quad (5.12)$$

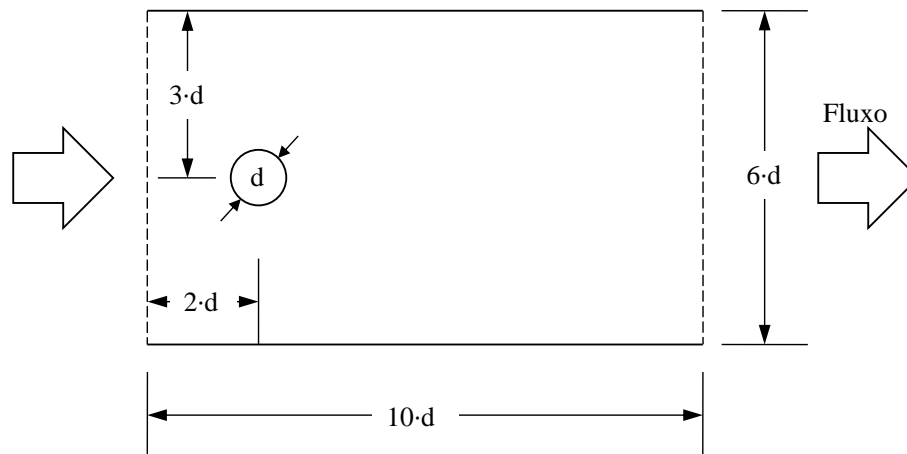


Figura 5.5. Configuração geométrica usada para simulação de fluxo ao redor de um cilindro circular.

Conseqüentemente, o tempo característico no sistema lattice N_t também fica em função do Re , sendo calculado com a Eq. (5.6). Ressalta-se que números de Reynolds maiores requerem uma maior resolução, o que é importante em termos de custos computacionais. Desta forma ficam definidos todos os parâmetros necessários para executar a simulação para cada número de Reynolds.

5.2.3.2 CONDIÇÕES DE CONTORNO E CONDIÇÕES INICIAIS

As condições de contorno nestas simulações são as mesmas utilizadas no problema de fluxo de Poiseuille. Condições de não escorregamento foram aplicadas nos nós correspondentes ao cilindro e no topo e base do domínio numérico. Na entrada do canal a condição de contorno é de um perfil de velocidade parabólico enquanto que na saída a condição é de pressão (densidade) constante e igual a 1.0. As funções de distribuição de equilíbrio foram inicializadas com $\rho = 1.0$, $u_x = u_{lb}$ e $u_y = 0.0$.

5.2.3.3 RESULTADOS

A Figura 5.6 mostra os resultados obtidos por Taneda (1956) ao analisar o comportamento das linhas de fluxo atrás de um cilindro em função do número de Reynolds do fluxo.

Na Figura 5.7 é apresentado o resultado da simulação de fluxo com $Re = 5$ usando o método lattice Boltzmann. Neste caso a simulação foi rodada até atingir o estado estacionário do sistema, definido pela Eq. (5.11) com tolerância de 1×10^{-3} . A configuração das linhas de fluxo para este número de Reynolds é claramente laminar, onde são observadas camadas que se mantêm estáveis, sem sofrer separação ao longo do sistema. Segundo Taneda (1956) esta

configuração é mantida para números de Reynolds próximos de cinco e após essa faixa acontece separação das linhas de fluxo na forma de vórtices gêmeos por trás do cilindro.

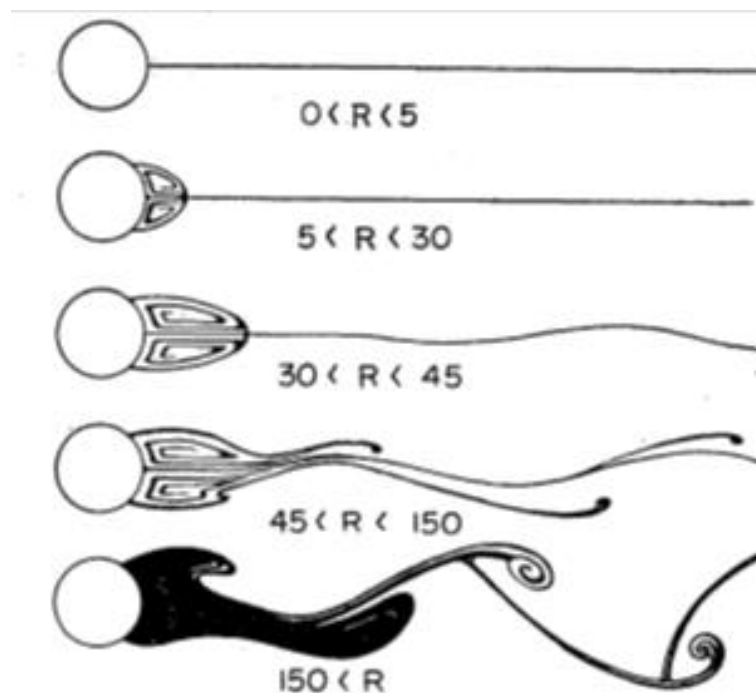


Figura 5.6. Processo do desenvolvimento da estela por trás de um cilindro circular (Taneda, 1956).

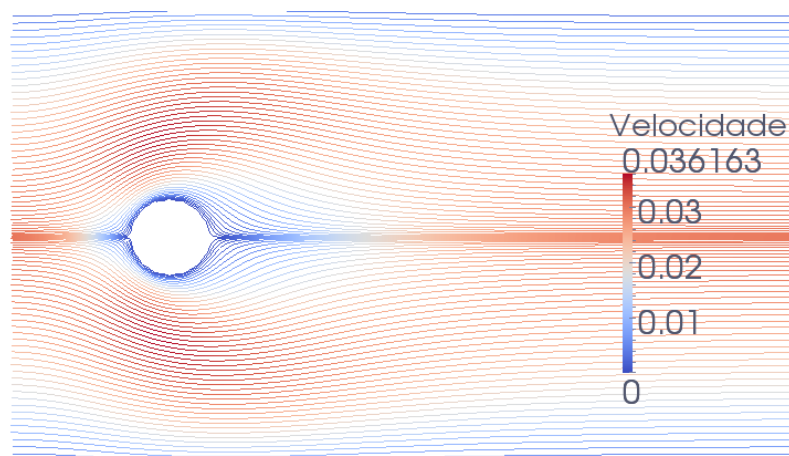


Figura 5.7. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 5$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em unidades da malha.

A Figura 5.8 apresenta a relação entre o comprimento dos vórtices gêmeos formados por trás do cilindro, o diâmetro do cilindro e o número de Reynolds; desenvolvida pelo mesmo autor. Taneda ainda descreve como os vórtices gêmeos permanecem estáveis até números de Reynolds próximos de 45 e a partir dessa faixa os vórtices assumem outras configurações.

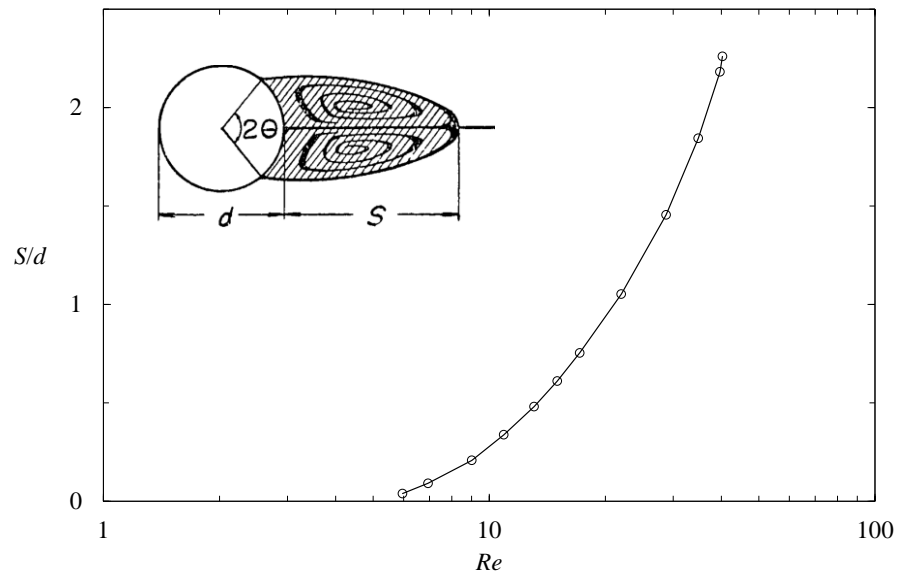


Figura 5.8. Gráfico da relação entre o diâmetro do cilindro, o comprimento dos vórtices gêmeos e o número de Reynolds (modificado de Taneda, 1956).

A simulação com o método lattice Boltzmann para $Re = 20$ (Figura 5.9) segue as características descritas no parágrafo anterior. Ao calcular a relação entre o diâmetro e o comprimento dos vórtices foi obtido $S/d = 1.02$, que é muito próximo da proposta de Taneda ($S/d \approx 0.9$).

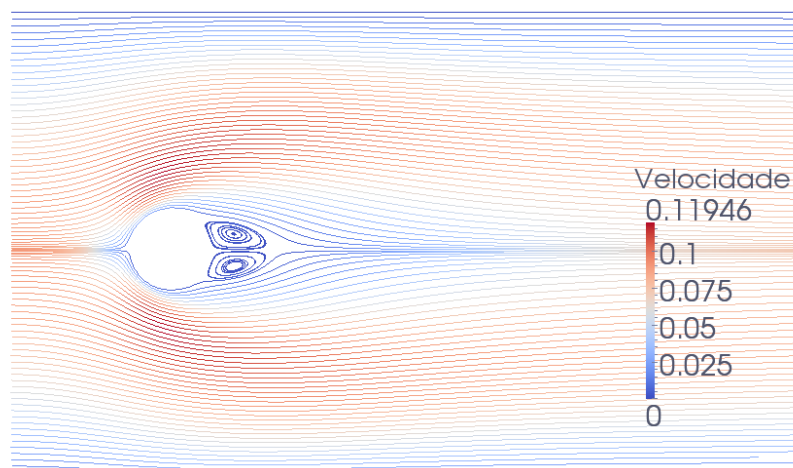


Figura 5.9. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 20$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em unidades da malha.

Taneda também mediu o ângulo de formação dos vórtices gêmeos (Figura 5.8) para $Re = 40$ e encontrou $2\theta = 53^\circ$. O ângulo calculado para os resultados do método lattice Boltzmann nestas condições de fluxo (Figura 5.10) é $2\theta = 57^\circ$. Pequenas oscilações na

configuração geométrica dos vórtices gêmeos e nas linhas de fluxo por trás deles foram observadas, e isto concorda com as observações experimentais. A relação entre o diâmetro e o comprimento dos vórtices neste caso é de $S/d = 2.12$, que é exatamente o valor relatado por Taneda.

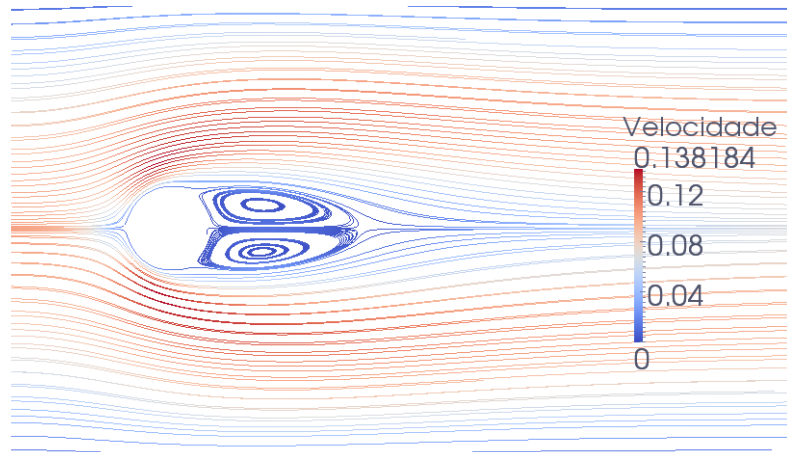


Figura 5.10. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 40$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em unidades da malha.

Os resultados da simulação lattice Boltzmann com $Re = 50$ (Figura 5.11) mostram que tanto a configuração de vórtices gêmeos quanto as linhas de fluxo por trás deles começam a oscilar. Note-se aqui que o vórtice inferior é menor. Configurações de vórtices como as descritas na Figura 5.6 não foram observadas, porém esses comportamentos são associados a uma faixa de números de Reynolds e não a um valor específico.

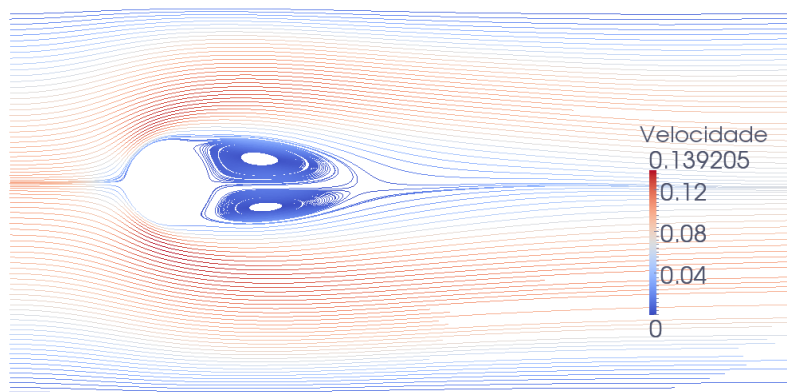


Figura 5.11. Linhas de fluxo passando por um cilindro circular para $Re = 50$ simulado com o método lattice Boltzmann. A escala de cores indica a magnitude da velocidade em unidades da malha.

A acurácia dos resultados do método para este problema pode ser influenciada por fatores

como a proximidade do cilindro com as paredes e a representação escalonada das superfícies curvas, decorrente da forma do domínio computacional. Contudo os resultados obtidos mostram que o código desenvolvido para o método lattice Boltzmann responde adequadamente na simulação de problemas de fluxo em diferentes regimes e na presença de obstáculos. Com isto, foi fechado o primeiro estágio proposto no desenvolvimento desta pesquisa.

5.3 APLICAÇÃO PARA A DETERMINAÇÃO DE PROPRIEDADES INTRÍNSECAS

Os resultados da etapa anterior permitiram validar o método lattice Boltzmann para simulação de diferentes regimes de fluxo em domínios com obstáculos. Nesta dissertação são usados o método lattice Boltzmann e a lei de Darcy-Forchheimer para encontrar estimativas das propriedades intrínsecas de meios porosos em meios porosos idealizados, formados por partículas circulares.

Como a acurácia dos resultados obtidos no método numérico depende dos parâmetros usados para discretizar o problema, estes devem ser definidos adequadamente a partir de um estudo paramétrico.

5.3.1 ANÁLISE DA RESOLUÇÃO E DO PARÂMETRO DE RELAXAÇÃO

Na maioria de esquemas numéricos para simulação de fluxo, a resolução (N) é um dos parâmetros fundamentais, pois afeta diretamente a acurácia do método e o tempo computacional de uma dada simulação. Portanto, a escolha da resolução deve obedecer a dois critérios concomitantes: minimização do erro por discretização e otimização do tempo computacional. Em uma simulação lattice Boltzmann o parâmetro de relaxação (ω) também é importante, pois ele está associado à viscosidade e não pode assumir valores arbitrários.

Para avaliar o efeito da resolução nos resultados é simulado o mesmo sistema várias vezes mudando a resolução a cada rodada enquanto que as outras variáveis de entrada permanecem fixas em todas as simulações. O efeito da variação é observado no valor de alguma variável calculada a partir dos resultados.

5.3.1.1 GEOMETRIA DO PROBLEMA PARA ANÁLISE DA RESOLUÇÃO

O efeito da resolução foi avaliado em um arranjo uniforme de partículas circulares de diâmetro $d_0 = 2 \times 10^{-3} m$, que é o diâmetro de uma areia grossa a média. A configuração

geométrica do problema é apresentada Figura 5.12. O número de Reynolds foi fixado em $Re = 0.1$, a viscosidade cinemática é $\nu = 1.0 \times 10^{-6} m^2 s^{-1}$ e a densidade do fluido como $\rho = 1000.0 kg/m^3$, respectivamente.

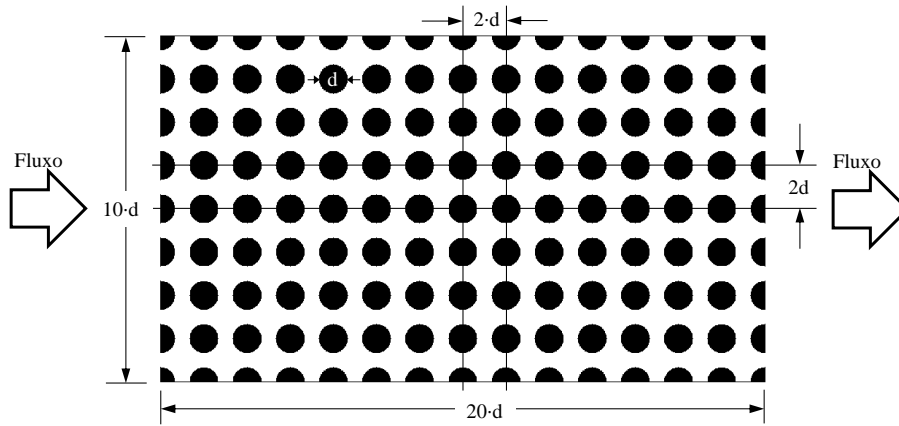


Figura 5.12. Arranjo uniforme de círculos usado para estudar a resolução e parâmetro de relaxação.

No sistema lattice o parâmetro de relaxação foi escolhido como $\omega = 1.0$, o diâmetro de referência foi discretizado usando $N = 10, 15, 20, \dots, 80$ e a densidade foi $\rho_{lb} = 1.0$. A Tabela 5.4 resume os parâmetros iniciais para a simulação e os fatores de conversão entre sistema real e o sistema discreto. Os nós no topo e na base do domínio foram definidos como sendo sólidos. Na entrada do domínio foram definidas condições de velocidade uniforme constante e na saída a condição é de pressão (densidade) constante. As simulações foram executadas até alcançar um estado estacionário com uma tolerância calculada pela Eq. (5.11).

Tabela 5.4. Parâmetros do problema para análise da resolução em unidades físicas e unidades lattice.

Sistema físico	Sistema lattice	Fator de conversão
$d_0 = 2.0 \times 10^{-3} m$	N	$\delta_x = d_0 / N$
$t_0 = 39.92 s$	N_t	$\delta_t = t_0 / N_t$
$u_0 = 5.01 \times 10^{-5} m/s$	$u_{lb} = N / N_t$	δ_t / δ_x
$\nu = 1.0 \times 10^{-6} m^2 s^{-1}$	$\nu_{lb} = 1/6$	δ_t / δ_x^2
$\rho_0 = 1000.0 kg/m^3$	$\rho_{lb} = 1.0$	$\delta_\rho = \rho_0 / \rho_{lb}$

5.3.1.2 EFEITO DA RESOLUÇÃO E DO PARÂMETRO DE RELAXAÇÃO NO CÁLCULO DA PERMEABILIDADE E DA TORTUOSIDADE

O efeito da resolução é estudado ao observar a variação da permeabilidade intrínseca e da tortuosidade. Como o número de Reynolds é baixo, a permeabilidade pode ser calculada usando a lei de Darcy:

$$K = \frac{\bar{u}\mu}{\nabla\bar{p}} \quad (5.13)$$

onde K é a permeabilidade intrínseca do fluido, $\nabla\bar{p}$ e o gradiente direcional da pressão e \bar{u} é a média volumétrica da magnitude da velocidade. A velocidade no sistema lattice é transformada para unidades físicas usando os parâmetros de discretização:

$$\bar{u}_p = \bar{u}_{lb} \frac{\delta_t}{\delta_x} \quad (5.14)$$

onde o subscrito p indica unidades físicas enquanto lb unidades no sistema lattice Boltzmann. A pressão no sistema lattice Boltzmann está relacionada com a densidade por meio da equação de estado seguinte:

$$p = c_s^2 \rho = \frac{\rho}{3} \quad (5.15)$$

Portanto, a expressão para calcular a pressão no sistema física a partir do sistema lattice Boltzmann é:

$$p_p = c_s^2 \rho_{lu} \delta_\rho \frac{\delta_x^2}{\delta_t^2} \quad (5.16)$$

Consequentemente, o gradiente direcional da pressão é calculado como:

$$\nabla\bar{p} = \left(\frac{\Delta\bar{p}}{L} \right)_p = \delta_\rho \frac{\delta_x}{\delta_t^2} \frac{(\Delta\rho_{lu})}{3N_i} \quad (5.17)$$

onde $\Delta\rho_{lu}$ indica a diferença entre a média das densidades na entrada do domínio e a média das densidades na saída. A viscosidade dinâmica é $\mu = \nu\rho$, portanto a conversão para unidades físicas é:

$$\mu_p = \rho_p \nu_p = \rho_{lu} \delta_\rho \nu_{lu} \frac{\delta_x^2}{\delta_t} \quad (5.18)$$

Ao combinar as Eqs. (5.14) a (5.18) obtém-se a seguinte expressão para a permeabilidade intrínseca em termos das variáveis discretas e do parâmetro de discretização:

$$K = \frac{3\bar{u}_{lb}\nu_{lu}N_i}{\Delta\rho_{lu}} \delta_x^2 \quad (5.19)$$

Na Figura 5.13 é apresentada a variação da permeabilidade normalizada com a resolução. Para N superiores a 25 o valor da permeabilidade se mantém estável e a porcentagem de variação entre duas resoluções consecutivas é inferior a 2.6%. Uma malha com resolução $N=30$ é uma boa escolha, pois resoluções superiores não implicam em variações significativas do valor da permeabilidade.

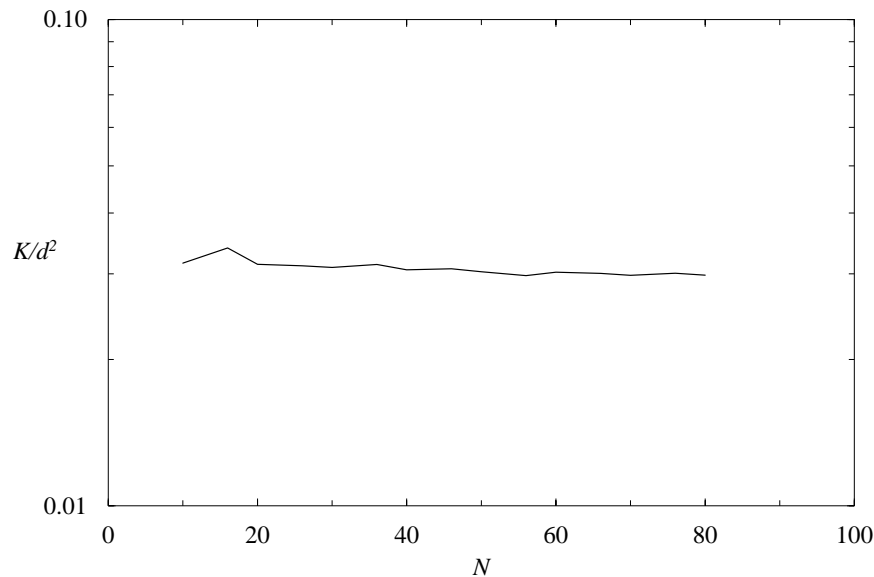


Figura 5.13. Variação da permeabilidade com a resolução da malha.

Para avaliar o efeito da resolução na tortuosidade é utilizada a expressão proposta por Nabovati & Sousa (2007):

$$\zeta = \frac{\sum_N |\vec{u}_{tb}|}{\sum_N |u_{tb}^i|} \quad (5.20)$$

onde as barras indicam a magnitude do vetor, o sobrescrito i indica a direção em que a propriedade está sendo calculada e o somatório é feito sobre todos os pontos fluidos no domínio. A tortuosidade calculada para as diferentes resoluções é apresentada na Figura 5.14. A variação percentual deste parâmetro, calculada entre duas resoluções consecutivas, é inferior a 0.13%. Foi concluído que no problema simulado os valores dos parâmetros têm pequenas taxas de variação em função da resolução. A variação é menor para resoluções maiores ou iguais do que $N = 25$, mantendo-se aproximadamente estável.

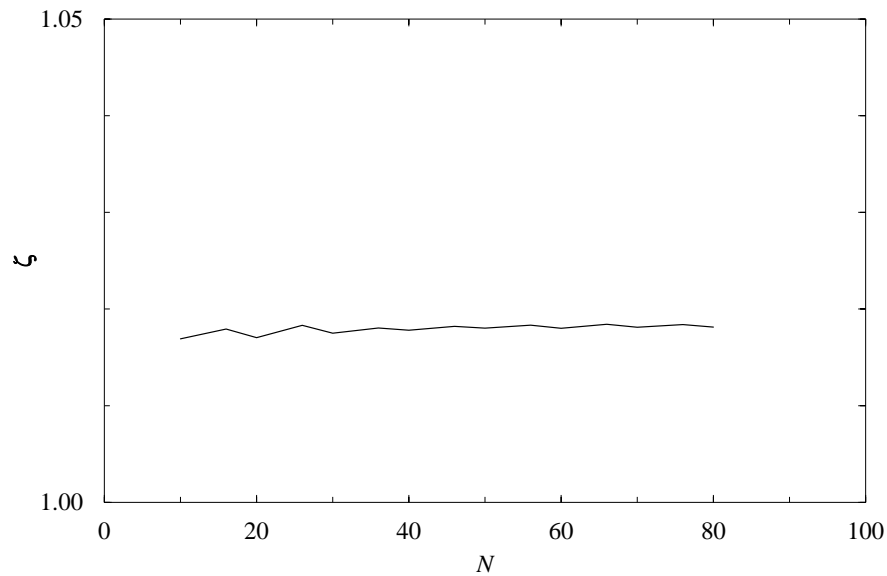


Figura 5.14. Variação da tortuosidade com a resolução da malha.

Assumindo $N = 30$, procedeu-se à verificação do efeito do parâmetro de relaxação nas estimativas de permeabilidade e tortuosidade. O valor do parâmetro de relaxação é restrito pelo requisito de viscosidade positiva que por sua vez é definida como:

$$v_{lb} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{\omega} - \frac{1}{2} \right) \quad (5.21)$$

onde $1/\omega$ deve ser maior que 0.5. O efeito do parâmetro de relaxação na permeabilidade e na tortuosidade foi estudado definindo a variável $\tau = 1/\omega$, chamada comumente de tempo de relaxação. Foram feitas simulações para os valores $\tau = 0.6, 0.8, 1.2, 1.4$ na mesma malha definida anteriormente mantendo a resolução fixa ($N = 30$). A Figura 5.15 apresenta a variação da permeabilidade em função do tempo de relaxação, e a variação percentual neste caso é sempre inferior a 3.9%.

No caso da tortuosidade (Figura 5.16), as variações percentuais entre medidas consecutivas são inferiores a 0.028%. Pode ser concluído aqui que a tortuosidade é pouco influenciada pela resolução e/ou pelo tempo de relaxação, nas faixas de variação consideradas nestas simulações.

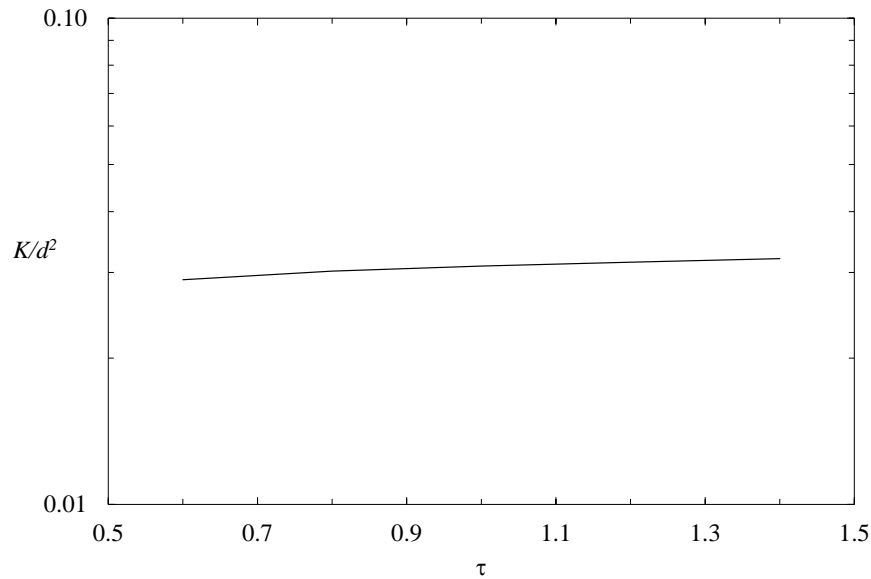


Figura 5.15. Variação da permeabilidade com o parâmetro de relaxação.

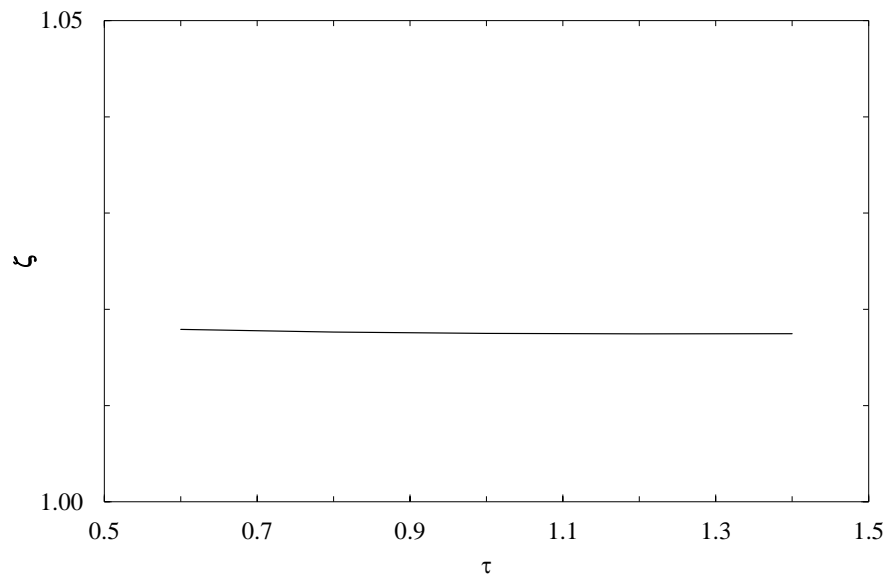


Figura 5.16. Variação da tortuosidade com o parâmetro de relaxação

Quando o parâmetro de relaxação e a resolução são definidos *a priori* em uma simulação, só há liberdade para escolher um entre Re , u_{lb} ou N_t , o resto fica em função do escolhido devido às relações mencionadas no item 5.2.1. Portanto, ao definir uma velocidade máxima $u_{lb\max}$, com o objetivo de cumprir a restrição de número de Mach baixo, os outros parâmetros ficam em função desta. Então o N_t é calculado da Eq. (5.6) e o máximo número de Reynolds que poderá ser simulado mantendo o erro por compressibilidade baixo será:

$$Re_{\max} = \frac{u_{lb\max} N}{\nu_{lb}} \quad (5.22)$$

A Figura 5.17 apresenta o máximo número de Reynolds que pode ser simulado sob a restrição de número de Mach baixo (assumindo $u_{lb\acute{m}ax} = 0.06$) para várias resoluções da malha. Note-se que para simular números de Reynolds altos em ocasiões pode ser mais efetivo diminuir o valor do tempo de relaxação do que aumentar a resolução.

Já que o interesse desta pesquisa é estudar a lei de Darcy-Forchheimer o valor do parâmetro de relaxação deve ser tal que possam ser simulados fluxos onde a contribuição inercial seja importante ($Re > 1$). Porém, é sabido que instabilidades numéricas surgem quando o tempo de relaxação é próximo de 0.5 (Sukop & Thorne, 2006). Finalmente, foi escolhido um valor $\tau = 0.65$, obtendo $Re_{\max} = 35$.

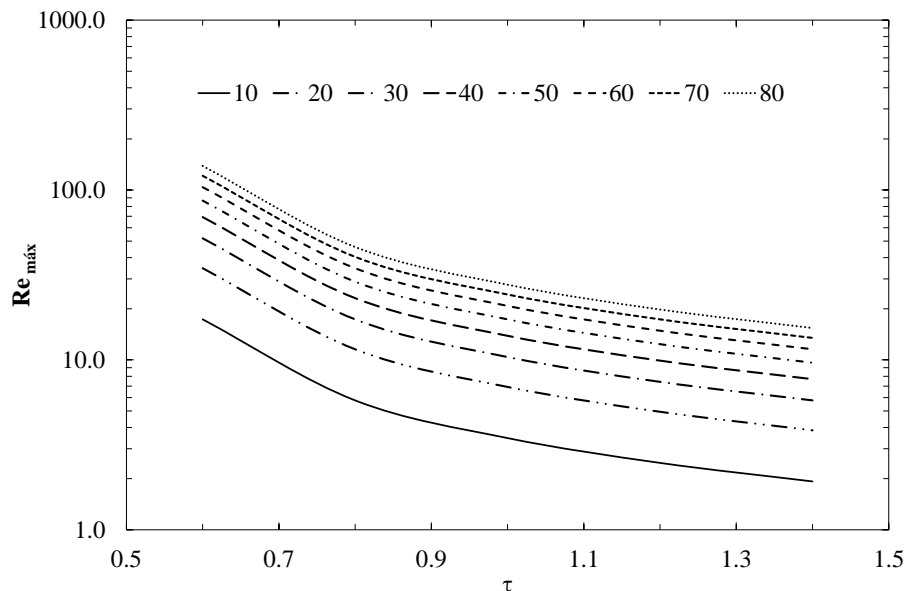


Figura 5.17. Máximo número de Reynolds que pode ser simulado em função do tempo de relaxação e da resolução com $u_{lb\acute{m}ax} = 0.06$.

5.3.2 ESTUDO DA LEI DE DARCY FORCHHEIMER

Uma vez que foram definidas as variáveis do sistema discreto é possível executar simulações sobre geometrias de meios porosos com o objetivo de determinar os parâmetros intrínsecos dos mesmos.

5.3.2.1 GEOMETRIA DOS MEIOS POROSOS SIMULADOS

Os domínios considerados nas simulações consistem em meios porosos idealizados, formados por partículas circulares. Estes meios porosos idealizados foram construídos de duas formas diferentes: uma distribuição ordenada de partículas de diâmetro igual e uma

distribuição aleatória de partículas de diâmetro aleatório. A ideia de ter dois tipos de arranjos resulta da necessidade de estudar as diferenças dos parâmetros calculados para meios com a mesma porosidade macroscópica, mas com arranjos de grãos diferentes. O tamanho do domínio simulado e o diâmetro médio do grão são iguais em todos os arranjos gerados, de forma a manter os parâmetros do método selecionados no item anterior. Em ambos os tipos de arranjos foram geradas estruturas diferentes, cada uma com um valor de porosidade macroscópica na faixa de 50% a 75%. O diâmetro médio dos arranjos gerados foi igual em todos os casos ($d = 2 \times 10^{-3} m$) e foi discretizado com 30 unidades de malha. A distribuição regular é mostrada na Figura 5.18.

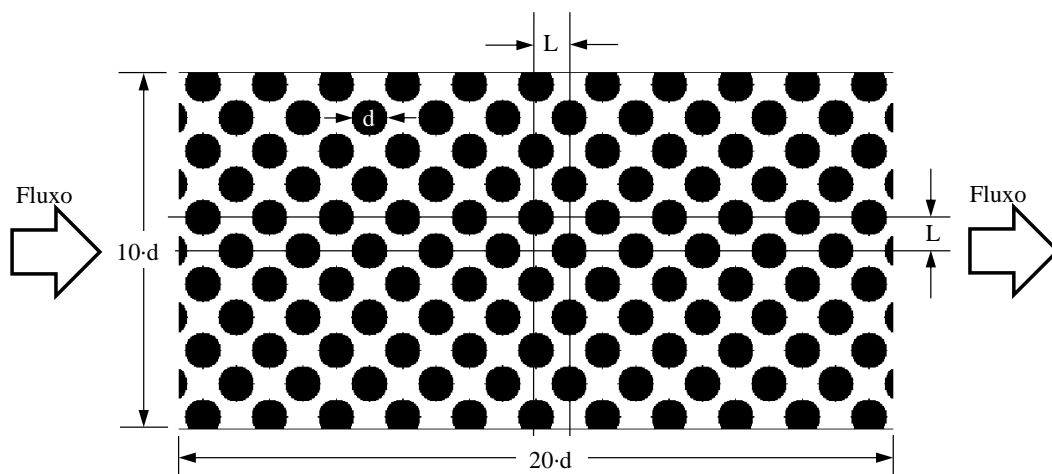


Figura 5.18. Arranjo regular de partículas usado para estudar a lei de Darcy-Forchheimer.

Diferentes porosidades são obtidas ao variar o valor de L . Quando o comprimento L iguala ao diâmetro, as partículas se tocam impedindo o fluxo em 2D. Porém no método de lattice Boltzmann é recomendável que os canais de fluxo tenham um comprimento superior a cinco unidades de malha (Aaltosalmi, 2005; Sukop & Thorne, 2006). Este requisito foi atendido por todos os arranjos gerados.

No segundo tipo de arranjo considerado, várias porosidades são criadas a partir da geração aleatória de cilindros circulares com diâmetros e posições aleatórias, escolhidos de uma distribuição de probabilidade uniforme. A geração aleatória deste tipo de arranjo implica em curvas granulométricas diferentes para cada porosidade, como mostrado na Figura 5.19. Para que a escolha da resolução feita se mantivesse válida para todos os arranjos gerados, o comprimento característico do problema devia ser igual em todos os arranjos. Portanto, o diâmetro médio era forçado durante a geração aleatória. No Anexo D são apresentados os códigos para geração de ambos os arranjos.

Cada rodada do código de distribuição aleatória das partículas gera uma estrutura porosa diferente para um mesmo valor de porosidade macroscópica. Só foi analisada uma configuração aleatória por cada porosidade, pois o resultado da simulação em um meio com distribuição aleatória serve apenas ao propósito de observar as diferenças com o arranjo de distribuição regular que tem os mesmos parâmetros macroscópicos. Ou seja, as análises feitas são válidas para cada estrutura gerada e não representam o comportamento de qualquer outra estrutura aleatória com os mesmos parâmetros macroscópicos que possa ser gerada pela mesma técnica.

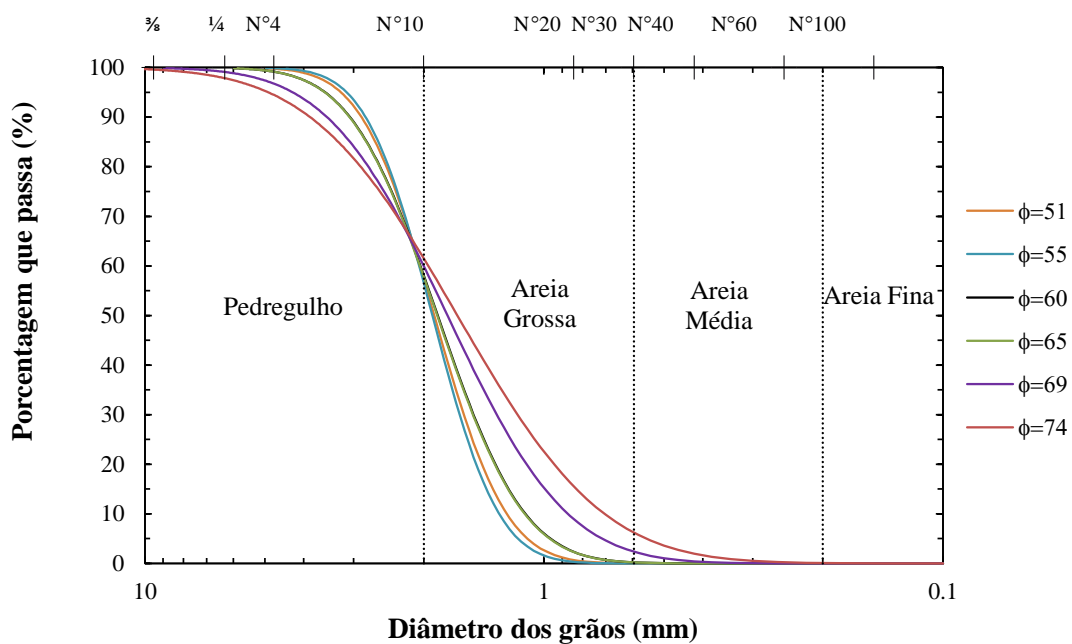


Figura 5.19. Curvas granulométricas dos arranjos gerados aleatoriamente com diferentes porosidades ϕ . Classificação de tamanhos segundo (Lambe, 2004)

5.3.2.2 SIMULAÇÕES E CÁLCULOS

Foram executadas simulações com números de Reynolds entre 0.5 e 30 até alcançar um estado estacionário com uma tolerância de 1.0×10^{-12} . Condições de não escorregamento (bounce – back) foram aplicadas no topo e na base de cada domínio numérico simulado. Na entrada, a condição é de velocidade uniforme constante enquanto que na saída a condição é de densidade constante. A porosidade dos arranjos foi calculada como:

$$\phi = \frac{N_f}{N_n} \times 100 \quad (5.23)$$

onde N_f é o número de nós fluídos e N_n é o número total de nós em uma simulação. A

permeabilidade e o coeficiente beta de Forchheimer são obtidos como os parâmetros de uma regressão linear da equação de Darcy-Forchheimer:

$$\frac{\nabla \bar{p}_{lb}}{\mu_{lb} \bar{u}_{lb}} = \frac{1}{K} + \beta \frac{\rho \bar{u}_{lb}^2}{\mu_{lb}} \quad (5.24)$$

onde o coeficiente adimensional β é a inclinação e o inverso da permeabilidade intrínseca é o intercepto, \bar{u}_{lb} , \bar{p}_{lb} e μ_{lb} são como mencionados no item 0. A tortuosidade foi calculada com a Eq. (5.20).

6 APRESENTAÇÃO DE RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados e analisados os resultados decorrentes das simulações executadas sobre os meios porosos idealizados definidos no item anterior.

6.1 ARRASTO

O termo arrasto é usado para se referir à força que age em um objeto sólido na direção da velocidade de fluxo relativa. A equação adimensionalizada de Darcy Forchheimer, Eq. (3.31), pode ser vista como a soma de um termo de arrasto viscoso (ou de Darcy) e um termo de arrasto inercial (ou de Forchheimer). Na Figura 6.1 aparece o arrasto calculado das simulações em meios porosos regulares e na Figura 6.2 o caso aleatório; a correlação de Ergun para fluxo através de camadas granulares, Eq. (3.32), também é plotada.

A contribuição do arrasto viscoso é descrita pelo trecho linear constante no começo das curvas. No caso do arranjo regular a contribuição do termo viscoso domina o arrasto total em uma faixa de números de Reynolds baixos, até $Re \approx 4$. Para números de Reynolds acima desse valor a contribuição das forças inerciais (termo de Forchheimer) torna-se mais importante. Sob estas condições a lei de Darcy pode levar a um erro significativo. O valor do arrasto diminui com o aumento da porosidade.

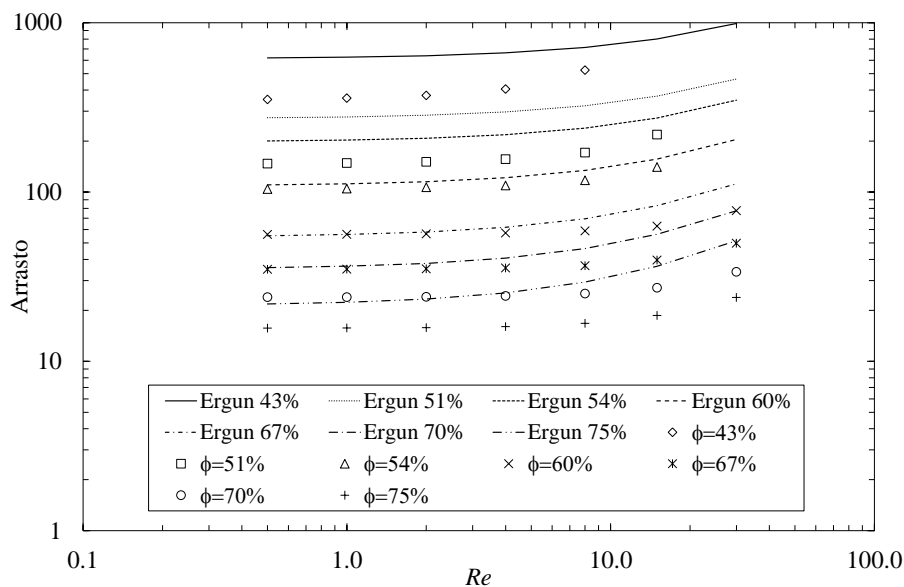


Figura 6.1. Resultados do arraste de Darcy-Forchheimer para várias porosidades e números de Reynolds em um arranjo com distribuição regular.

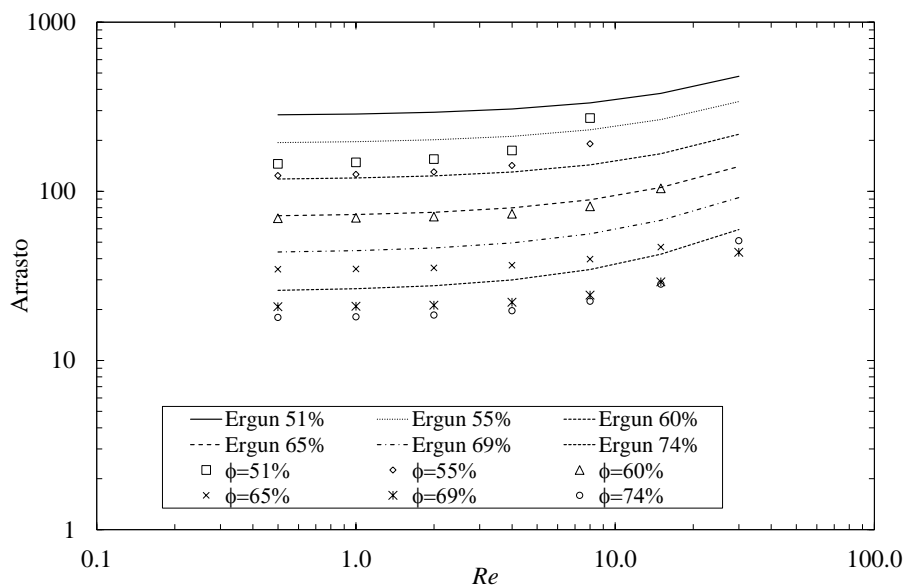


Figura 6.2. Resultados do arraste de Darcy-Forchheimer para várias porosidades e números de Reynolds em arranjos gerados aleatoriamente.

Nos arranjos aleatórios a contribuição inercial só entra no arrasto total quando números de Reynolds próximos de $Re \approx 2$. O valor do arrasto também diminui com o aumento da porosidade, porém esta relação não foi cumprida para Reynolds altos nas simulações com porosidades altas ($\phi = 69\%$ e $\phi = 74\%$). Neste caso a maior proporção de partículas grossas na granulometria (Figura 5.19) do meio poroso com $\phi = 74\%$ pode favorecer um arrasto inercial maior. Portanto a relação entre o arrasto e a porosidade macroscópica pode não ser muito clara para números de Reynolds altos e porosidades altas, a proximidade com o regime a fluxo livre também pode influenciar nestes casos.

As contribuições inerciais são claramente mais importantes no caso de arranjos aleatórios, p. ex., no arranjo aleatório com porosidade $\phi = 51\%$ o valor do arrasto para $Re = 8$ é de 191, enquanto que no caso regular com a mesma porosidade o valor é de 170. Por outro lado, as contribuições viscosas são praticamente as mesmas em ambos os casos, p. ex. para $Re = 1$ o valor é de 148 tanto para o aleatório quanto para o regular. Comparações qualitativas podem ser feitas para outros valores de porosidade obtendo resultados similares.

Os valores obtidos pelo método lattice Boltzmann para os dois tipos de arranjo analisados subestimam os obtidos pela correlação de Ergun. Porém a correlação está escrita em termos de uma propriedade macroscópica e foi desenvolvida para um arranjo regular de partículas em 3D. Desvios observados nos arranjos aleatórios podem ser decorrentes da discretização e das condições de contorno.

Para estudar as contribuições viscosa e o inercial separadamente, é calculada a proporção

do arrasto inercial em relação ao arrasto total:

$$\gamma = \frac{d\beta Re}{d^2/K + d\beta Re} \times 100 \quad (6.1)$$

Na proposta de Ergun (Figura 6.3) a fração do arrasto correspondente às forças inerciais cresce com o aumento da porosidade e obviamente com o aumento do número Reynolds, porém a contribuição inercial só chega a ser predominante (>50%) para $Re=30$ e para porosidades maiores que 60%.

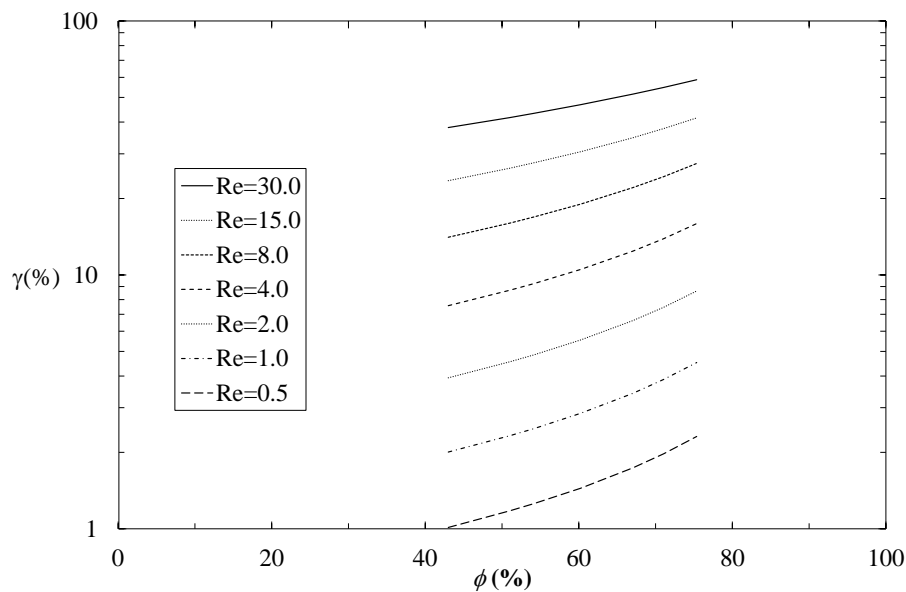


Figura 6.3. Fração do arrasto de Forchheimer em relação ao arrasto total no modelo de Ergun para camadas de partículas granulares.

No caso de meios porosos com distribuição regular (Figura 6.4) os resultados do método lattice Boltzmann mostram curvas com concavidade voltada para cima, com valores mínimos no intervalo de porosidades entre 55 e 65%. Neste caso não há uma dependência clara entre o aumento da porosidade macroscópica e o arrasto inercial, portanto este termo não pode ser analisado em função da porosidade macroscópica. Por outro lado, e em concordância com a proposta de Ergun, o aporte inercial neste caso cresce com o número de Reynolds e só chega a ser predominante em $Re=30$. Nos meios porosos com distribuição aleatória de partículas (Figura 6.5) a fração de arraste de Forchheimer forma curvas com concavidade voltada para cima e com valores mínimos no intervalo de porosidades entre 55 e 65%. A análise feita para o caso regular também é válida neste caso.

Mais simulações em arranjos com outras porosidades poderiam fornecer uma tendência melhor definida em ambos os casos. No caso aleatório, as oscilações também podem ser

devidas ao fato de que só está sendo considerada uma configuração de partículas para cada porosidade estudada como mencionado no item 5.3.2.1.

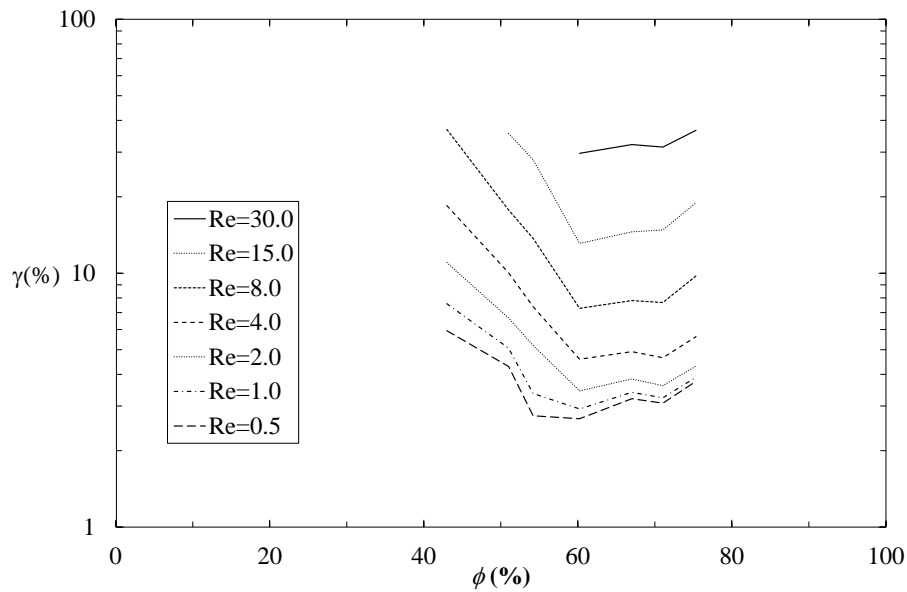


Figura 6.4. Fração do arraste de Forchheimer para o arranjo regular com o método de lattice Boltzmann.

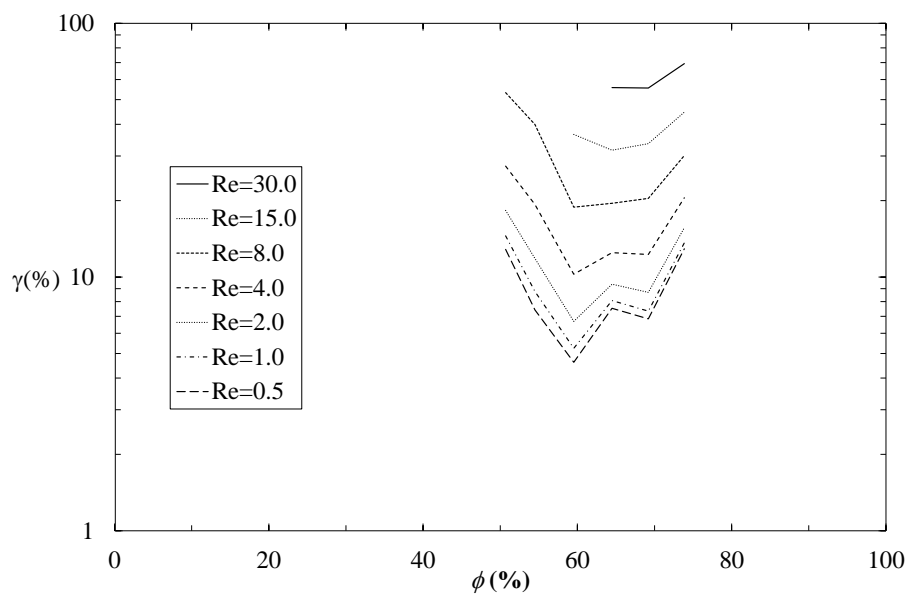


Figura 6.5. Fração do arraste de Forchheimer para o arranjo aleatório com o método de lattice Boltzmann.

Deve ser observado que há ausência de dados para porosidades baixas e números de Reynolds altos, devido ao surgimento de instabilidades numéricas nas simulações. Nestes casos, canais de fluxo pequenos combinados com velocidades altas provocam um aumento exagerado da densidade macroscópica. Devido aos canais pequenos as distribuições de

partículas se concentram e aparece um erro numérico que pode ser propagado ao resto do domínio.

6.2 PERMEABILIDADE INTRÍNSECA

A permeabilidade intrínseca de cada um dos arranjos foi calculada a partir da regressão linear dos dados das simulações, como mencionado no item 5.3.2. A Figura 6.6 apresenta os resultados de permeabilidade normalizada com o tamanho de grão, ou seja, o inverso do termo de viscosidade na equação de Darcy-Forchheimer; o valor da correlação de Ergun também é apresentado.

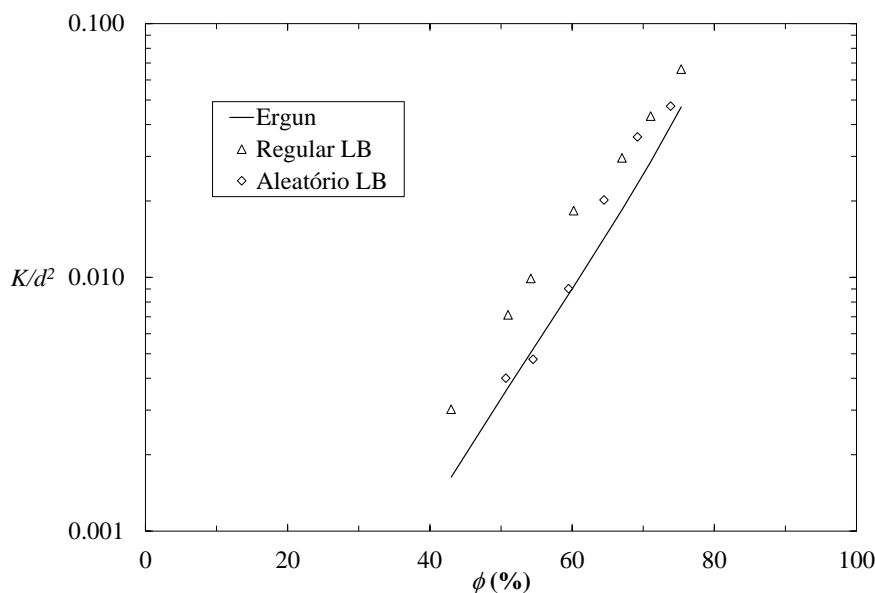


Figura 6.6. Permeabilidade normalizada em meios porosos com distribuição regular de partículas e com distribuição aleatória, calculada com o método lattice Boltzmann.

Em todos os casos a permeabilidade apresenta uma tendência exponencial em relação à porosidade. A tendência é claramente mais estável no caso de meios porosos com distribuição regular. As estimativas de permeabilidade dos arranjos regulares calculadas pelo método lattice Boltzmann são maiores do que as do modelo de Ergun, e no caso aleatório isto só acontece para porosidades maiores que 60%.

A permeabilidade dos meios porosos gerados aleatoriamente é menor do que a dos meios com distribuição regular. Este resultado era esperado intuitivamente, pois o percurso do fluxo em meios porosos aleatórios segue por caminhos mais intrincados. De novo, a correlação de Ergun não leva em conta estas particularidades. Por outro lado, para porosidades mais altas os valores de permeabilidade de ambos os arranjos se aproximam entre si, devido à iminência da

condição de superfície livre. Um ajuste exponencial dos dados de permeabilidade obtidos pelo método lattice Boltzmann fornece as seguintes relações entre a permeabilidade normalizada e a porosidade para arranjos distribuídos regularmente e arranjos aleatórios respectivamente.

$$\frac{K}{d^2} = 5 \times 10^{-5} \exp^{0.0956\phi} \quad (6.2)$$

$$\frac{K}{d^2} = 1 \times 10^{-5} \exp^{0.1168\phi} \quad (6.3)$$

onde o coeficiente de determinação (R^2) é de 0.995 para distribuições regulares e de 0.982 nas aleatórias. Os resultados obtidos com as simulações estão em concordância com os resultados de Nabovati & Sousa (2007), onde é indicado que a permeabilidade varia exponencialmente com a porosidade, e a permeabilidade de arranjos aleatórios é menor que a permeabilidade de arranjos regulares.

A correlação de Ergun para o termo de arrasto viscoso Eq. (3.34) pode ser reescrita como:

$$\frac{d^2}{K} = \alpha \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \quad (6.4)$$

Esta expressão é usada para comparar os resultados de permeabilidade obtidos pelo método lattice Boltzmann com o trabalho de Lee & Yang (1997) na Figura 6.7. Estes autores resolveram numericamente as equações de continuidade e de momento linear em um domínio regular de cilindros circulares. A porosidade mínima que pode ser obtida nos arranjos regulares e o valor de α segundo Ergun também são apresentados.

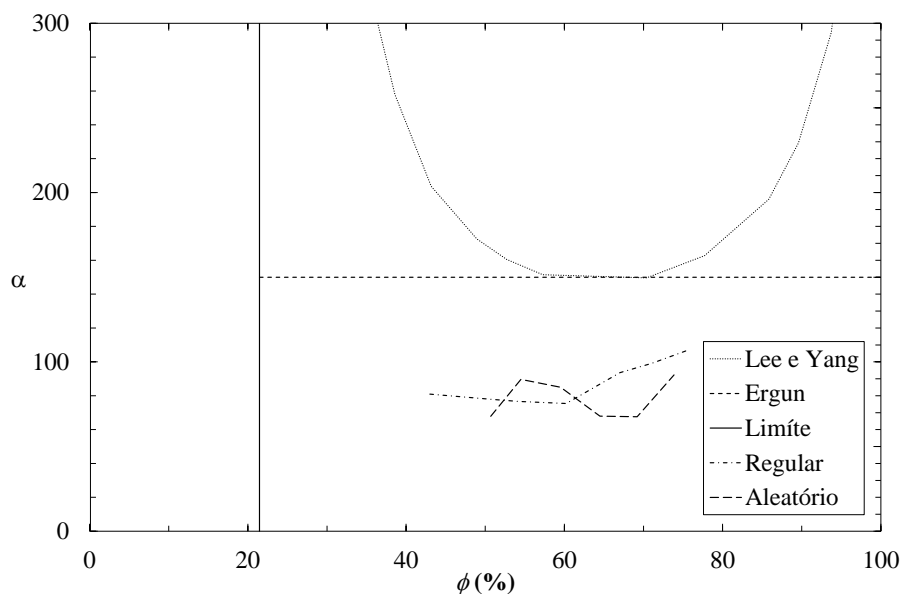


Figura 6.7. Comparação entre o alfa de simulações com lattice Boltzmann, os resultados de Ergun (1952) e os de Lee e Yang (1997).

No lattice Boltzmann e na proposta de Lee & Yang o valor de alfa é função da porosidade, enquanto que Ergun considera um valor fixo $\alpha = 150$. Os valores de alfa obtidos pelo método lattice Boltzmann em ambos os arranjos são menores do que a proposta de Lee & Yang (1997). Na representação em termos de α ainda é possível ver a tendência de crescimento exponencial em relação à porosidade.

6.2.1 CONDUTIVIDADE HIDRAULICA

A condutividade hidráulica, Eq. (3.26), do meio poroso foi calculada para o caso de fluxo de água, com $\mu_{\text{água}} = 1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ e $\gamma_{\text{água}} = 9.8 \text{ kN} / \text{m}^3$. A Tabela 6.1 apresenta os valores para cada um dos arranjos gerados. Os valores calculados em ambos os casos correspondem aos encontrados comumente para pedregulhos e/ou áreas grossas (Lambe & Whitman, 2004), o que é coerente com as granulometrias simuladas (Figura 5.19).

Tabela 6.1. Condutividade hidráulica com o método lattice Boltzmann para meios porosos conformados por partículas circulares com $\mu = 1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ e $\gamma = 9.8 \text{ kN} / \text{m}^3$.

Distribuição regular		Distribuição aleatória	
$\phi(\%)$	$k \text{ (m/s)}$	$\phi(\%)$	$k \text{ (m/s)}$
43.0	1.18×10^{-1}		
51.0	2.79×10^{-1}	50.7	1.57×10^{-1}
54.2	3.78×10^{-1}	54.5	1.86×10^{-1}
60.2	7.17×10^{-1}	59.5	3.53×10^{-1}
67.0	1.16	64.5	7.91×10^{-1}
71.1	1.69	69.2	1.40
75.4	2.59	73.9	1.85

6.3 FATOR BETA

O fator beta calculado das simulações com lattice Boltzmann e o obtido da correlação de Ergun para camadas granulares é plotado em um espaço semi-logarítmico na Figura 6.8. Neste espaço, o fator beta de Ergun decresce linearmente com o aumento da porosidade. Nos resultados do método lattice Boltzmann a tendência também é a diminuir com o aumento da porosidade. A relação nestes casos é aproximadamente bilinear, onde uma porosidade em torno de 60% separa as duas linhas retas. O fator beta decresce a uma taxa maior nos resultados do método lattice Boltzmann até chegar em porosidades próximas de 60%, onde a

taxa se reduz.

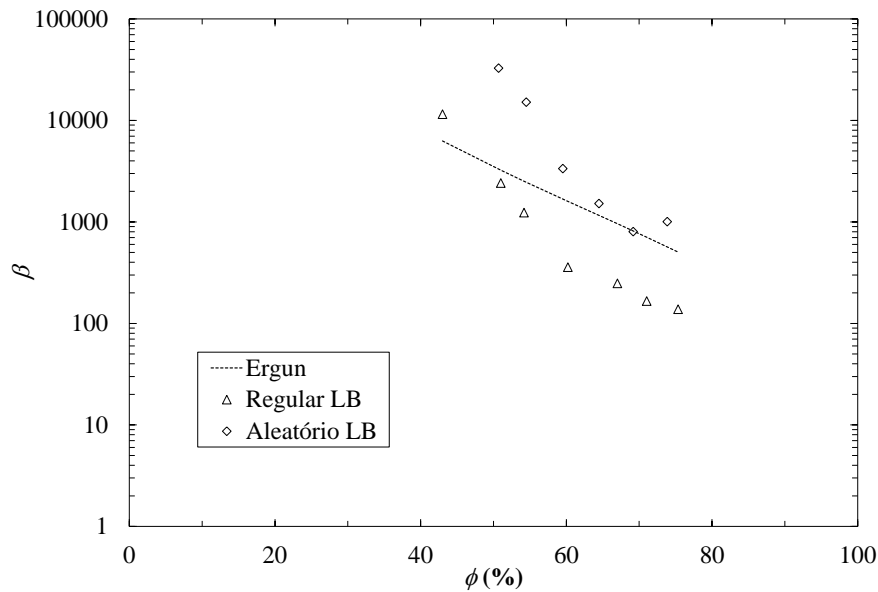


Figura 6.8. Fator beta de ambos os arranjos, calculado com o método lattice Boltzmann e com a correlação de Ergun para camadas granulares.

De novo, os arranjos com distribuição aleatória possuem fatores betas maiores do que os arranjos organizados regularmente. Esta situação é entendida intuitivamente em termos de arrasto, pois a disposição ordenada facilita o fluxo enquanto que uma disposição aleatória fornece maior oposição.

6.4 TORTUOSIDADE

A tortuosidade para ambos os modelos foi estimada pela Eq. (5.20). Os resultados para o arranjo regular e para o arranjo aleatório são mostrados na Figura 6.9 e Figura 6.10, respectivamente. Em ambos os arranjos a tortuosidade estimada se mantém constante até um determinado número de Reynolds e depois começa a decrescer. Portanto, a estimativa da tortuosidade pela proposta de Nabovati é influenciada por números de Reynolds altos, indicando que a tortuosidade é menor para velocidades altas.

Nos arranjos regulares (Figura 6.9) os desvios são observados a partir de números de Reynolds próximos de $Re \approx 8$. A tortuosidade nestes arranjos cresce com a diminuição da porosidade, pois os caminhos das partículas ficam mais tortuosos à medida que as partículas ficam mais próximas entre si.

Nos arranjos com distribuição aleatória (Figura 6.10) as variações nas estimativas da tortuosidade aparecem para números de Reynolds próximos de $Re \approx 2$.

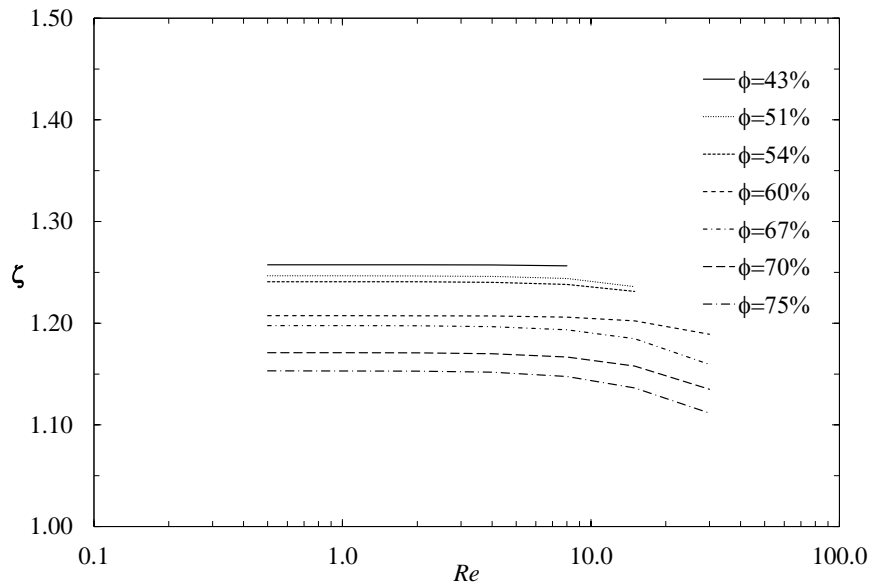


Figura 6.9. Tortuosidades calculadas para um arranjo regular de partículas com diferentes porosidades.

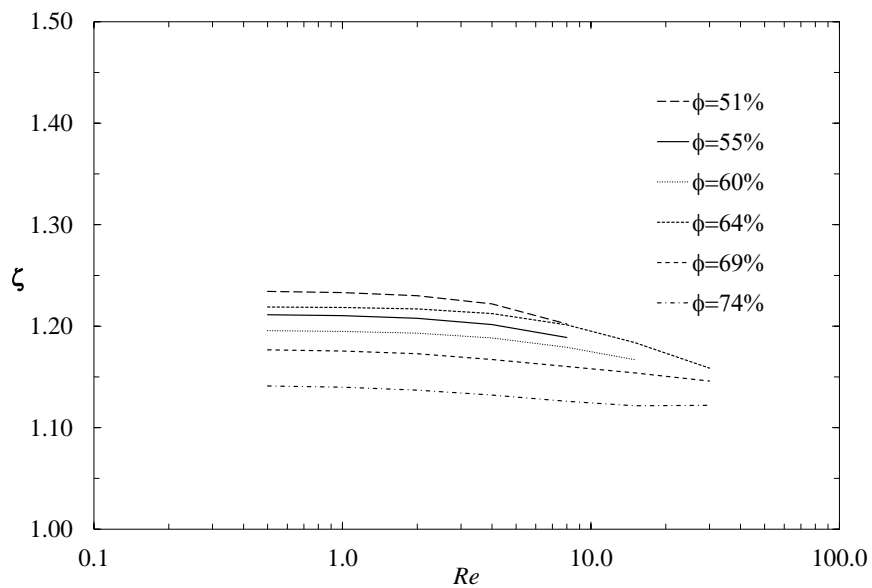


Figura 6.10. Tortuosidades calculadas para arranjos de partículas de diâmetro aleatório, distribuídas aleatoriamente.

A relação entre a tortuosidade e a porosidade é analisada ao calcular a tortuosidade média de cada um dos arranjos, a Figura 6.11 apresenta esses resultados junto com a proposta de Nabovati & Sousa (2007). As médias das estimativas da tortuosidade decrescem com o aumento da porosidade. Os valores calculados neste estudo ficam abaixo do ajuste feito por Nabovati e Souza (2007), que usaram retângulos com várias relações de forma em vez de cilindros em 2D. Isto e a grande dispersão dos dados em ambos os estudos pode explicar as divergências. As estimativas obtidas aqui mostram que quando a tortuosidade é calculada com

a proposta de Nabovati & Souza (2007) ela pode ser relacionada com a porosidade, mas persistem algumas oscilações.

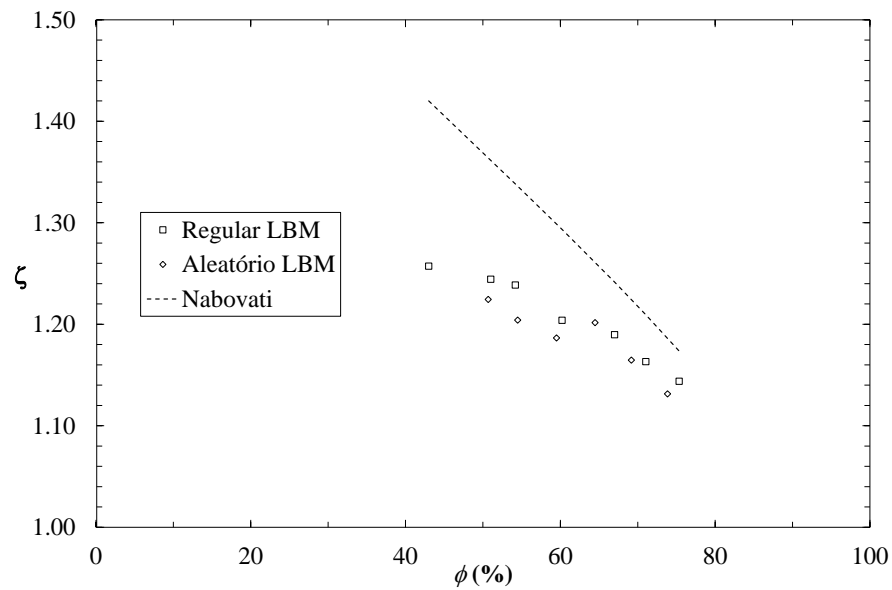


Figura 6.11. Dados de tortuosidade média em função da porosidade do arranjo e ajuste de Nabovati e Souza (2007).

A Figura 6.12 apresenta a variação da tortuosidade com o fator beta nos dois tipos de arranjos simulados.

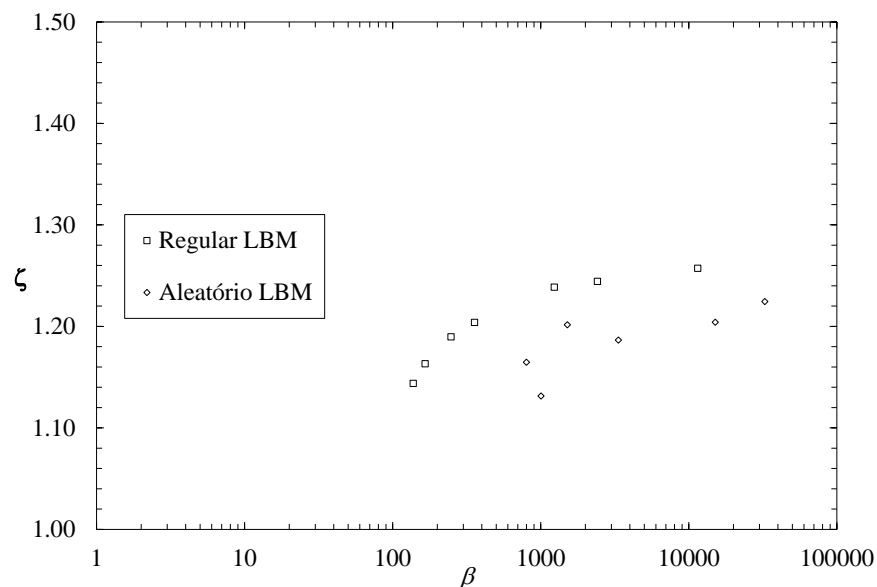


Figura 6.12. Variação da tortuosidade média com o fator beta de Forchheimer para arranjos regulares e arranjos aleatórios.

A relação entre estes dois parâmetros é clara no caso de arranjos regulares, onde a

tortuosidade cresce com o aumento do fator inercial, mas segue um comportamento aparentemente assintótico. Ou seja, neste tipo de arranjo a relação entre a tortuosidade e o fator beta é constante para valores de beta elevados. Em meios aleatórios a relação entre a tortuosidade e o fator beta não é clara devido a oscilações dos valores. As oscilações podem estar relacionadas ao fato de simulações serem feitas em uma única configuração aleatória para cada porosidade macroscópica. Quando relacionada com a tortuosidade, como mostrado na Figura 6.13, a permeabilidade decresce com o aumento da primeira.

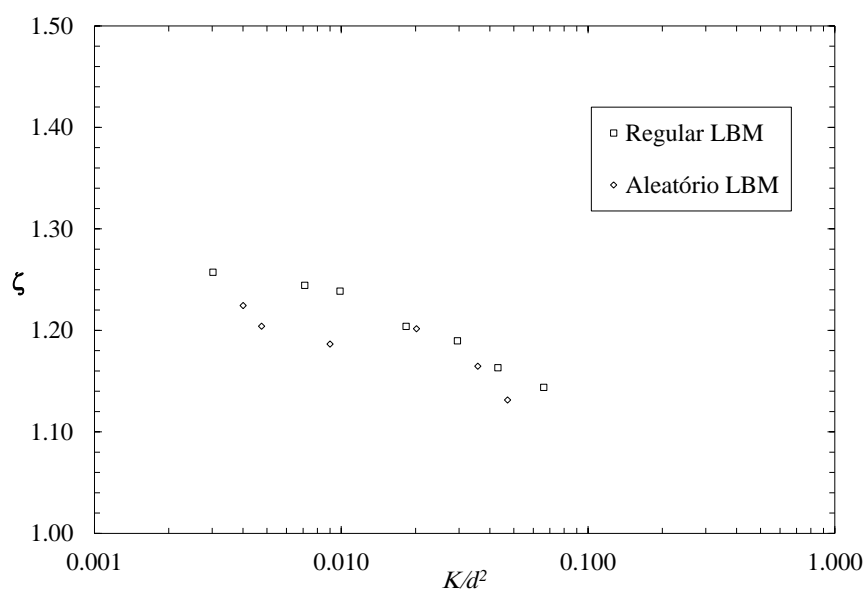


Figura 6.13. Variação da tortuosidade com a permeabilidade normalizada.

Os valores de tortuosidade estimada para os arranjos aleatórios são menores do que para os arranjos regulares, devido à forma da equação proposta por Nabovati & Souza (2007), onde o termo quadrático no denominador faz que o valor da componente da velocidade na direção do fluxo seja sempre positivo. Como será visto no item a seguir a componente da velocidade na direção do fluxo no caso de arranjos regulares é sempre positiva, mas isto não acontece no caso de arranjos aleatórios.

6.5 LINHAS DE FLUXO

Usando a ferramenta computacional *Paraview* foram plotadas as linhas de fluxo para analisar o comportamento do campo de velocidades nos arranjos simulados. Em todos os arranjos com distribuição regular de partículas as linhas de fluxo mantiveram uma configuração laminar para todos os números de Reynolds. Por exemplo, a Figura 6.14 apresenta a configuração das linhas de fluxo no estado estacionário para o arranjo regular com

$Re = 30$ e $\phi = 67\%$, onde a escala de cores indica a vorticidade.

A vorticidade é um campo pseudovetorial que descreve o movimento giratório local de um fluido perto de um ponto e é calculado como o rotacional do campo vectorial:

$$\vec{\omega} = \vec{\nabla} \times \vec{u} \quad (6.5)$$

onde \times indica o produto vetorial. Em 2D a vorticidade é sempre perpendicular ao plano de fluxo, portanto pode ser considerada como um escalar.

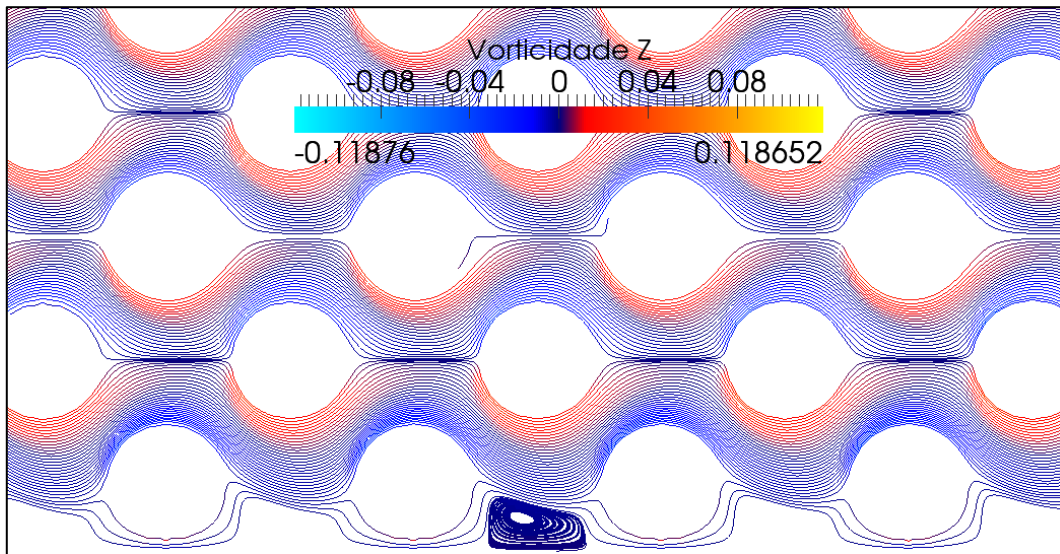


Figura 6.14. Linhas de fluxo no estado estacionário no contorno inferior de um arranjo com distribuição regular com $\phi = 67\%$ e $Re = 30$.

O fluido nestes casos fica sujeito a vorticidade nos contornos das partículas devido ao estrangulamento dos canais de fluxo, porém a vorticidade se anula por trás das partículas uma vez que os canais se ampliam.

Separação das linhas de fluxo foi observada só em alguns casos, no contorno de alguns domínios porosos onde havia perda de simetria e quando o número de Reynolds era elevado, como ilustrado na Figura 6.14. Estas particularidades são decorrentes do processo de discretização e da necessidade de condições de contorno, e embora elas possam afetar a estimativa dos parâmetros causando oscilações nos valores calculados, os domínios simulados são grandes o suficiente para ponderar as singularidades.

A configuração laminar do fluxo nestes arranjos condiz com os resultados de maior permeabilidade em relação a arranjos aleatórios, pois as partículas de fluido neste caso apenas contornam os obstáculos sólidos mantendo sempre a direção do fluxo.

No caso dos arranjos com distribuição aleatória de partículas (Figura 6.15) é observada

vorticidade alta nos contornos das partículas, assim como formação de vórtices e zonas de estagnação. Porosidades altas favorecem a formação de vórtices maiores devido ao espaço disponível, porém o número de Reynolds também deve ser alto para que estes apareçam. Finalmente, a configuração das linhas de fluxo nos meios porosos aleatórios é congruente com os resultados obtidos de menor permeabilidade em relação aos meios regulares, pois o percurso das partículas de fluido é claramente mais complexo.

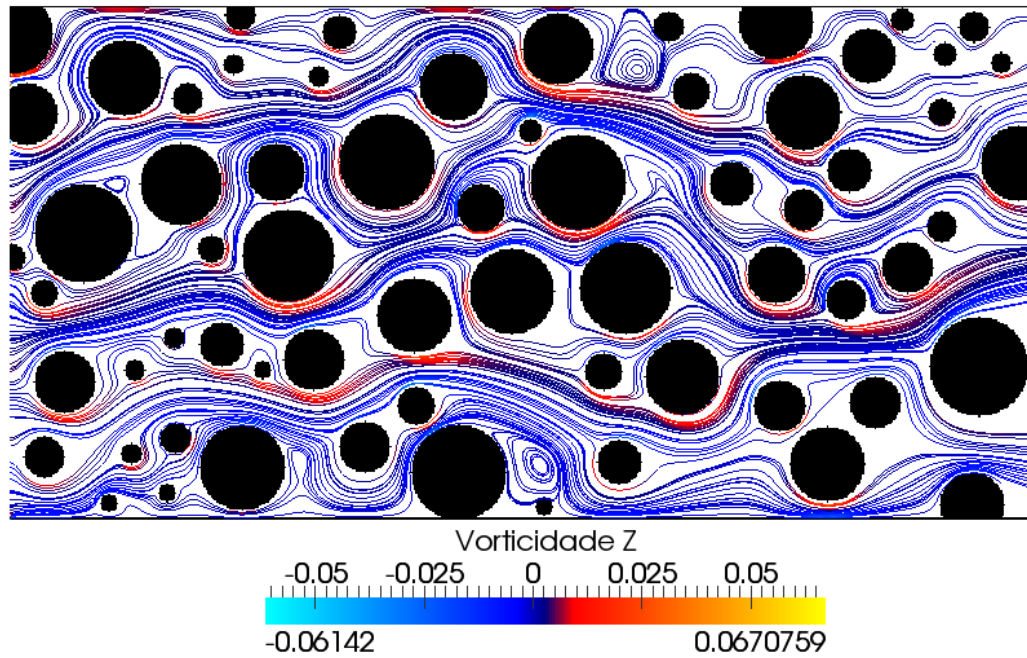


Figura 6.15. Linhas de fluxo no estado estacionário para um arranjo aleatório com $\phi = 70\%$ e $Re = 15$.

7 CONCLUSÕES

A ideia fundamental ao longo trabalho foi estudar o fenômeno de fluxo de fluidos em meios porosos usando um modelo numérico adequado para este propósito.

A revisão bibliográfica das abordagens utilizadas para simulação de problemas de fluxo apontou para os métodos mesoscópicos como a abordagem mais adequada para estudar fluxo na escala dos grãos, destacando-se o método lattice Boltzmann como uma técnica simples embora poderosa.

Em simulações de fluxo de fluidos em meios porosos o método lattice Boltzmann é potencialmente superior aos métodos baseados na discretização de equações diferenciais parciais macroscópicas. A vantagem do método decorre de que ele consegue simular facilmente geometrias complexas sem a necessidade de adicionar condições de contorno complicadas. Nestes casos a designação do nó como sendo sólido e uma regra de não escorregamento simples são suficientes para executar as simulações. Por outro lado, uma abordagem molecular é computacionalmente impraticável em termos dos recursos computacionais atuais.

Nesta dissertação foi desenvolvido e validado um código que implementa o método lattice Boltzmann com operador de colisão BGK para simulação de problemas de fluxo de fluidos e que pode ser utilizado para simular fluxo em meios porosos. O código implementado foi utilizado com sucesso para simular fluxo através de meios porosos gerados computacionalmente, com o objetivo de estimar parâmetros intrínsecos e estudar as relações entre estes e a estrutura do arranjo poroso. Os resultados das simulações mostraram que parâmetros intrínsecos (como a permeabilidade) são altamente dependentes da estrutura dos poros e não só dos parâmetros macroscópicos como a porosidade ou o tamanho médio de grão. Portanto, adotar correlações baseadas em parâmetros macroscópicos pode levar a estimativas com erros significativos.

A diferença entre os resultados obtidos com o método lattice Boltzmann e com a correlação de Ergun deve-se ao fato de que a correlação é baseada exclusivamente em parâmetros macroscópicos (porosidade e diâmetro médio). Como observado neste trabalho, as características do meio poroso, como volume e estrutura dos poros, influenciam o comportamento do fluxo de fluidos através do mesmo.

Em arranjos com distribuição regular de partículas o regime de Darcy foi mantido até números de Reynolds maiores ($Re = 4$) do que no caso de distribuições aleatórias ($Re = 2$). Ou seja, estruturas porosas desordenadas favorecem o desvio do regime linear de Darcy.

Embora a porosidade esteja relacionada com a permeabilidade, a segunda é mais influenciada pela estrutura dos poros e pela tortuosidade. O valor da porosidade por si só não é um bom indicador das contribuições inerciais de um fluxo em meios porosos, sendo o volume e estrutura dos poros determinantes neste caso.

A expressão proposta por Nabovati & Souza (2007) para estimar a tortuosidade pode levar a subestimar o valor deste parâmetro em alguns casos, como nos arranjos aleatórios analisados neste estudo.

Foi observado que porosidades próximas ou superiores a 60% implicam em mudanças no comportamento do fluxo que são refletidas nas estimativas dos parâmetros intrínsecos. Esta situação pode indicar a existência de um valor crítico da porosidade para o qual acontecem mudanças no comportamento do fluxo.

As estimativas dos parâmetros calculados para os arranjos com porosidades mais baixas podem ter sido influenciadas pela ausência de dados de números de Reynolds mais altos decorrente das instabilidades numéricas sofridas nas simulações. Outra fonte de erro, no caso aleatório, é que foi considerada uma única distribuição das partículas para cada porosidade macroscópica estudada, sendo que diferentes configurações podem ser geradas a cada rodada do código.

Finalmente, o método lattice Boltzmann constitui uma ferramenta poderosa para entender o fenômeno de fluxo de fluidos em meios porosos permitindo relacionar os detalhes da escala dos grãos com o comportamento macroscópico. O código implementado nesta dissertação pode ser utilizado para simular problemas de fluxo em qualquer geometria de meio poroso.

7.1 LIMITAÇÕES

O principal ponto fraco do código computacional desenvolvido nesta dissertação é a velocidade de execução. Uma ideia básica nesta pesquisa era manter o código computacional simples o suficiente para ser legível e reproduzível, assim sendo a escolha foi por uma linguagem de alto nível (Python 2.7.3) e em consequência mais lenta. Este problema pode ser contornado usando técnicas de paralelização nas quais a malha numérica é dividida em subdomínios, que executam o código paralelamente. Outra forma de contornar este problema é aumentar a capacidade computacional ou utilizar uma linguagem de baixo nível. Códigos computacionais livres como o *Palabos* (Palabos, 2013) implementam diversos modelos lattice Boltzmann e são consideravelmente mais rápidos. Porém estes códigos são escritos em C++ que é uma linguagem de médio nível, portanto mais abstrata.

Outro ponto fraco do código é que foi desenvolvido para problemas em 2D, pois a terceira

dimensão agrega mais pontos ao problema e conseqüentemente incrementa o tempo computacional.

Por último, o modelo implementado trabalha com uma equação de estado para gases ideais, portanto só fluxos monofásicos podem ser simulados. Para modelos que implementam múltiplas fases e múltiplos componentes, veja-se, por exemplo, Sukop & Thorne (2006).

7.2 SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS

A implementação do método lattice Boltzmann em geometrias de meios porosos reais é uma das abordagens mais interessantes. Neste caso a estrutura do meio poroso é obtida a partir de técnicas como micro tomografia de raios-X (Rustichelli & Skrzypek, 2010).

Na área de fluidos monofásicos é interessante a simulação de fluxos transientes, que podem ser implementados mediante condições de contorno variáveis no tempo para simular, p. ex., o efeito do rebaixamento rápido. O fenômeno de *piping* também pode ser simulado ao aplicar condições de contorno móveis como as propostas por (Lallemand & Luo, 2003). Outra possibilidade é estudar os parâmetros intrínsecos de solos antes e após da compactação.

Modelos lattice Boltzmann multifásicos multicomponentes são interessantes no estudo de problemas de transporte de contaminantes e na análise de percolação em meios porosos.

Por último, problemas de acoplamento hidromecânico são particularmente interessantes, e neste caso a solução de fluxo obtida com o método lattice Boltzmann deve ser acoplada a um modelo de deformabilidade da fase sólida. Os resultados de simulações com estas características podem ajudar no desenvolvimento de modelos constitutivos mais acurados ou podem validar os modelos existentes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AALTOSALMI, U. 2005. Fluid flow in porous media with the lattice-Boltzmann method. Universidade de Jyväskylä.

ALLEN, M. & TILDESLEY, D. 1989. Computer simulation of liquids. P. 408. Oxford University Press, USA, New York, New York, USA.

BHATNAGAR, P., GROSS, E. & KROOK, M. 1954. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review* 94:511–525. American Physical Society.

BINDER, K. 1997. Applications of Monte Carlo methods to statistical physics. *Reports on Progress in Physics* 60:487–559. IOP Publishing.

CAMARGO, M. A, FACIN, P. C. & PIRES, L. F. 2012. Lattice Boltzmann method for evaluating hydraulic conductivity of finite array of spheres. *The Scientific World Journal* 2012:527618.

CANCELLIERE, A., CHANG, C., FOTI, E., ROTHMAN, D. H. & SUCCI, S. 1990. The permeability of a random medium: Comparison of simulation with theory. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 2:2085.

CEDER, V. L. 2010. The quick python book. P. 335. Manning.

CHEN, H., CHEN, S. & MATTHAEUS, W. 1992. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Physical Review A* 45:5339–5342. American Physical Society.

CHEN, S. & DOOLEN, G. D. 1998. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annual review of fluid mechanics* 30:329–364.

CHUKWUDOZIE, C. 2011. Pore-scale Lattice Boltzmann simulations of inertial flows in realistic porous media: a first principle analysis of the Forchheimer relationship. Louisiana State University.

D'HUMIÈRES, D., BOUZIDI, M. & LALLEMAND, P. 2001. Thirteen-velocity three-dimensional lattice Boltzmann model. *Physical Review E* 63:066702.

DARDIS, O. & MCCLOSKEY, J. 1998. Lattice Boltzmann scheme with real numbered solid density for the simulation of flow in porous media. *Physical Review E* 57:4834–4837.

DURAND, R. D., FARIAS, M. M. DE & CAMAPUM, J. 2012. Análise numérica de processos de infiltração em mesoescala. Pp. 287–305 *Tópicos sobre infiltração: Teoria e prática aplicada a solos tropicais*.

ERGUN, S. 1952. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.* 48:89–94.

FERZIGER, J. H. & PERIC, M. 2001. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. P. 426. Springer.

- FRISCH, U., D'HUMIÈRES, D., HASSLACHER, B., LALLEMAND, P., POMEAU, Y. & RIVET, J.-P. 1987. Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. *Complex systems* 1:649–707.
- GALINDO-TORRES, S. A., SCHEUERMANN, A., LI, L., PEDROSO, D. M. & WILLIAMS, D. J. 2013. A Lattice Boltzmann model for studying transient effects during imbibition–drainage cycles in unsaturated soils. *Computer Physics Communications* 184:1086–1093.
- GRUCELSKI, A. & POZORSKI, J. 2013. Lattice Boltzmann simulations of flow past a circular cylinder and in simple porous media. *Computers & Fluids* 71:406–416. Elsevier Ltd.
- GUBBINS, K. E. 1985. *Theory of Molecular Fluids: Fundamentals*. P. 640 International Series of Monographs on Chemistry. Oxford University Press, New York, New York, USA.
- GUO, Z., SHI, B. & WANG, N. 2000. Lattice BGK Model for Incompressible Navier–Stokes Equation. *Journal of Computational Physics* 165:288–306.
- GUO, Z. & ZHAO, T. 2002. Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media. *Physical Review E* 66:036304.
- GUO, Z., ZHENG, C. & SHI, B. 2002. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. *Physical Review E* 65:046308.
- HASLAM, I. W., CROUCH, R. S. & SEAÏD, M. 2008. Coupled finite element–lattice Boltzmann analysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197:4505–4511. Elsevier B.V.
- HE, X. & LUO, L.-S. 1997. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E* 56:6811–6817.
- HIGUERA, F. J. & JIMENEZ, J. 1989. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *EPL (Europhysics Letters)* 9:663–668.
- HIRSCH, C. 2007. *Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. P. 680. Butterworth-Heinemann, Oxford.
- HOEKSTRA, A., LUO, L.-S. & KRAFCZYK, M. 2010. Mesoscopic methods in engineering and science. *Computers & Mathematics with Applications* 59:2139–2140.
- JAMBHEKAR, V. A. 2011. *Forchheimer Porous-media Flow Models - Numerical Investigation and Comparison with Experimental Data*.
- KHAN, I. & AIDUN, C. K. 2010. Direct numerical simulation of saturated deformable porous media using parallel hybrid Lattice – Boltzmann and finite element method.
- KUZMIN, D. 2010. *A guide to Numerical methods for transport equations*. Univ. Nürnberg.
- LAI, W. M., RUBIN, D. & KREMPL, E. 2009. *Introduction to Continuum Mechanics*, Fourth Edition. P. 536 (Fourth). Elsevier.

- LALLEMAND, P. & LUO, L.-S. 2003. Lattice Boltzmann method for moving boundaries. *Journal of Computational Physics* 184:406–421.
- LAMBE, W. & WHITMAN, R. 2004. *Mecánica de suelos*. P. 582. Limusa, México.
- LANDAU, D. D. P. & BINDER, K. 2009. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. P. 488. Cambridge University Press.
- LANDAU, L. D. & LIFSHITZ, E. M. 1976. *Course of theoretical physics*. Robert Maxwell, M.C.
- LATT, J. 2007, August. Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations. University of Geneva.
- LATT, J., CHOPARD, B., MALASPINAS, O., DEVILLE, M. & MICHLER, A. 2008. Straight velocity boundaries in the lattice Boltzmann method. *Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics* 77:056703.
- LEE, S. L. & YANG, J. H. 1997. Modeling of Darcy-Forchheimer drag for fluid flow across a bank of circular cylinders. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 40:3149–3155.
- LIENHARD, J. 1966. *Synopsis of lift, drag, and vortex frequency data for rigid circular cylinders*. Pullman, Washington.
- MCNAMARA, G. R. & ZANETTI, G. 1988. Use of the Boltzmann equation to simulate Lattice-Gas automata. *Physical review letters* 61:2332–2335.
- MEI, R., LUO, L.-S., LALLEMAND, P. & D'HUMIÈRES, D. 2006. Consistent initial conditions for lattice Boltzmann simulations. *Computers & Fluids* 35:855–862.
- MIER TORRECILLA, M. DE. 2010. NUMERICAL SIMULATION OF MULTI-FLUID FLOWS WITH THE PARTICLE FINITE ELEMENT METHOD. Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona.
- NABOVATI, A. & SOUSA, A. C. M. 2007. Fluid flow simulation in random porous media at pore level using the Lattice Boltzmann Method. *Journal of Engineering Science and Technology* 2:226–237.
- PAN, C., HILPERT, M. & MILLER, C. T. 2004. Lattice-Boltzmann simulation of two-phase flow in porous media. *Water Resources Research* 40
- RAPAPORT, D. C. 2004. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. P. 564. Cambridge University Press.
- ROZAS, R. E., DÍAZ, S., QUISPE, J., ACUÑA, S. M. & TOLEDO, P. G. 2012. Permeability of Pore Networks Under Compaction. *Transport in Porous Media* 96:429–438.
- RUSTICHELLI, F. & SKRZYPEK, J. 2010. *Innovative Technological Materials*. P. 302 (J. J. Skrzypek and F. Rustichelli, Eds.). Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.

- SHAN, X. & CHEN, H. 1994. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E* 49.
- SKORDOS, P. A. 1993. Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method. *Physical Review E* 48:4823–4842.
- SUCCI, S. 2001. The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. P. 288 *Numerical mathematics and scientific computation*. Clarendon press, Oxford.
- SUCCI, S., FOTI, E. & HIGUERA, F. 1989. Three-dimensional flows in complex geometries with the lattice Boltzmann method. *EPL (Europhysics Letters)* 10:433–438.
- SUKOP, M. C. & OR, D. 2003. Invasion percolation of single component, multiphase fluids with lattice Boltzmann models. *Physica B: Condensed Matter* 338:298–303.
- SUKOP, M. C. & THORNE, D. T. 2006. *Lattice Boltzmann Modeling: An introduction for geoscientists and engineers*. P. 172. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- TANEDA, S. 1956. Experimental investigation of the wakes behind cylinders and plates at low Reynolds numbers. *J. Phys. Soc. Japan* 11.
- TANEDA, S. 1976. Visual study of unsteady separated flows around bodies. *Progress in Aerospace Sciences* 17:287–348.
- VELLOSO, R. 2010. Simulação Numérica de problemas de acoplamento fluidomecânico em meios porosos utilizando o método dos elementos discreto. Pontifícia universidade católica do Rio de Janeiro.
- WAGNER, A. J. 2008. A practical introduction to the lattice Boltzmann method. *Adt. notes for Statistical Mechanics*:46. Fargo.
- WESSELING, P. 2009. Principles of computational fluid dynamics. P. 644 (R. Bank, R. L. Graham, J. Stoer, R. Varga, and H. Yserentant, Eds.). Springer.
- WHITAKER, S. 1996. The Forchheimer equation: A theoretical development. *Transport in Porous Media* 25:27–61.
- WOLF, F. G. 2005. Modelagem da interação fluido-sólido para simulação de molhabilidade e capilaridade usando o modelo lattice-Boltzmann. Universidade Federal de Santa Catarina.
- WOLF-GLADROW, D. A. 2005. *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models : An Introduction*. P. 311 *Lecture Notes in Mathematics*. Springer Berlin Heidelberg.
- ZIENKIEWICZ, O. C. O., TAYLOR, R. L. R. & ZHU, J. J. Z. 2005a. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. P. 752 (Sixth). Elsevier/Butterworth-Heinemann, Oxford.
- ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. & NITHIARASU, P. 2005b. *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*.

ZOU, Q. & HE, X. 1997. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids* 9:1591–1598.

APÊNDICE A - CÓDIGO DE IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO LATTICE BOLTZMANN COM OPERADOR DE COLISÃO BGK

O código implementado nesta dissertação foi baseado no trabalho realizado anteriormente pelo professor Raúl Durand, co-orientador desta dissertação. Este código foi escrito na linguagem Python, comentários nesta linguagem são antecidos pelo símbolo # e são escritos em inglês evitando caracteres especiais como acentos. A seguir apresenta-se o código com comentários traduzidos ao português.

```

""" Modulo LBM: Contém o LBM com operador de colisão BGK e tempo de
relação único em uma malha d2q9, condições de contorno de Zou e He
(1997) """
# Importar funções matemáticas para cálculos
try: from numppypy import empty
except: pass
from numpy import empty

# Pesos de ponderação dos vetores de malha
w = [4.0 / 9.0, 1.0 / 9.0, 1.0 / 9.0, 1.0 / 9.0, 1.0 / 9.0,
      1.0 / 36.0, 1.0 / 36.0, 1.0 / 36.0, 1.0 / 36.0]

# Direções dos vetores de velocidade
cx = [0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, -1, 1]
cy = [0, 0, 1, 0, -1, 1, 1, -1, -1]

# Definição da função de equilíbrio
def eq_fun(i, rho, vx, vy, fx=0.0, fy=0.0, tau=0.0):
    vx = vx + tau * fx / rho
    vy = vy + tau * fy / rho
    uc = vx * cx[i] + vy * cy[i]
    uu = vx ** 2 + vy ** 2
    feq = w[i] * rho * (1.0 + 3.0 * uc + 4.5 * uc * uc - 1.5 * uu)
    return feq

# Definição da classe célula
class Cell():
    def __init__(self):
        self.posi = 0 #Posição
        self.posj = 0
        self.vx = 0.0 #Velocidades
        self.vy = 0.0
        self.fx = 0.0
        self.fy = 0.0
        self.rho = 0.0 # Densidade
        self.F = [] # Funções de distribuição
        self.is_solid = 0 # Definição de nó sólido
        self.has_vel_bc = False # Condições de contorno
        self.vx_bc = 0.0
        self.vy_bc = 0.0
        self.has_rho_bc = False
        self.rho_bc = 0.0

```

```

# Método para Inicialização das funções de distribuição
def set_state(self, rho=0.0, vx=0.0, vy=0.0, fx=0.0, fy=0.0,
tau=0.0):

    for i in range(9):
        self.F[i] = eq_fun(i, rho, vx, vy, fx, fy, tau)
    self.rho = rho
    self.vx = vx
    self.vy = vy

# Método de definição de um nó como sendo sólido
def set_solid(self):
    self.is_solid = 1

# Métodos de condição de contorno no nó
def set_vel_bc(self, vx=0.0, vy=0.0):
    self.has_vel_bc = True
    self.vx = self.vx_bc = vx
    self.vy = self.vy_bc = vy

def set_dens_bc(self, rho=0.0):
    """Sets constant pressure BC"""
    self.has_rho_bc = True
    self.rho = self.rho_bc = rho

# Definição da classe grupo de células, inicialização e condições
de contorno
class CltCell(list):
    def set_solid(self):
        for c in self:
            c.is_solid = 1
    def set_vel_bc(self, vx=0.0, vy=0.0):
        for c in self:
            c.set_vel_bc(vx, vy)
    def set_dens_bc(self, rho=0.0):
        for c in self:
            c.set_dens_bc(rho)
    def set_state(self, rho=0.0, vx=0.0, vy=0.0, fx=0.0, fy=0.0,
tau=0.0):
        for c in self:
            c.set_state(rho, vx, vy, fx, fy, tau)

# Definição da classe malha
class Lattice():
    def __init__(self, nx, ny):
        self.nx = nx
        self.ny = ny
        self.F = empty((nx,ny,9)) # Função de distribuição
        self.tmpF = empty((nx,ny,9)) # Função de distribuição tem
        self.cells = CltCell() # Lista de todas as células
        self.top = CltCell() # Células nos contornos
        self.bottom = CltCell()
        self.right = CltCell()
        self.left = CltCell()
        self.solids = CltCell() # List of solid cells
        self.pvel_cells = CltCell() # List of BC cells

```

```

self.prho_cells = CltCell()
self.tau = 0.5 # Relaxation parameter
self.fx = 0.0
self.fy = 0.0

# Inicialização das funções distribuição para zero
for j in range(ny):
    for i in range(nx):
        c = Cell()
        c.posi = i
        c.posj = j
        c.F = self.F[i,j,:]
        self.cells.append(c) # Lista de nós no contorn0
        if i == 0: self.left.append(c)
        if j == 0: self.bottom.append(c)
        if i == nx - 1: self.right.append(c)
        if j == ny - 1: self.top.append(c)

# Método para mostrar uma célula na malha
def cell_ij(self, i, j):
    s=j*self.nx+i
    return self.cells[s]

# Método para inicializar as funções de distribuição no domínio
def set_state(self, rho=0.0, vx=0.0, vy=0.0, fx=0.0, fy=0.0,
tau=0.0):
    for c in self.cells:
        c.set_state(rho, vx, vy, fx, fy, tau)

# Método para definir regiões circulares sólidas
def solid_circle(self, x, y, r):
    for i in range(self.nx):
        for j in range(self.ny):
            cir = (i - x) ** 2 + (j - y) ** 2
            if cir <= r ** 2:
                self.cell_ij(i,j).set_solid()

# Metodo para calcular as variáveis macroscópicas
def update(self):
    for c in self.cells:
        if c.is_solid: continue
        f = c.F
        c.rho = sum(f)
        c.vx = (f[0] * cx[0] + f[1] * cx[1] + f[2] * cx[2] +
f[3] * cx[3] + f[4] * cx[4] + f[5] * cx[5] + f[6] * cx[6] + f[7] *
cx[7] + f[8] * cx[8]) / c.rho
        c.vy = (f[0] * cy[0] + f[1] * cy[1] + f[2] * cy[2] +
f[3] * cy[3] + f[4] * cy[4] + f[5] * cy[5] + f[6] * cy[6] + f[7] *
cy[7] + f[8] * cy[8]) / c.rho

# Método para aplicar condições de contorno de Zou e He (1997)
def apply_bc(self):
    for c in self.pvel_cells:
        if c.is_solid: continue
        if c.posi == self.nx - 1: # Velocidade contorno direito
            f = c.F

```

```

        vx = c.vx = c.vx_bc
        vy = c.vy = c.vy_bc
        rho = c.rho = (f[0] + f[2] + f[4] + 2.0 * (f[1] +
f[5] + f[8])) / (1.0 + vx)
        f[3] = f[1] - (2.0 / 3.0) * rho * vx
        f[6] = f[8] - (1.0 / 6.0) * rho * vx + 0.5 * rho *
vy - 0.5 * (f[2] - f[4])
        f[7] = f[5] - (1.0 / 6.0) * rho * vx - 0.5 * rho *
vy + 0.5 * (f[2] - f[4])
        if c.posi == 0: # Velocidade contorno esquerdo
            f = c.F
            vx = c.vx = c.vx_bc
            vy = c.vy = c.vy_bc
            rho = c.rho = (f[0] + f[2] + f[4] + 2.0 * (f[3] +
f[6] + f[7])) / (1.0 - vx)
            f1 = f[1] = f[3] + (2.0 / 3.0) * rho * vx
            f5 = f[5] = f[7] + (1.0 / 6.0) * rho * vx + 0.5 *
rho * vy - 0.5 * (f[2] - f[4])
            f8 = f[8] = f[6] + (1.0 / 6.0) * rho * vx - 0.5 *
rho * vy + 0.5 * (f[2] - f[4])
            if c.posj == self.ny - 1: # Velocidade contorno superior
                f = c.F
                vx = c.vx = c.vx_bc
                vy = c.vy = c.vy_bc
                rho = c.rho = (f[0] + f[1] + f[3] + 2.0 * (f[2] +
f[5] + f[6])) / (1.0 + vy)
                f[4] = f[2] - (2.0 / 3.0) * rho * vy
                f[7] = f[5] - (1.0 / 6.0) * rho * vy - 0.5 * rho *
vx + 0.5 * (f[1] - f[3])
                f[8] = f[6] - (1.0 / 6.0) * rho * vy + 0.5 * rho *
vx - 0.5 * (f[1] - f[3])
                if c.posj == 0: # Velocidade contorno inferior
                    f = c.F
                    vx = c.vx = c.vx_bc
                    vy = c.vy = c.vy_bc
                    rho = c.rho = (f[0] + f[1] + f[3] + 2.0 * (f[4] +
f[7] + f[8])) / (1.0 - vy)
                    f[2] = f[4] + (2.0 / 3.0) * rho * vy
                    f[5] = f[7] + (1.0 / 6.0) * rho * vy + 0.5 * rho *
vx - 0.5 * (f[1] - f[3])
                    f[6] = f[8] + (1.0 / 6.0) * rho * vy - 0.5 * rho *
vx + 0.5 * (f[1] - f[3])

    for c in self.prho_cells:
        if c.is_solid: continue
        if c.posi == self.nx - 1: # Pressão contorno direito
            f = c.F
            rho = c.rho = c.rho_bc
            vx = c.vx = - 1.0 + (f[0] + f[2] + f[4] + 2.0 *
(f[1] + f[5] + f[8])) / rho
            c.vy = 0.0
            f[3] = f[1] - (2.0 / 3.0) * rho * vx
            f[6] = f[8] - (1.0 / 6.0) * rho * vx - 0.5 * (f[2] -
f[4])
            f[7] = f[5] - (1.0 / 6.0) * rho * vx + 0.5 * (f[2] -
f[4])

```



```

        if c.posi == 0: # Pressão contorno esquerdo
            f = c.F
            rho = c.rho = c.rho_bc
            vx = c.vx = 1.0 - (f[0] + f[2] + f[4] + 2.0 * (f[3]
+ f[6] + f[7])) / rho
            c.vy = 0.0
            f[1] = f[3] + (2.0 / 3.0) * rho * vx
            f[5] = f[7] + (1.0 / 6.0) * rho * vx - 0.5 * (f[2] -
f[4])
            f[8] = f[6] + (1.0 / 6.0) * rho * vx + 0.5 * (f[2] -
f[4])
        if c.posj == self.ny - 1: # Pressão contorno superior
            f = c.F
            rho = c.rho = c.rho_bc
            vy = c.vy = - 1.0 + (f[0] + f[1] + f[3] + 2.0 *
(f[2] + f[5] + f[6])) / rho
            c.vx = 0.0
            f[4] = f[2] - (2.0 / 3.0) * rho * vy
            f[7] = f[5] - (1.0 / 6.0) * rho * vy + 0.5 * (f[1] -
f[3])
            f[8] = f[6] - (1.0 / 6.0) * rho * vy - 0.5 * (f[1] -
f[3])
        if c.posj == 0: # Pressão contorno inferior
            f = c.F
            rho = c.rho = c.rho_bc
            vy = c.vy = 1.0 - (f[0] + f[1] + f[3] + 2.0 * (f[4]
+ f[7] + f[8])) / rho
            c.vx = 0.0
            f[2] = f[4] + (2.0 / 3.0) * rho * vy
            f[5] = f[7] + (1.0 / 6.0) * rho * vy - 0.5 * (f[1] -
f[3])
            f[6] = f[8] + (1.0 / 6.0) * rho * vy + 0.5 * (f[1] -
f[3])

# Método para executar o passo de colisão
def collide(self):
    for c in self.cells:
        if c.is_solid: continue
        for i in range(9):
            f = c.F
            tau = self.tau
            fx = self.fx
            fy = self.fy
            fEq = eq_fun(i, c.rho, c.vx, c.vy, fx, fy, tau)
            f[i] = (1.0 - 1.0 / tau) * f[i] + fEq / tau

def bounce_back(self):

# Condição de reflexão para nós sólidos
for c in self.solids:
    f = c.F
    f[1], f[3] = f[3], f[1]
    f[2], f[4] = f[4], f[2]
    f[5], f[7] = f[7], f[5]
    f[6], f[8] = f[8], f[6]

```

```

# Método para propagação
def stream(self):
    for i in range(self.nx):
        for j in range(self.ny):
            for k in range(9):
                idx_i = (i + cx[k]) % self.nx
                idx_j = (j + cy[k]) % self.ny
                self.tmpF[idx_i, idx_j, k] = self.F[i,j,k]
    self.F[:, :, :] = self.tmpF[:, :, :]
# Método para solução
def solve(self, nit=1, out=1):
    for c in self.cells: # Identifica nós sólidos e no contorno
        if c.is_solid: self.solids.append(c)
        if c.has_vel_bc: self.pvel_cells.append(c)
        if c.has_rho_bc: self.prho_cells.append(c)
    nout = 0
    for i in range(nit):
        self.update()
        self.apply_bc()
        self.collide()
        self.bounce_back()
        self.stream()
        print "it: ", i, "\r",
        if i % out == 0:
            self.write(nout)
            nout = nout+1
# Método escrever arquivos de saída em formato vtk
def write(self, nout):
    """Writes the output files"""
    f = open('output'+str(nout)+'.vtk', 'w') # Escreve arquivo
    nx = self.nx
    ny = self.ny
    size = nx*ny
    f.write("# vtk DataFile Version 3.0\n") # File Version
    f.write("TimeStep = " + str(nout) + "\n") # Header
    f.write("ASCII\n") # Format
    f.write("DATASET STRUCTURED_POINTS\n") # Dataset structure
    f.write("DIMENSIONS " + str(nx) + " " + str(ny) + " " +
str(1) + "\n")
    f.write("ORIGIN 0 0 0 \n")
    f.write("SPACING 1 1 1 \n")
    f.write("POINT_DATA " + str(size) + "\n") # Dataset
attributes
    f.write("SCALARS Geom float\n") # Solid cells
    f.write("LOOKUP_TABLE solids\n")
    for c in self.cells:
        f.write(str(c.is_solid) + "\n")
    f.write("SCALARS Density float\n") # Density scalar field
    f.write("LOOKUP_TABLE densities\n")
    for c in self.cells:
        f.write(str(c.rho) + "\n")
    f.write("VECTORS Velocity float\n") # Velocity vectorial
field
    for c in self.cells:
        f.write(str(c.vx) + " " + str(c.vy) + " 0.0\n")
    f.close()

```

APÊNDICE B - CÓDIGO PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO POISEUILLE

```
# Importar modulo lbm
from flbm import *

# Definição do numero de Reynolds
Re = 5.0 # Reynolds number [-]

# Definição de tempo de relaxação e calculo de los pãmetros de
discretização
tau = 1.0 # Parâmetro de relaxação
nu_lb = (tau - 0.5) / 3 # Viscosidade do método
N_x = 20 # Resolução
N_t = int(N_x ** 2 / (Re * nu_lb) #Tamanho do passo de tempo
u_lb = N_x/N_t # Velocidade lattice definida a priori

# Imprimir parâmetros na tela
print 'Re:', Re, '\n', \
      'u_lb:', u_lb, '\t', 'N_x:', N_x, '\t', 'N_t:', N_t, '\n', \
      'tau:', tau, '\t', 'nu_lb:', nu_lb

# Definir a malha
nx = N_x
ny = N_x + 2 # para incluir os nós sólidos
lat = Lattice(nx, ny, tau)

# Definir contorno superior e inferior como sendo sólidos
lat.top.set_solid()
lat.bottom.set_solid()

# Inicialização das funções de distribuição de partículas
lat.set_state(rho=1.0, vx=u_lb, vy=0.0)

# Definição de condição de contorno de velocidade na entrada
def initial_vx(y):
    a = (ny - 2.0) / 2.0 # Half-way BB
    vx = u_lb * (1 - (y - a - 0.5) ** 2 / a ** 2)
    return vx

# Definição de condição de contorno de densidade na saída
lat.right.set_dens_bc(rho=1.0)

# Solução
lat.solve(nit=1000000, out=N_t)
```


APÊNDICE C- CÓDIGO PARA SIMULAÇÃO DE FLUXO PASSANDO POR UM CILINDRO

```

    Importar modulo lbm
from flbm import *

# Definição do numero de Reynolds
Re = 5.0 # Reynolds number [-]

# Definição de tempo de relaxação e calculo de los pâmetros de
discretização
tau = 1.0 # Parâmetro de relaxação
nu_lb = (tau - 0.5) / 3 # Viscosidade do método
u_lb = 0.03 # Velocidade lattice definida a priori
N_x = int(Re * nu_lb / u_lb) # Resolução
N_t = int(N_x / u_lb) #Tamanho do passo de tempo

# Imprimir parâmetros na tela
print 'Re:', Re, '\n', \
      'u_lb:', u_lb, '\t', 'N_x:', N_x, '\t', 'N_t:', N_t, '\n', \
      'tau:', tau, '\t', 'nu_lb:', nu_lb

# Definir a malha
nx = N_x * 10
ny = N_x * 6 + 2
lat = Lattice(nx, ny, tau)

# Definir contorno superior e inferior como sendo sólidos
lat.top.set_solid()
lat.bottom.set_solid()

# Definição do cilindro circular
obsX = 2 * N_x
obsY = ny/2
r = int(N_x / 2.0)
lat.solid_circle(obsX, obsY, r)

# Inicialização das funções de distribuição de partículas
lat.set_state(rho=1.0, vx=u_lb, vy=0.0)

# Definição de condição de contorno de velocidade na entrada
def initial_vx(y):
    a = (ny - 2.0) / 2.0 # Half-way BB
    vx = u_lb * (1 - (y - a - 0.5) ** 2 / a ** 2)
    return vx

# Definição de condição de contorno de densidade na saída
lat.right.set_dens_bc(rho=1.0)

# Solução
lat.solve(nit=1000000, out=N_t)

```


APÊNDICE D.1 - CÓDIGO PARA GERAÇÃO DE ARRANJOS DE PARTÍCULAS CIRCULARES DISTRIBUÍDAS REGULARMENTE

Os códigos para geração de geometrias foram escritos e executados em Matlab[®], comentários aparecem precedidos pelo símbolo %.

```
% Definição do tamanho do domínio
n_x=601;
n_y=301;

% Definição do raio das partículas
r =15;

% Definição de L (Figura 5.5)
L=35;

% Definir o centro do domínio
n_xm=round(n_x/2)+15;
n_ym=round(n_y/2)+15;
n_t=zeros(n_x,n_y);

c=0;
for i=-20:20
    for j=-20:20
        x=n_xm+L*i;
        y=n_ym+2*L*j;
        if mod(i,2)==0;
            y=y+L;
        end
        if x+r<0 || x-r>n_x
            continue
        end
        if y+r<0 || y-r>n_y
            continue
        end
        for k=1:n_x
            for l=1:n_y
                cir = (k - x) ^ 2 + (l - y) ^ 2;
                if cir <= r^2;
                    n_t(k,l)=1;
                end
            end
        end
        end
        c=c+1;
        px(c,:) = x - 1;
        py(c,:) = y - 1;
    end
end

% Cálculo da porosidade
n=sum(n_t(:)==0)/(size(n_t,1)*size(n_t,2))

% Escrever arquivo de dados
csvwrite('L35',p);
```


APÊNDICE D.2 - CÓDIGO PARA GERAÇÃO DE ARRANJOS DE PARTÍCULAS CIRCULARES DISTRIBUÍDAS ALEATORIAMENTE

```

% Definição da porosidade
n_0=0.95;

% Definição do domínio
n_x=601;
n_y=301;
n_t=zeros(n_x,n_y);

% Definição de raio máximo e mínimo da partícula
r_min=8;
r_max=30;

% Cálculo da Porosidade inicial
n=sum(n_t(:)==0)/(size(n_t,1)*size(n_t,2));

c=0;
while n >= n_0
% Funções de distribuição de probabilidade uniforme
  x=randi(n_x);
  y=randi(n_y);
  r=randi([r_min,r_max]);
  f=1;
  for i=1:n_x
    for j=1:n_y
      if n_t(x,y)==1
        f=0;
        break
      end
      cir = (i - x) ^ 2 + (j - y) ^ 2;
% Condição de comprimento de canal mínimo, não há superposição
      if cir <= (r+4)^2;
% Evitar posições que produzam instabilidade numéricas
        if n_t(i,j)==1 || i>=599 || i<=2;
          f=0;
          break
        end
      end
    end
  end
  end
  for i=1:n_x
    if f==0
      break
    end
    for j=1:n_y
      cir = (i - x) ^ 2 + (j - y) ^ 2;
      if cir <= r ^ 2;
        n_t(i,j)=1;
      end
    end
  end
  end
  if f==0

```

```
        continue
    else
        c=c+1;
        rx(c,:) = x;
        ry(c,:) = y;
        rr(c,:) = r;
        n=sum(n_t(:)==0)/(size(n_t,1)*size(n_t,2))
    end

end

% Escrever arquivo de saída
csvwrite('rn65',pr);
```