

2

Metodologia

2.1

Introdução

A modelagem numérica na escala da partícula e do poro pode ser uma ferramenta útil no estudo dos mecanismos fundamentais de fenômenos como o dano de formação e a produção de sólidos. Esta modelagem pode ser feita através do acoplamento de um método que trate do movimento das partículas e a interação entre elas, com um método que considere o fluxo de fluidos nos poros deste sistema de partículas. Para a simulação do movimento e interação das partículas o método dos elementos discretos (Discrete Element Method - DEM) (Cundall e Strack, 1979) é amplamente empregado para estudo de solos e rochas.

O acoplamento do fluxo com um modelo discreto de partículas pode ser feito de diversas formas. A maneira mais simplificada utiliza um modelo de fluxo baseado na lei de Darcy para um meio poroso contínuo superposto a um modelo de partículas discretas. Algumas implementações deste acoplamento foram utilizadas para o estudo de produção de areia ou de fraturamento hidráulico (O'Connor et al, 1997, Dorfmann et al., 1997, Preece et al., 1999, Bruno et al., 2001, Li et al, 2006). Uma outra abordagem resolve as equações de Navier-Stokes através de uma técnica de média local desenvolvida por Anderson e Jackson (Anderson e Jackson, 1967). Neste método as variáveis de fluxo são resolvidas numa célula que contém várias partículas sólidas e as interações fluido-partículas são consideradas através de relações semi-empíricas. Este método tem sido aplicado em estudos de fluidização (Xu e Yu, 1997, Di Renzo e Di Maio, 2007).

A principal característica destas duas abordagens é que o movimento das partículas e o fluxo nos poros são tratados em escalas diferentes. Enquanto que a parte mecânica é considerada no nível da partícula de forma discreta, o fluxo é tratado numa escala macroscópica considerando um meio poroso contínuo. Desta forma os detalhes do fluxo nos poros e sua influência no movimento das partículas são desconsiderados.

O fluxo nos poros pode ser simulado numa rede de poros (Blunt e King, 1991). Uma rede de poros é uma representação simplificada do meio poroso constituída de poros conectados por condutos. As maiores dificuldades relacionadas a rede de poros são a criação da geometria da rede de poros (poros-condutos) a partir da geometria real do meio poroso, e a determinação dos parâmetros de condutância necessários para a simulação de fluxo na rede de poros. Li (Li, 2002) estudou a variação da permeabilidade absoluta com o estado de tensões usando um modelo de partículas acoplado a uma rede de poros.

A simulação do fluxo nos poros com sua real geometria exige a solução das equações de Navier-Stokes neste domínio. Hu (Hu, 1996) e Maury (Maury, 1999) apresentaram simulações de acoplamento de movimento de partículas e fluxo de fluido utilizando o método dos elementos finitos, para problemas a duas dimensões, com fração de sólidos baixa, e sem interação entre partículas. Esta abordagem parece ser pouco eficiente visto que é necessário que a malha seja refeita ao longo da simulação devido o movimento das partículas. A técnica da fronteira imersa (Fogelson e Peskin, 1988, Hofler, 2000) e o método do domínio fictício (Glowinski et al., 1999) não apresentam esta desvantagem e parecem ser métodos eficientes para o estudo de acoplamento de fluxo monofásico com o movimento de partículas sólidas.

Um método alternativo para a solução das equações de Navier-Stokes é o método de lattice-Boltzmann (McNamara e Zanetti, 1988, Qian et al, 1992). Este método tem sido utilizado em simulações de fluxo em geometrias complexas e tem se mostrado mais eficiente computacionalmente, nestas condições, do que os métodos tradicionais (Bernsdorf et al., 1999, Geller et al., 2006). Nourgaliev et al. (Nourgaliev et al., 2003) sugerem que o método de lattice-Boltzmann (Lattice-Boltzmann Method - LBM) pertence à classe dos resolvidores (“solvers”) pseudocompressíveis das equações de Navier-Stokes para fluxo incompressível e, como tal, o LBM possui as vantagens (simplicidade do algoritmo e a ausência da solução da equação de Poisson) e as desvantagens (intervalo de tempo pequeno e compressibilidade artificial) características da classe. Segundo Nourgaliev et al. (Nourgaliev et al., 2003), o LBM seria computacionalmente comparável ao método de “compressibilidade artificial” para fluxos em geometrias complexas com número de Reynolds alto e moderado, e superior em fluxos com número de Reynolds baixo, como fluxo em meios porosos.

Uma vantagem do LBM é sua capacidade de simular fluido bifásico em geometrias complexas, e ele tem sido muito utilizado em simulações de fluxo mono e bifásico em meios porosos como solos e rochas. Sua

principal aplicação nesta área tem sido a determinação de permeabilidades absoluta e relativa de rochas (Gunstensen e Rothman, 1993, Ferreol e Rothman, 1995, Martys e Chen, 1996, Olson e Rothman, 1997, Hazlett et al., 1998, Keehm, 2003, Kutay et al., 2006, Ramstad et al., 2009). A determinação de relações saturação x pressão capilar também tem sido estudada com este método (Pan, 2004, Schaap et al., 2006, Porter et al., 2009). Ladd (Ladd, 1994) propôs a aplicação do LBM na análise de partículas suspensas em fluido acoplando o LBM ao movimento de partículas sólidas que não interagem entre si. Cook e Noble (Cook e Noble, 2004) acoplaram o LBM ao método dos elementos discretos para estudo de erosão de leito a duas dimensões. Boutt et al. (Boutt et al., 2007) aplicaram o sistema acoplado LBDEM à modelagem do problema de fraturamento hidráulico natural.

Dadas as características dos problemas de interesse neste trabalho (fluxo mono e bifásico no meio poroso - geometria complexa - e acoplamento de movimentos das partículas com o fluxo), a literatura parece indicar que o LBM é, atualmente, o método mais adequado para se atingir os objetivos pretendidos.

Um problema associado ao LBM convencional na solução das equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis é o efeito de compressibilidade (He e Luo, 1997). Este efeito se torna relevante principalmente quando se utiliza a condição de diferencial de pressão imposta nos contornos, que é a condição de contorno adequada a estudos de produção de sólidos, por exemplo. Neste trabalho será utilizada a formulação proposta por He e Luo (He e Luo, 1997), acoplada ao DEM, que reduz o efeito de compressibilidade no LBM, o que permite a aplicação de diferenciais de pressão maiores do que o LBM convencional.

Um aspecto que parece ser relevante no processo de produção de sólidos e que tem sido pouco abordado na simulação na microescala é a força capilar entre grãos. Gili e Alonso (Gili e Alonso, 2002) criaram um modelo acoplado utilizando o DEM e uma rede de poros onde a força capilar é calculada a partir da geometria estabelecida do menisco entre duas esferas. Ibañez (Ibañez, 2008) utilizou uma abordagem semelhante para estudos relacionados a solos residuais. Estes dois trabalhos tratam de domínios bidimensionais e têm sua aplicação voltada a estudos de solos não saturados. Grof et al. (Grof et al., 2009) usaram uma solução aproximada para a força capilar entre duas esferas numa simulação acoplada utilizando o DEM e a solução das equações de Navier-Stokes no regime permanente pelo método dos volumes finitos num domínio tridimensional.

Neste capítulo são apresentados os métodos utilizados do desenvolvi-

mento do sistema fluidomecânico acoplado. Inicialmente será descrito o método dos elementos discretos que trata da movimentação e interação das partículas sólidas, em seguida será apresentado o método de lattice-Boltzmann que resolve o fluxo mono e bifásico que ocorre nos poros do meio geológico, e finalmente será apresentado o esquema de acoplamento entre estes dois métodos.

2.2

Método dos Elementos Discretos

O movimento e a interação entre partículas sólidas são modelados, neste trabalho, utilizando o método dos elementos discretos (Discrete Element Method - DEM). O DEM foi introduzido por Cundall (Cundall, 1971) para a análise de problemas de mecânica das rochas e depois aplicado a materiais granulares por Cundall e Strack (Cundall e Strack, 1979).

No DEM, a interação entre as partículas sólidas (discos em 2D e esferas em 3D) é tratada como um processo dinâmico. As forças dos contatos e deslocamentos de um conjunto de partículas são determinados pelo acompanhamento dos movimentos de partículas individuais. Os movimentos são resultados da propagação, através de um sistema de partículas, dos distúrbios causados por um movimento ou força impostos às paredes ou partículas. Este é um processo dinâmico onde a velocidade de propagação do distúrbio depende das propriedades físicas do sistema discreto. Admite-se que este comportamento dinâmico pode ser solucionado desde que se escolha um intervalo de tempo tão pequeno de forma que o distúrbio em uma partícula não se propague além das partículas vizinhas imediatas. Desta forma, em qualquer tempo as forças resultantes em cada partícula podem ser determinadas exclusivamente a partir da interação desta partícula com as partículas que fazem contato com ela. Como a velocidade de propagação do distúrbio é função das propriedades físicas do sistema discreto, o intervalo de tempo deve ser escolhido para satisfazer esta condição.

O uso de um esquema numérico explícito, no lugar de um implícito, torna possível a simulação do comportamento não-linear de um grande número de partículas sem a exigência de memória excessiva ou a necessidade de um procedimento iterativo. Os cálculos do DEM alternam a aplicação da lei de Newton às partículas e a lei força-deslocamento nos contatos (fig. (2.1)).

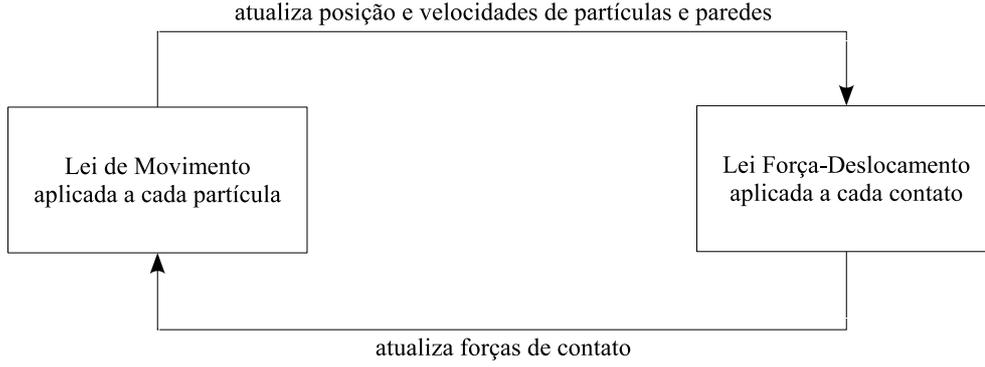


Figura 2.1: Ciclo de cálculo do DEM

A segunda lei de Newton do movimento é usada para descrever o movimento de uma partícula individual. A equação que governa o movimento translacional de uma partícula é:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}_a + \sum_{j=1}^{nc} \mathbf{F}_{c,j} + m\mathbf{g} \quad (2.1)$$

onde m e \mathbf{v} são, respectivamente, a massa e a velocidade da partícula, e nc é o número de contatos da partícula. As forças envolvidas são a força aplicada \mathbf{F}_a (que pode ser, por exemplo, a força de fluxo), a força gravitacional $m\mathbf{g}$, e as forças nos contatos entre esta partícula e as que fazem contato com ela, $\mathbf{F}_{c,j}$. A equação que governa o movimento rotacional da partícula é:

$$I \frac{d\boldsymbol{\omega}}{dt} = \mathbf{T}_a + \sum_{j=1}^{nc} \mathbf{T}_{c,j} \quad (2.2)$$

onde $\boldsymbol{\omega}$ e I são, respectivamente, a velocidade angular e o momento de inércia da partícula, $\mathbf{T}_{c,j}$ é o torque gerado pelas forças de contato entre esta partícula e as que fazem contato com ela, e \mathbf{T}_a é o torque aplicado na partícula. As equações do movimento (2.1) e (2.2) são integradas usando um procedimento de diferenças finitas centrais. A velocidade translacional, \mathbf{v} , e a velocidade angular, $\boldsymbol{\omega}$, são calculadas no centro do intervalo de tempo, enquanto que acelerações, deslocamento, força e momento são calculadas nos seus extremos. Desta forma calcula-se as velocidades no tempo $(t + \Delta t/2)$:

$$\mathbf{v}^{(t+\Delta t/2)} = \mathbf{v}^{(t-\Delta t/2)} + \left(\frac{\mathbf{F}^t}{m} + \mathbf{g} \right) \Delta t \quad (2.3)$$

$$\boldsymbol{\omega}^{(t+\Delta t/2)} = \boldsymbol{\omega}^{(t-\Delta t/2)} + \frac{\mathbf{T}^t}{I} \Delta t \quad (2.4)$$

sendo \mathbf{F} e \mathbf{T} a força e torque resultantes (devidos às forças aplicadas e às forças dos contatos). E com as velocidades obtém-se a posição do centróide e a rotação da partícula:

$$\mathbf{x}^{(t+\Delta t)} = \mathbf{x}^t + \mathbf{v}^{(t+\Delta t/2)} \Delta t \quad (2.5)$$

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+\Delta t)} = \boldsymbol{\theta}^t + \boldsymbol{\omega}^{(t+\Delta t/2)} \Delta t \quad (2.6)$$

Sistemas dinâmicos naturais contém algum grau de amortecimento das vibrações que ocorrem, caso contrário o sistema ia oscilar indefinidamente quando submetido a carregamentos. Vários tipos de amortecimentos são propostos para a solução de problemas pelo DEM. Detalhes sobre estes tipos de amortecimentos utilizados no DEM são apresentados e discutidos por Figueiredo (Figueiredo, 1991) e no manual do software comercial PFC2D (Itasca, 2002). Para os problemas quasi-estáticos, como os abordados neste trabalho, o amortecimento local não-viscoso é indicado (Itasca, 2002). No amortecimento local um termo de amortecimento é adicionado às equações de movimento (eqs. (2.1) e (2.2)) de forma que as velocidades passam a ser dadas por:

$$\mathbf{v}^{(t+\Delta t/2)} = \mathbf{v}^{(t-\Delta t/2)} + \left(\frac{\mathbf{F}^t}{m} + \mathbf{g} + \frac{\mathbf{F}_d^t}{m} \right) \Delta t \quad (2.7)$$

$$\boldsymbol{\omega}^{(t+\Delta t/2)} = \boldsymbol{\omega}^{(t-\Delta t/2)} + \left(\frac{\mathbf{T}^t}{I} + \frac{\mathbf{T}_d^t}{I} \right) \Delta t \quad (2.8)$$

onde as forças de amortecimento, \mathbf{F}_d e \mathbf{T}_d , são expressas como:

$$\mathbf{F}_d = -\alpha |\mathbf{F}| \text{sign}(\mathbf{v}) \quad (2.9)$$

$$\mathbf{T}_d = -\alpha |\mathbf{T}| \text{sign}(\boldsymbol{\omega}) \quad (2.10)$$

onde α é o coeficiente de amortecimento local.

O comportamento geral de um material é simulado no DEM através de modelos constitutivos (lei força-deslocamento) simples associados a cada contato. Com o modelo constitutivo é calculada a força de contato entre duas partículas e entre uma partícula e uma parede. A figura (2.2) mostra uma

representação gráfica de um modelo constitutivo de rigidez linear elástica com escorregamento.

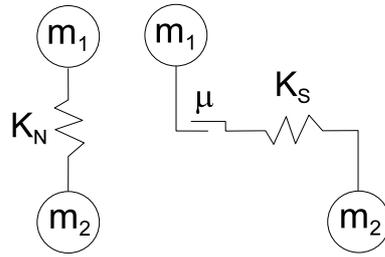


Figura 2.2: Representação gráfica do modelo de contato entre partículas. À esquerda na direção normal e à direita na direção cisalhante.

O vetor da força de contato \mathbf{F}_c pode ser decomposto nas componentes normal e cisalhante:

$$\mathbf{F}_c = \mathbf{F}_c^N + \mathbf{F}_c^S \quad (2.11)$$

A força normal é dada por:

$$\mathbf{F}_c^N = K_N U_N \mathbf{n} \quad (2.12)$$

onde K_N é a rigidez normal do contato, \mathbf{n} é o vetor normal ao plano de contato e U_N é a sobreposição entre as duas entidades (fig.(2.3)):

$$U_N = \begin{cases} R_1 + R_2 - d & \text{se contato entre partículas 1 e 2} \\ R_1 - d & \text{se contato entre partícula e parede} \end{cases} \quad (2.13)$$

A força cisalhante é calculada de forma incremental. Quando um contato é formado, a força cisalhante de contato é nula, e subsequentes deslocamentos cisalhantes resultam em incrementos desta força:

$$\Delta \mathbf{F}_c^S = k_S \mathbf{v}_c^S \Delta t \quad (2.14)$$

sendo \mathbf{v}_c^S a velocidade relativa cisalhante no contato e k_S é a rigidez cisalhante do contato.

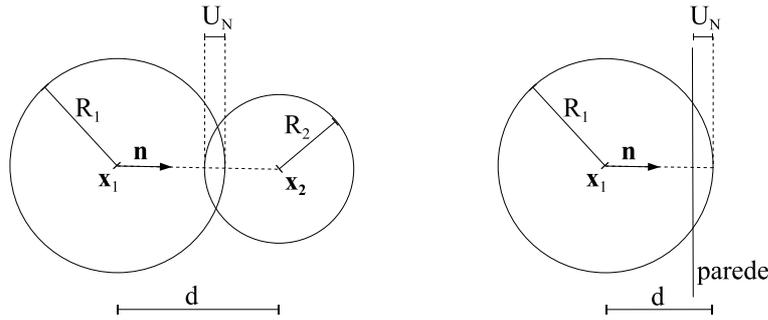


Figura 2.3: Notação usada para descrever os contatos

O modelo de cimentação entre partículas adotado neste trabalho é definido por três parâmetros: a resistência à compressão, σ_{cC} , a resistência à tração, σ_{cT} , e a resistência ao cisalhamento, τ_c . Se as forças normal de compressão, tração ou de cisalhamento excederem as forças resistentes dadas por:

$$\begin{aligned} F_r^C &= \sigma_{cC}(R_1 + R_2)^2 \\ F_r^T &= \sigma_{cT}(R_1 + R_2)^2 \\ F_r^S &= \tau_c(R_1 + R_2)^2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

a cimentação no contato é rompida tornando-se inativa. Quando a ruptura é por compressão ocorre também a quebra dos grãos. Este processo de quebra de grãos tem sido modelado de diversas maneiras no DEM. Holt et al. (Holt et al., 2008) usaram o conceito de superpartículas onde um grão pode ser formado por diversos elementos discretos e a resistência da cimentação entre contatos destes elementos é maior do que entre as superpartículas. Esta é uma abordagem interessante, principalmente por permitir a criação de grãos sólidos de formas diversas, entretanto o seu custo computacional é muito grande devido o grande número de partículas necessárias para a formação de um grão. A quebra de grãos foi simulada por Ibañez (Ibañez, 2008) utilizando uma abordagem inspirada no ensaio brasileiro. Quando a resistência à tração da partícula é alcançada, devido as forças de compressão geradas pelas partículas vizinhas, esta se quebra em duas de forma que a massa seja conservada. De maneiras mais simplificadas Marketos e Bolton (Marketos e Bolton, 2007) e Wang et al. (Wang et al., 2008) também implementaram a quebra de grãos. A abordagem utilizada neste trabalho se assemelha a descrita por Wang et al. (Wang et al., 2008), na qual quando a resistência à compressão de um contato é alcançada a cimentação é rompida e os raios das partículas que formavam este contato são diminuídos por uma fração (1% do raio da partícula). Esta diminuição de raio representa a fração da partícula que é esmigalhada pelo

processo de quebra.

O modelo de escorregamento é definido pelo coeficiente de atrito no contato, μ , e somente é ativo se a cimentação no contato estiver inativa. Neste caso não é permitida a força de tração no contato, então:

$$\begin{aligned} &\text{se } U_N < 0 \\ &\text{então } \mathbf{F}_c^N = \mathbf{F}_c^S = 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

O modelo de escorregamento limita a força cisalhante a um valor máximo:

$$F_{max}^S = \mu |\mathbf{F}_c^N| \quad (2.17)$$

E se $|\mathbf{F}_c^S| > F_{max}^S$ o escorregamento pode ocorrer, fazendo:

$$\mathbf{F}_c^S = \mathbf{F}_c^S \frac{F_{max}^S}{|\mathbf{F}_c^S|} \quad (2.18)$$

As equações de movimento são integradas usando um esquema de diferenças finitas centrais. A solução destas equações só é estável se o intervalo de tempo não exceder um intervalo de tempo crítico. Uma forma simplificada de encontrar este intervalo de tempo crítico é considerar um sistema massa-mola unidimensional descrito por uma massa m e uma mola de rigidez k . O movimento desta massa é governado pela equação $-kx = m\ddot{x}$. O intervalo crítico correspondente ao esquema de diferenças finitas de segunda ordem para esta equação é dada por (Bathe e Wilson, 1976):

$$\Delta t_{crit} = 2\sqrt{\left(\frac{m}{k}\right)} \quad (2.19)$$

Entretanto, como nas simulações realizadas com o DEM estão presentes várias partículas, calcula-se o Δt_{crit} para cada partícula e adota-se o menor valor entre eles. E para considerar a interação entre as várias partículas, o que torna o sistema mais rígido, aplica-se um fator, geralmente $t_{frac} = 0.1$ (Figueiredo, 1991), para se chegar ao intervalo de tempo utilizado nas simulações:

$$\Delta t = t_{frac} \Delta t_{crit}^{min} \quad (2.20)$$

2.3

Método de Lattice-Boltzmann

2.3.1

Histórico

O método de lattice-Boltzmann (LBM) tem sua origem no modelo de lattice-Gas (Frisch et al., 1986). O lattice-Gas é construído como um modelo molecular dinâmico fictício simplificado onde o espaço, o tempo e velocidades das partículas são discretos. O modelo de lattice-Gas consiste em uma rede regular com partículas residindo nos nós. Um conjunto de variáveis Booleanas $n_i(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, \dots, b$) que descrevem a ocupação da partícula é definido para a rede, onde b é o número de direções de velocidade da partícula em cada nó. A partir de uma configuração inicial, a evolução das partículas à cada intervalo de tempo envolve duas etapas: a propagação, onde cada partícula se move para o nó mais próximo na direção de sua velocidade; e a colisão, que ocorre quando duas partículas chegam no mesmo nó e mudam sua velocidade de acordo com regras simples de colisão que conservam massa e quantidade de movimento. Apesar de simples este modelo é capaz de reproduzir o comportamento macroscópico do fluxo (Rothman e Zaleski, 2004). Entretanto, os modelos de lattice-Gas apresentam algumas desvantagens, tais como ruído estatístico, e alguns comportamentos físicos indesejáveis (Qian et al, 1992).

Para resolver as dificuldades dos modelos de lattice-Gas surgiram os métodos de lattice-Boltzmann. O primeiro foi proposto por McNamara e Zanetti (McNamara e Zanetti, 1988) que usaram a população média de partículas no lugar das variáveis Booleanas (n_i passa a ser uma variável real entre 0 e 1 no lugar de 0 ou 1). Este procedimento eliminou o ruído estatístico. Uma simplificação importante no LBM foi proposta por Higuera e Jiménez (Higuera e Jimenez, 1989) que linearizaram o operador de colisão assumindo que a distribuição é próxima ao estado de equilíbrio local. Em 1990, Qian (Qian, 1990) sugeriu uma versão mais simples do operador de colisão que utiliza um único tempo de relaxação. O LBM proposto por Qian (1990) se tornou o mais utilizado pela sua simplicidade e eficiência (Succi, 2001, Chen e Doolen, 1998).

2.3.2

Fluxo Monofásico

O fluxo macroscópico é resultado da interação de várias partículas (moléculas) no nível microscópico. Considerando, no tempo t , um pequeno volume $d\mathbf{x}$ na vizinhança da posição \mathbf{x} pode-se definir as variáveis macroscópicas

do fluxo (velocidade de fluxo, \mathbf{u} e densidade do fluido, ρ) em \mathbf{x} e t de acordo com (Chen, 1993):

$$\rho(\mathbf{x}, t)d\mathbf{x} = mn(\mathbf{x}, t) \quad (2.21)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{n(\mathbf{x}, t)} \sum_{i=1}^{n(\mathbf{x}, t)} \mathbf{v}_i \quad (2.22)$$

onde m é a massa da partícula (adotando aqui a mesma massa para todas as partículas), $n(\mathbf{x}, t)$ é o número de partículas ($\sim 10^{23}$) no volume $d\mathbf{x}$ no tempo t , e \mathbf{v}_i é a velocidade da partícula. Das eq. (2.21) e (2.22) percebe-se que as variáveis macroscópicas do fluxo podem ser expressas como médias no volume $d\mathbf{x}$. Logo, conhecendo-se a dinâmica destas partículas, que pode ser descrita pelas equações clássicas de Newton, poderia-se conhecer o fluxo no nível macroscópico. Entretanto este cálculo é impraticável por causa do número tão grande de partículas interagindo. Porém as quantidades físicas observáveis tais como velocidade e densidade são resultado de uma média estatística da dinâmica de um grande número de partículas (Succi, 2001).

Desta forma, ao invés de seguir o movimento de cada uma destas partículas pode-se agrupá-las de acordo com suas posições e velocidades. As possíveis velocidades de uma partícula formam um espaço de velocidade, e uma velocidade particular define um ponto neste espaço. O produto direto dos espaços de posição e velocidade é chamado de espaço fase. Pode-se dividir o espaço fase em pequenos volumes $d\mathbf{x}d\mathbf{v}$. Uma partícula num volume centrado em (\mathbf{x}, \mathbf{v}) tem sua posição na vizinhança de \mathbf{x} e sua velocidade na vizinhança de \mathbf{v} . A partir disto define-se como $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ o número provável de partículas na posição \mathbf{x} , no tempo t , com a velocidade \mathbf{v} . A quantidade $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ é conhecida como função de distribuição. As variáveis macroscópicas do fluido são relacionadas a $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ por:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = m \int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v} \quad (2.23)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{\int \mathbf{v}f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v}}{\int f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{v}} \quad (2.24)$$

onde tomou-se o limite $d\mathbf{x}d\mathbf{v} \rightarrow 0$. Com as eqs. (2.23) e (2.24) as variáveis macroscópicas do fluido podem ser calculadas se $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ é conhecido.

Como o número total de partículas deve ser conservado, as partículas que originalmente ocupam o volume $d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ centrado em (\mathbf{x}, \mathbf{v}) vão ocupar um volume $d\mathbf{x}'d\mathbf{v}'$ centrado em $(\mathbf{x}', \mathbf{v}')$ no tempo $t + \Delta t$. Então tem-se:

$$f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t + \Delta t) d\mathbf{x}' d\mathbf{v}' = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{v} \quad (2.25)$$

Considerando que as partículas não interagem e que a dimensão do volume não varia ($d\mathbf{x}d\mathbf{v} = d\mathbf{x}'d\mathbf{v}'$), a eq.(2.25) fica reduzida a:

$$f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t + \Delta t) = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.26)$$

onde:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{v}\Delta t \quad (2.27)$$

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} + \frac{\mathbf{F}}{m}\Delta t \quad (2.28)$$

sendo \mathbf{F} uma força externa. Por causa de colisões que ocorrem, algumas partículas originalmente no volume $d\mathbf{x}d\mathbf{v}$ podem ser excluídas antes de alcançar o novo volume, e algumas partículas originalmente fora podem ser incluídas neste volume. Então a eq. (2.26) deve ser modificada por um termo adicional, δ_c (variação da função distribuição por unidade de tempo), que considera as variações em f devido as colisões:

$$f(\mathbf{x}', \mathbf{v}', t + \Delta t) = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) + \delta_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)\Delta t \quad (2.29)$$

Fazendo $\Delta t \rightarrow 0$, a eq. (2.29) pode ser escrita como a seguinte equação diferencial:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \delta_c(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \quad (2.30)$$

A eq. (2.30) é a forma geral da equação de Boltzmann. Da solução da equação de Boltzmann pode-se obter as quantidades macroscópicas do fluido a partir das eq. (2.23) e (2.24). O termo de colisão da eq. (2.30), δ_c , deve ser consistente com as leis básicas de conservação (massa e quantidade de movimento) e depende da dinâmica detalhada das partículas. No geral, a forma de δ_c é complexa e leva a equação de Boltzmann a uma forma integro-diferencial não-linear (Salinas, 1997). A forma mais simples (mas ainda assim complexa) de δ_c foi dada por Boltzmann para um gás diluto onde partículas sofrem somente colisões elásticas de curto alcance.

Portanto, a solução direta da equação de Boltzmann não é um meio eficiente de analisar o fluxo de fluidos. Um problema é que o termo de colisão

tem que ser definido explicitamente para determinar inteiramente a equação de Boltzmann. Um outro problema é que a função de distribuição é uma função de \mathbf{x} e \mathbf{v} , enquanto que as variáveis macroscópicas são funções somente de \mathbf{x} . Após resolver a equação para $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ ainda é necessária a integração em \mathbf{v} para se obter as variáveis macroscópicas pelas eq. (2.23) e (2.24) .

Considerando que grande parte dos detalhes das interações entre as partículas não influencia significativamente os valores das variáveis macroscópicas, expressões mais simples para o termo de colisão foram propostas. O operador de colisão deve ser tal que as condições de conservação de massa e quantidade de movimento sejam satisfeitas. O modelo de colisão mais conhecido e muito adotado é o modelo de aproximação BGK sendo expresso por (Bhatnagar et al., 1953, Wolf-Gladrow, 2000):

$$\delta_c = \frac{1}{\tau} (f^{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) - f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)) \quad (2.31)$$

onde τ é o tempo de colisão e f^{eq} é a função de distribuição de equilíbrio. A aproximação BGK expressa o fato de que as colisões tendem a relaxar a função distribuição para um valor de equilíbrio (Bhatnagar et al., 1953). Esta função de distribuição de equilíbrio é a de Maxwell-Boltzmann, visto que a equação de Boltzmann (2.30) no estado de equilíbrio, que corresponde ao limite $t \rightarrow \infty$, deve recuperar a distribuição de Maxwell-Boltzmann (Salinas, 1997).

Simplificando o termo de colisão através da adoção da aproximação BGK, a parte de velocidade do espaço fase pode ser considerada a principal causa da ineficiência na solução da equação de Boltzmann. Para reduzir a sua dimensão, considera-se um sistema artificial no qual as partículas podem residir somente nos nós de uma rede (discretização do espaço) e seus movimentos se dão de um nó para outro em intervalos de tempo definidos (discretização do tempo). A direção da velocidade é determinada pela direção das ligações que conectam um nó a outro (fig.(2.4)) e a magnitude da velocidade é dada pela distância entre cada par de nós da rede dividida pelo intervalo de tempo (discretização da velocidade). Consequentemente, a dimensão do espaço fase associado a uma rede (“lattice”) é significativamente menor do que no espaço fase contínuo.

Uma vez que o espaço fase discreto é definido, pode-se construir a equação de lattice-Boltzmann para a evolução de $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$. Como em uma rede só há um número discreto de valores de velocidades pode-se substituir \mathbf{v} por um conjunto de valores possíveis de \mathbf{v}_α ($\alpha = 1, \dots, b$; onde b é o número total de valores de velocidades) e escrever a função distribuição discreta como $f_\alpha(\mathbf{x}, t)$.

Nem todas as configurações de rede são capazes de reproduzir o fluxo

macroscópico. A rede deve apresentar simetria suficiente para isto. A rede mais utilizada em duas dimensões é denominada D2Q9 (2 dimensões, 9 velocidades, sendo uma das velocidades nula) (fig. (2.4)), e para três dimensões são muito utilizadas as redes D3Q15 e D3Q19 (Wolf-Gladrow, 2000).

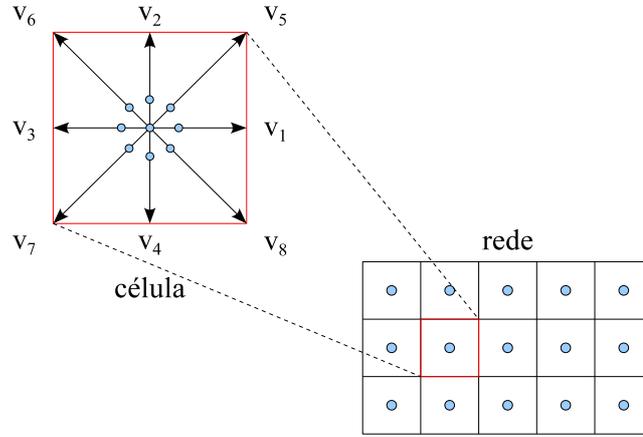


Figura 2.4: Rede D2Q9 - duas dimensões, nove velocidades

Os diversos métodos de lattice-Boltzmann (que utilizam a discretização de velocidades) se diferenciam pelo tipo de modelo de colisão que adotam. O LBM que utiliza a aproximação de BGK, também conhecido como LBGK, é um dos mais utilizados pela sua simplicidade e eficiência (Succi, 2001). A equação de lattice-Boltzmann, similar à eq. (2.29), utilizando a aproximação de BGK é dada por:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.32)$$

sendo f_α^{eq} a função de distribuição discreta de equilíbrio. A função de distribuição discreta de equilíbrio deve ser função das variáveis macroscópicas, \mathbf{u} e ρ , locais. Para as redes D2Q9 e D3Q19 ela é definida como (Qian et al, 1992, Wolf-Gladrow, 2000):

$$f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_\alpha \rho \left[1 + 3 \frac{(\mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\mathbf{u}^2}{c^2} \right] \quad (2.33)$$

onde \mathbf{v}_α são as velocidades da rede e w_α são coeficientes que dependem da rede, e estão apresentados no apêndice A, e $c = \frac{\Delta x}{\Delta t}$, sendo Δx o espaçamento da rede e Δt o intervalo de tempo.

Impondo condições iniciais e de contorno, a equação de lattice-Boltzmann é resolvida e as variáveis macroscópicas do fluxo de fluido podem ser obtidas

com as seguintes expressões:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = m \sum_{\alpha=1}^b f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (2.34)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{m}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_{\alpha=1}^b \mathbf{v}_{\alpha} f_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (2.35)$$

Diferente da equação original de Boltzmann, a equação de lattice-Boltzmann envolve somente coordenadas espaciais, e o somatório em relação a velocidade é feito de forma trivial.

Para se determinar o comportamento macroscópico do LBM utiliza-se o procedimento de Chapman-Enskog (ou procedimento multi-escala) (Wolf-Gladrow, 2000). Com este procedimento obtém-se as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.37)$$

onde $P = p/\rho$, sendo p a pressão e ν a viscosidade cinemática do fluido. As equações acima são as equações de Navier-Stokes para fluido incompressível, entretanto duas condições são consideradas para se chegar a estas equações pelo procedimento multi-escala. A primeira diz que as variações de densidade devem ser pequenas, $\Delta\rho/\rho \ll 1$, e a outra que o número de Mach também deve ser baixo, $Ma \ll 1$. O número de Mach é definido por:

$$Ma = \frac{u_{max}}{c_s} \quad (2.38)$$

onde u_{max} é a velocidade de fluxo máxima e c_s a “pseudo-velocidade do som no fluido” (Nourgaliev et al., 2003), que para as redes D2Q9 e D13Q19 é dada por (Qian et al, 1992, Wolf-Gladrow, 2000):

$$c_s = \sqrt{\frac{c^2}{3}} \quad (2.39)$$

A pressão é expressa por (Qian et al, 1992, Wolf-Gladrow, 2000):

$$p = \rho c_s^2 \quad (2.40)$$

que é a equação de estado de um gás ideal, e que é também adequada para líquido se as flutuações de densidade são pequenas, de forma que $\Delta p = c_s^2 \Delta \rho$ (Ladd e Verberg, 2001). A viscosidade cinemática é definida como (Qian et al, 1992, Wolf-Gladrow, 2000):

$$\nu = \frac{c_s^2}{3} \Delta t (\tau^* - 0.5) \quad (2.41)$$

onde $\tau^* = \frac{\tau}{\Delta t}$ é o tempo de colisão adimensional. Através da equ. (2.41) determina-se o tempo de colisão adimensional em função da viscosidade do fluido.

A solução da equação de lattice-Boltzmann é geralmente obtida em duas etapas:

Colisão:

$$f'_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau^*} (f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.42)$$

Propagação:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = f'_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (2.43)$$

onde f'_α é a função distribuição pós-colisão. A etapa de colisão redistribui as partículas no nó devido o efeito de colisão, e a etapa de propagação propaga as partículas para os nós vizinhos. A solução do esquema é estável para $\tau^* > 0.5$ (Wolf-Gladrow, 2000, Nourgaliev et al., 2003). Esta condição também garante uma viscosidade positiva (eq. (2.41)).

Um aspecto importante no estudo do fluxo no meio poroso é o tratamento da condição de contorno nos sólidos do meio poroso. Na simulação do fluxo, a presença do sólido em repouso é representada pela condição de contorno de não-escorregamento (“no-slip condition”) que especifica que o fluido não penetra o contorno e tem velocidade nula junto ao sólido. No LBM esta condição é obtida com a condição “bounce-back” que determina que as partículas de fluido que encontram uma superfície sólida são refletidas na direção da qual vieram (Verberg et al, 2000). A etapa de propagação para o tratamento dos sólidos é modificada da seguinte forma:

Propagação:

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = \begin{cases} f'_\alpha(\mathbf{x}, t) & \text{se } \mathbf{x} \text{ é fluido} \\ f'_{-\alpha}(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t) & \text{se } \mathbf{x} \text{ é sólido} \end{cases} \quad (2.44)$$

onde $-\alpha$ é definido de forma que $\mathbf{v}_\alpha = -\mathbf{v}_\alpha$. A condição do tipo “bounce-back” considera que a parede sólida está localizada em $\mathbf{x} + 0.5\mathbf{v}\Delta t$. Para considerar a parede sólida num ponto qualquer entre \mathbf{x} e $\mathbf{x} + \mathbf{v}\Delta t$ Bouzidi et al. (Bouzidi et al, 2001) sugerem esquemas de interpolação.

As condições de contorno, relevantes para os objetivos deste trabalho, são as do tipo periódico, pressão prescrita e velocidade prescrita. O método para a imposição das condições de contorno de pressão e velocidade adotado neste trabalho é o sugerido por Zou e He (Zou e He, 1997). O apêndice B apresenta as equações referentes à condição de contorno de pressão prescrita. A condição de contorno periódico simula a situação apresentada na figura (2.5), ou seja, é simulada uma região de um domínio que se repete na direção da condição de contorno periódico. No LBM esta condição de contorno é implementada fazendo com que, na etapa de propagação, as partículas de fluido que saem por um lado entrem pelo lado oposto, como mostrado na figura (2.6).

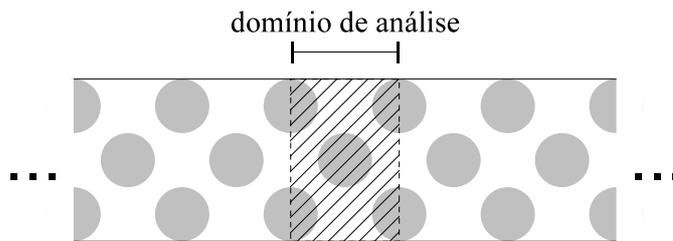


Figura 2.5: Domínio Periódico

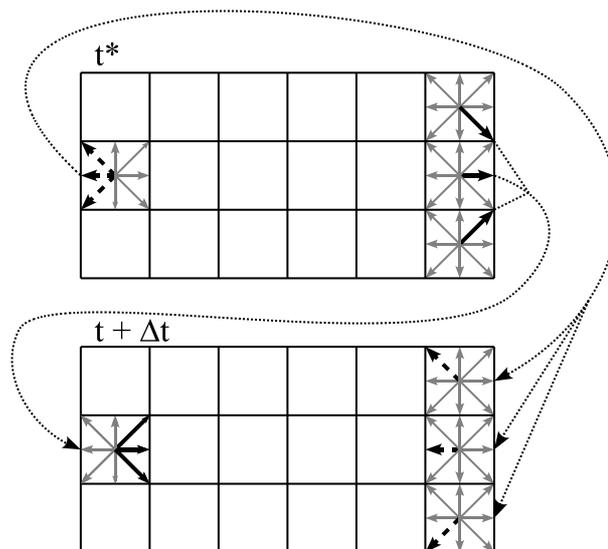


Figura 2.6: Condição de Contorno Periódico

2.3.3

LBM incompressível

Para simular corretamente a equação de Navier-Stokes incompressível com o LBM, deve-se garantir que o número de Mach e a variação de densidade sejam pequenos. Entretanto, a única maneira de impor um gradiente de pressão para gerar o fluxo no LBM é mantendo um gradiente de densidade no sistema, porque a pressão não é uma variável independente (no LBM), sendo dada pela equação de estado de gás ideal (eq. (2.40)). Desta forma, a hipótese de densidade constante não é mais válida e a magnitude da variação de densidade pode ser significativa. Isto, inevitavelmente, trará erros nas simulações das equações de Navier-Stokes incompressível pelo LBM. He e Luo (He e Luo, 1997) propuseram um LBM para a equação de Navier-Stokes incompressível (identificado neste trabalho como LBM incompressível) cuja idéia básica é eliminar explicitamente o efeito de compressibilidade, desprezando os termos de ordem elevadas de Ma na função distribuição de equilíbrio (eq.(2.33)). Serão apresentadas neste trabalho as equações do LBM incompressível. Detalhes sobre a dedução e validade do método são descritas por He e Luo (He e Luo, 1997). A equação de evolução do LBM incompressível é dada por:

$$p_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = p_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau^*} (p_\alpha(\mathbf{x}, t) - p_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.45)$$

sendo que a função distribuição de pressão foi definida como:

$$p_\alpha \equiv c_s^2 f_\alpha \quad (2.46)$$

e a função distribuição de pressão no equilíbrio é:

$$p_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_\alpha \left\{ p + p_0 \left[3 \frac{(\mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{\mathbf{u}^2}{c^2} \right] \right\} \quad (2.47)$$

onde $p_0 = c_s^2 \rho_0$ e ρ_0 é a densidade de referência. As variáveis macroscópicas são dadas por:

$$p(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^b p_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (2.48)$$

$$p_0 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^b \mathbf{v}_\alpha p_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (2.49)$$

Através do procedimento de Chapman-Enskog, as equações deduzidas a partir do LBM incompressível são (He e Luo, 1997):

$$\frac{1}{c_s^2} \frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.51)$$

onde $P = p/\rho_0$. Deve-se observar que as equações acima são as mesmas usadas no método de “pseudo-compressibilidade” para a solução das equações de Navier-Stokes (Nourgaliev et al., 2003, He e Luo, 1997).

Duas condições devem ser satisfeitas para um fluido ser considerado incompressível (Landau e Lifshitz, 1959, He e Luo, 1997). A primeira é que a velocidade de fluxo deve ser pequena em relação à velocidade do som no fluido, ou seja o número de Mach deve ser baixo:

$$Ma \ll 1 \quad (2.52)$$

Na prática, usualmente, a condição $Ma < 0.15$ é mantida no LBM. Esta condição é suficiente somente para o regime permanente. Para o fluxo transiente outra condição deve ser satisfeita. Considerando T e L como o tempo e o comprimento característicos do problema, o tempo L/c_s que um sinal sonoro leva para percorrer a distância L deve ser pequeno comparada com o tempo T que o fluxo varia consideravelmente, de forma que a propagação de interações (por ondas de pressão ou flutuações de densidade) no fluido possa ser considerada instantânea. Esta condição pode ser expressa como:

$$T \gg \frac{L}{c_s} \quad (2.53)$$

Logo, para satisfazer esta condição a variação temporal da pressão não deve ser muito rápida. No LBM incompressível a variação de pressão (ou variação de densidade) no espaço fica limitada pela condição de número de Mach pequenos somente, e não mais pela condição $\Delta\rho/\rho \ll 1$ que precisa ser satisfeita no LBM convencional.

2.3.4

Fluxo Bifásico

Existem algumas formulações para o LBM multifásico, entre elas as mais utilizadas em meios porosos são a proposta por Gunstensen e Rothman (Gunstensen e Rothman, 1991) e a proposta por Shan e Chen (Shan e Chen, 1993). O primeiro método é baseado no modelo de lattice gas de Rothman e Keller (Rothman e Keller, 1988) e será identificado neste trabalho como RKLBM. No RKLBM são atribuídas cores às funções de distribuição para distinguir entre as diferentes fases e é incluída uma perturbação na função de distribuição que cria a tensão interfacial, separando as duas fases. No método proposto por Shan e Chen (SCLBM) é introduzida uma força de interação não-local entre as diferentes fases de nós vizinhos. No SCLBM, apesar da quantidade de movimento se conservar globalmente, não há conservação de quantidade de movimento local em cada nó da rede por causa da inclusão destas forças de interação. Neste trabalho será utilizado o RKLBM como descrito por Rothman e Zaleski (Rothman e Zaleski, 2004) com as modificações sugeridas por Latva-Kokko e Rothman (Latva-Kokko e Rothman, 2005).

No RKLBM em cada nó da rede é possível existir dois tipos de partículas de fluido: as vermelhas e as azuis. Assim define-se $r_\alpha(\mathbf{x}, t)$ como função distribuição de partículas vermelhas e $b_\alpha(\mathbf{x}, t)$ como função distribuição de partículas azuis, de forma que $f_\alpha(\mathbf{x}, t) = r_\alpha(\mathbf{x}, t) + b_\alpha(\mathbf{x}, t)$. A idéia principal do método é separar a evolução da função distribuição em quatro etapas:

(i) Colisão

Semelhante ao fluxo monofásico a etapa de colisão é dada por:

$$f'_\alpha(\mathbf{x}, t) = f_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau^*} (f_\alpha(\mathbf{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.54)$$

(ii) Criação da tensão interfacial

A etapa de criação da tensão interfacial é baseada na definição mecânica da tensão interfacial (Rowlinson e Widom, 1982):

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} [p_N - p_T(z)] dz \quad (2.55)$$

sendo p_N a componente da pressão normal à interface e p_T a componente tangencial próxima à interface, que inclui a tensão interfacial o que a torna

diferente da componente normal (fig. (2.7)).

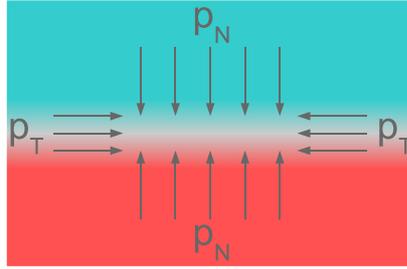


Figura 2.7: Componentes da pressão nas proximidades da interface.

Inicialmente é calculado o gradiente de cor local (fig. (2.8)), que é um vetor normal à interface entre as duas fases:

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^b \frac{\mathbf{v}_i}{c} \sum_{j=1}^b [r_j(\mathbf{x} + \mathbf{v}_i \Delta t, t) - b_j(\mathbf{x} + \mathbf{v}_i \Delta t, t)] \quad (2.56)$$

Conhecido o gradiente de cor local, modifica-se as distribuições no nó com a seguinte equação (fig. (2.8)):

$$f''_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = f'_{\alpha}(\mathbf{x}, t) + 36w_{\alpha}A|\mathbf{g}| \left[\frac{(\mathbf{v}_{\alpha} \cdot \mathbf{g})^2}{c^2|\mathbf{g}|^2} - \frac{1}{2} \right] \quad (2.57)$$

A equação acima é válida para a rede D3Q19 e A é o parâmetro que regula a magnitude da tensão interfacial. Este termo de perturbação é escolhido de forma que se remova massa da população que se move paralelamente à interface e adicione massa à população que se move na direção normal à interface (de forma que a massa e a quantidade de movimento no nó se conserve), criando desta forma a tensão interfacial. A partir da definição mecânica da tensão interfacial (eq. (2.55)) e do tipo de rede utilizada, determina-se o parâmetro A que regula a tensão interfacial (Rothman e Zaleski, 2004). Para a rede D3Q19 o parâmetro A é dado por:

$$A = \gamma \frac{\Delta t^3}{172\rho\tau^* \Delta x^3} \quad (2.58)$$

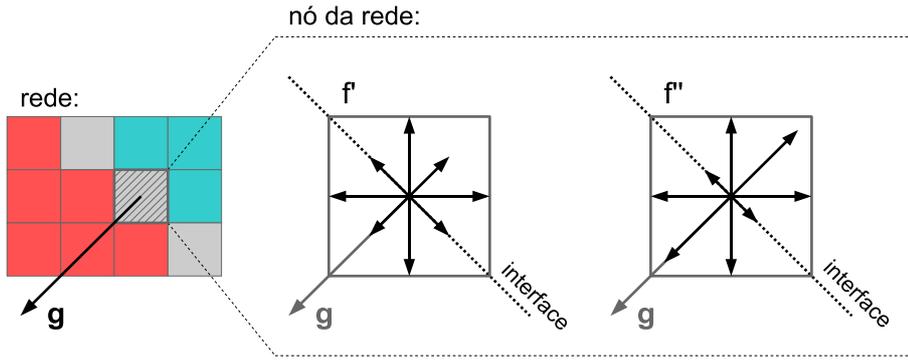


Figura 2.8: Etapa de criação da tensão interfacial no RKLBM. As cores azul e vermelha representam as duas fases e o cinza uma combinação das duas.

(iii) Redistribuição das cores

Para minimizar a difusão de uma cor na outra, as cores são redistribuídas para que ocorra a separação das fases. Nesta etapa adotou-se o método proposto por Latva-Kokko e Rothman (Latva-Kokko e Rothman, 2005):

$$r''_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho_r(\mathbf{x}, t)}{\rho_r(\mathbf{x}, t) + \rho_b(\mathbf{x}, t)} f''_{\alpha}(\mathbf{x}, t) + \Delta_{\alpha} \quad (2.59)$$

$$b''_{\alpha}(\mathbf{x}, t) = \frac{\rho_b(\mathbf{x}, t)}{\rho_r(\mathbf{x}, t) + \rho_b(\mathbf{x}, t)} f''_{\alpha}(\mathbf{x}, t) - \Delta_{\alpha} \quad (2.60)$$

onde $\rho_r(\mathbf{x}, t)$, $\rho_b(\mathbf{x}, t)$ e Δ_{α} são definidos por:

$$\rho_r(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^b r_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (2.61)$$

$$\rho_b(\mathbf{x}, t) = \sum_{\alpha=1}^b b_{\alpha}(\mathbf{x}, t) \quad (2.62)$$

$$\Delta_{\alpha} = \beta \frac{\rho_r(\mathbf{x}, t)\rho_b(\mathbf{x}, t)}{(\rho_r(\mathbf{x}, t) + \rho_b(\mathbf{x}, t))^2} f0_{\alpha}^{eq} \cos\varphi_{\alpha} \quad (2.63)$$

sendo β o parâmetro que fornece a tendência das duas fases se separarem, φ_{α} é o ângulo entre o gradiente de cor \mathbf{g} e a direção da velocidade \mathbf{v}_{α} , e $f0_{\alpha}^{eq}$ é dada pela eq. (2.33) considerando a velocidade de fluxo \mathbf{u} nula. Estas equações fazem com que, no nó, as partículas vermelhas se agrupem na direção dos nós vizinhos cuja concentração de partículas vermelhas seja maior, e o mesmo ocorra com as partículas azuis, conservando as massas totais de cada cor no

nó e a massa total em cada direção (fig. (2.9)).

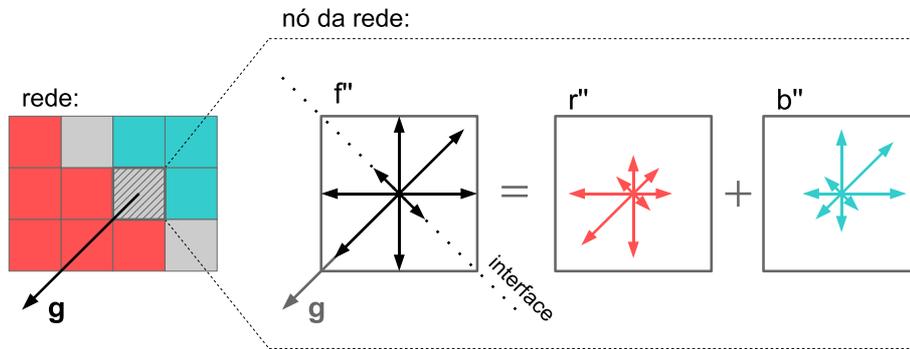


Figura 2.9: Etapa de redistribuição das cores no RKLBM.

(iiii) Propagação

E finalmente, é feita a etapa de propagação das funções de distribuição para os nós vizinhos:

$$r_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = r''_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (2.64)$$

$$b_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = b''_\alpha(\mathbf{x}, t) \quad (2.65)$$

Molhabilidade

A molhabilidade do fluido no sólido é controlada por um único parâmetro p que mede a fração de partículas vermelhas nos nós sólidos. No início da simulação é atribuída uma cor (ou seja valores de ρ_r e ρ_b que são mantidos constantes durante a simulação) nos sólidos com o objetivo de se calcular o gradiente de cor local nos nós vizinhos aos sólidos. Se o fluido vermelho é completamente molhante $p = 1$, se é parcialmente molhante $1 > p > 0$, e se os dois fluidos têm a mesma molhabilidade $p = 0$ (fig. (2.10)). Latva-Kokko e Rothman (Latva-Kokko e Rothman, 2005) demonstram que $p = \cos\theta$, sendo θ o ângulo de contato.

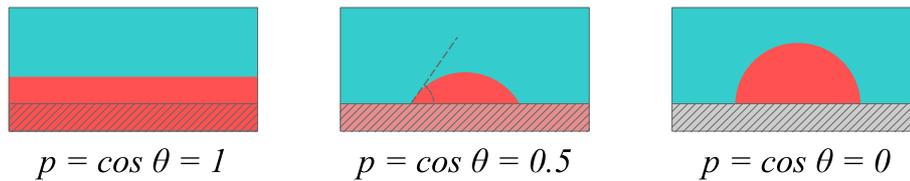


Figura 2.10: Molhabilidade dos sólidos no RKLBM.

2.4

Acoplamento Fluidomecânico

O acoplamento do fluxo calculado pelo LBM com o movimento de partículas sólidas foi proposto inicialmente por Ladd (Ladd, 1994) com o objetivo de estudar partículas em suspensão. No trabalho desenvolvido por Ladd o contato entre partículas não é modelado, assim como no trabalho de Aidun e Lu (Aidun e Lu, 1995) que sugeriram uma abordagem alternativa ao método de Ladd. Cook e Noble (Cook e Noble, 2004) implementaram um sistema bidimensional acoplando o DEM ao LBM utilizando, para tratar o acoplamento fluidomecânico, o esquema de fronteiras móveis imersas (“immersed moving boundary scheme”) proposto por Noble e Torczynsky (Noble e Torczynsky, 1998). O acoplamento do fluxo de fluido com o movimento das partículas sólidas envolve duas etapas, no que se refere ao fluxo:

1. Definição da condição de contorno imposta ao fluido pelas partículas sólidas em movimento;
2. Cálculo da força de arraste de fluxo nas partículas sólidas.

Em relação ao movimento das partículas, o efeito do fluxo é incorporado através da força e torque aplicados nas partículas que aparecem nas equações de movimento (eqs. (2.1) e (2.2)), respectivamente.

Para simular as interações hidrodinâmicas entre as partículas sólidas e o fluxo de fluido a equação de lattice-Boltzmann deve ser modificada para incorporar a condição de contorno do sólido em movimento. A condição de contorno na superfície sólida é a condição de não-escorregamento (“no-slip”), ou seja, o sólido é impermeável e o fluido adjacente à superfície sólida se move na mesma velocidade do sólido. Neste trabalho será usado o esquema proposto por Noble e Torczynsky (Noble e Torczynsky, 1998), que modifica a equação de lattice-Boltzmann para forçar a condição de não-escorregamento nos nós da rede cobertos pelas partículas, juntamente com o LBM incompressível. A equação de lattice-Boltzmann incompressível (eq. (2.45)) se torna:

$$p_\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{v}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = p_\alpha(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau^*} (1 - B) (p_\alpha(\mathbf{x}, t) - p_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t)) + B \Omega_\alpha^s \quad (2.66)$$

sendo B uma função-peso dada por:

$$B(\mathbf{x}, t) = \frac{\varepsilon(\mathbf{x}, t)(\tau^* - 0.5)}{1 - \varepsilon(\mathbf{x}, t) + (\tau^* - 0.5)} \quad (2.67)$$

onde ε é a fração de sólido, definida pela fração do volume da célula ocupada pela partícula sólida (fig. (2.11)). Observa-se que para as células onde não há sólidos ($B = 0$) a eq. (2.66) repõe a eq. (2.45).

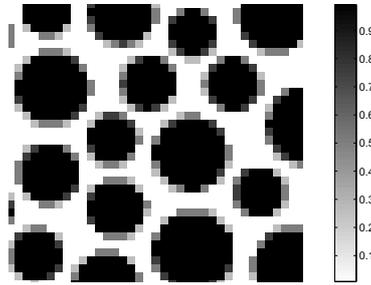


Figura 2.11: Exemplo de campo de fração de sólidos

Na eq. (2.66), Ω_α^s é o termo adicional de colisão que modifica as funções de distribuição de pressão para tratar dos obstáculos sólidos. Este termo adicional é baseado no conceito de “bounce-back” da parte de não-equilíbrio da função de distribuição e é dado por (Noble e Torczynsky, 1998):

$$\Omega_\alpha^s(\mathbf{x}, t) = p_{-\alpha}(\mathbf{x}, t) - p_\alpha(\mathbf{x}, t) + p_{-\alpha}^{eq}(p, \mathbf{v}_p) - p_{-\alpha}^{eq}(\mathbf{x}, t) \quad (2.68)$$

onde \mathbf{v}_p é a velocidade da partícula na posição x , no tempo t , e $-\alpha$ representa a direção contrária à direção α .

A força que é transferida para um sólido pode ser calculada a partir da variação da quantidade de movimento que ocorre por causa da colisão das partículas do fluido com o sólido, sendo dada então por:

$$\Delta \mathbf{q} = \frac{\Delta x^3}{c_s^2} \sum_{\alpha=1}^b (B \Omega_\alpha^s) \mathbf{v}_\alpha \quad (2.69)$$

Logo, a força de fluxo exercida numa partícula é dada por:

$$\mathbf{F}_f = - \sum_{n=1}^{np} \frac{\Delta \mathbf{q}_n}{\Delta t} = - \frac{\Delta x^3}{c_s^2 \Delta t} \sum_{n=1}^{np} B_n \sum_{\alpha=1}^b \Omega_{\alpha}^s \mathbf{v}_{\alpha} \quad (2.70)$$

sendo np o número de nós cobertos pela partícula. O torque em relação ao centro de massa da partícula, \mathbf{x}_p , é dado por:

$$\mathbf{T}_f = - \frac{\Delta x^3}{c_s^2 \Delta t} \sum_{n=1}^{np} \left[B_n \sum_{\alpha=1}^b \Omega_{\alpha}^s \mathbf{v}_{\alpha} \times (\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_p) \right] \quad (2.71)$$