



Mariana Luisa de Lima Torquato

Escoamento de emulsões através de capilares com garganta utilizando o método de Lattice-Boltzmann

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Coorientador: Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Júnior

Rio de Janeiro
Setembro de 2015



Mariana Luisa de Lima Torquato

Escoamento de emulsões através de capilares com garganta utilizando o método de Lattice-Boltzmann

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da PUC-Rio como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Márcio da Silveira Carvalho

Orientador

Departamento de Engenharia Mecânica - PUC-Rio

Prof. Eurípedes do Amaral Vargas Júnior

Coorientador

Departamento de Engenharia Civil - PUC-Rio

Profa. Raquel Quadros Velloso

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Prof. Rodrigo Surmas

Centro de Pesquisa e Desenvolvimento

Américo Miguêz de Mello

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico - PUC-Rio

Rio de Janeiro, 25 de Setembro de 2015

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Mariana Luisa de Lima Torquato

Graduada em Engenharia Mecatrônica pela Escola Politécnica da Universidade de São Paulo e pela École Nationale Supérieure de Techniques Avancées – ENSTA-ParisTech (Paris, França) em 2009. Especializada em Engenharia de Petróleo e Gás Natural pela Universidade Petrobras (Salvador, Brasil) em 2010.

Ficha Catalográfica

Torquato, Mariana Luisa de Lima

Escoamento de emulsões através de capilares com garganta utilizando o método de Lattice-Boltzmann / Mariana Luisa de Lima Torquato ; orientador: Márcio da Silveira Carvalho ; co-orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Júnior. – 2015.

133 f. : il. (color.) ; 30 cm

Dissertação (mestrado)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2015.

Inclui bibliografia

1. Engenharia mecânica – Teses. 2. Emulsões. 3. Método de Lattice-Boltzmann. 4. Escoamento em meios porosos. I. Carvalho, Márcio da Silveira. II. Vargas Júnior, Eurípedes do Amaral. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, que sempre estimularam ao máximo o meu desenvolvimento e me apoiaram em todos os momentos de dificuldade. Agradeço aos meus avós, que sempre me doaram seu amor incondicional.

Agradeço ao meu querido irmão Tiago que me auxiliou com sua calma, organização e objetividade, em tantas etapas deste trabalho e, principalmente, me fez acreditar que seria possível concluí-lo.

Agradeço à Raquel pela orientação devotada, pela gentileza na cessão do programa base, pelas tantas horas de dedicação que foram essenciais para elucidar os pequenos e os grandes problemas.

Agradeço ao Márcio pela orientação precisa e pela calma na condução das adversidades que apareceram. Agradeço ao Vargas pela coorientação e incentivo para a conclusão do trabalho.

Agradeço à PUC-Rio pela concessão da bolsa de isenção, que possibilitou a realização deste mestrado.

Resumo

Torquato, Mariana Luisa de Lima; Carvalho, Márcio da Silveira. **Escoamento de emulsões através de capilares com garganta utilizando o método de Lattice-Boltzmann**. Rio de Janeiro, 2015. 133p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A injeção de emulsão em meio poroso como método de recuperação avançada pode se tornar realidade na operação de campos de petróleo devido à maior rigidez no descarte de água produzida e aos potenciais ganhos na produção de óleo. Para entender o comportamento macroscópico desta técnica de EOR, é necessário compreender o fenômeno microscópico. Com este objetivo, fez-se a modelagem numérica do escoamento de uma gota imersa em fase contínua escoando em capilar restrito utilizando o método de Lattice-Boltzmann. Este método foi escolhido devido à sua facilidade de ser aplicado em geometrias complexas de rocha e fluido e ao bom compromisso na representação dos fenômenos de microescala. Para entender a influência de cada parâmetro, foram realizadas diversas simulações em domínio tridimensional, alterando a velocidade do fluxo, a razão de viscosidades dos fluidos, a relação entre os diâmetros da gota e do tubo e a magnitude da tensão interfacial. Observou-se que a passagem da gota pela restrição causa uma redução na mobilidade do escoamento, representada por um aumento na perda de carga, pela conjunção dos efeitos viscosos e capilares. Obteve-se correlação negativa do fator redutor de mobilidade f com a razão de viscosidade e com o tamanho da gota, assim como fora determinado numericamente por Roca-Reyes (2011) com o método *level-set*. Foi notada uma pequena sensibilidade de f ao número de capilaridade, assim como estabelecido experimentalmente por Robles-Castillo (2011). Verificou-se a importância de se determinar o conjunto adequado de parâmetros do sistema para ter sucesso na implantação de injeção de emulsões.

Palavras-chave

Emulsões; Método de Lattice-Boltzmann; Escoamento bifásico; Escoamento em meios porosos.

Abstract

Torquato, Mariana Luisa de Lima; Carvalho, Márcio da Silveira (Advisor). **Emulsion flow through constricted capillary using Lattice-Boltzmann method**. Rio de Janeiro, 2015. 133p. Msc. Dissertation - Departamento de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Emulsion injection in porous medium as an Enhanced Oil Recovery method can turn out to be reality in the operation of onshore and offshore fields, due to increasing rigidity in the disposal of produced water and also due to the potential additional oil production. In order to understand macroscopic behavior of this EOR method, it is necessary to understand the microscopic phenomenon. With this objective, it was performed the numerical modeling of the flow of a droplet immerse in continuous phase through a constricted capillary using the Lattice-Boltzmann method. This method was chosen due to its simplicity on being applied to complex rock geometries and multiphase flow and due to its good commitment in representing microscopic phenomena. Focusing on understanding the influence of each parameter on flow behavior, several simulation studies were performed altering flow velocity, viscosity ratio, ratio between droplet's and pipe's diameter and interfacial tension. A reduction in mobility is observed as the droplet passes through the restriction caused by the conjunction of viscous and capillary effects. A negative correlation of mobility reduction factor f in relation to the viscosity ratio and to droplet size was noticed, as it had been observed before by Roca-Reyes (2011) in a numerical implementation of level-set method. Weak correlation between f and capillary number was determined, as in previous experimental essay performed by Robles-Castillo (2011). In this study, it was verified the importance of determining the appropriate set of system parameters, in order to achieve success in the implementation of emulsion injection.

Keywords

Emulsion; Lattice-Boltzmann method; Multiphase flow; Flow through porous media.

Sumário

1	Introdução	9
1.1.	Justificativa	11
1.2.	Objetivos do Trabalho	12
1.3.	Divisão da Dissertação	12
2	Revisão da Literatura	14
2.1.	Mecânica dos Fluidos	14
2.2.	Métodos de Lattice-Boltzmann (LBM)	18
2.3.	Emulsões	25
3	Método	28
4	Resultados	35
4.1.	Simulações de domínios bidimensionais	36
4.1.1.	Escoamento monofásico	36
4.1.2.	Escoamento bifásico	44
4.1.2.1.	Sensibilidade à viscosidade	48
4.1.2.2.	Adequação do Número de Reynolds pela alteração da velocidade	50
4.1.2.3.	Adequação do Número de Capilaridade pela alteração da tensão interfacial e Sensibilidade à Tensão Interfacial	54
4.1.2.4.	Sensibilidade ao parâmetro β	59
4.1.3.	Otimização do algoritmo em MATLAB	61
4.2.	Simulações de domínios tridimensionais	63
4.2.2.	Escoamento monofásico	63
4.2.2.1.	Capilar reto	64
4.2.2.2.	Discretização da malha	68

4.2.2.3. Capilares restritos	70
4.2.2.4. Alternativas testadas para a imposição de maiores viscosidades	74
4.2.3. Escoamento bifásico	76
4.2.3.1. Adoção de números adimensionais	76
4.2.3.2. Número de Capilaridade Infinito	78
4.2.3.3. Número de Capilaridade Finito	85
5 Conclusões e Sugestões	102
5.1. Sugestões para trabalhos futuros	109
6 Referências bibliográficas	110
Apêndice A: Apresentação da rede D3Q19 utilizada neste trabalho	113
Apêndice B: Derivação das condições de contorno para rede D3Q19	114
Apêndice C: Memória de cálculo da conversão de unidades e obtenção de números adimensionais utilizados nas simulações bidimensionais	121
Apêndice D: Métricas de regime permanente de pressão e quantidade de movimento	123
Apêndice E: Extrapolações logarítmica e polinomial do fator f em função de Ca construídas a partir de resultados de Roca-Reyes (2011)	124
Apêndice F: Cálculo da Tensão Interfacial σ da simulação com $Ca = 0,0162$, $\beta = 0,7$ e Caso 5 ($RGEO = 0,7$)	126
Anexo A: Lei de Poiseuille aplicada a escoamento entre placas planas e escoamento em tubo	131
Anexo B: Definição de números adimensionais utilizados neste estudo	133

1

Introdução

O desempenho da produção de um reservatório de petróleo depende da eficiência da conversão da energia interna da jazida em movimentação do fluido de interesse - óleo - aos poços produtores. A energia interna inicial do reservatório é convertida em produção na recuperação primária, a qual se dá sem a suplementação externa de energia, ocasionada pela atuação dos mecanismos primários presentes no reservatório:

- Compressibilidade isotérmica de rocha e fluido;
- Gás em solução liberado pela depleção;
- Atuação de capa de gás;
- Atuação de aquífero; e
- Drenagem gravitacional.

Como o fator de recuperação provido pela recuperação primária é geralmente baixo, assim como para antecipar a produção de óleo, aplicam-se métodos de recuperação secundária e terciária, após um período inicial de

produção primária.

Na recuperação secundária, são utilizados métodos de injeção de água e gás, visando aumentar a recuperação pela manutenção da pressão e/ou pelo deslocamento forçado do fluido do reservatório pela frente de fluido injetado. Segundo Baker et al. (2015), mais de 60% da produção do óleo mundial é originária de reservatórios sob injeção de água.

Após a recuperação secundária, subsiste um percentual elevado de óleo na jazida ocasionado pelo aprisionamento microscópico por efeito capilar do óleo nos poros ou pela baixa eficiência volumétrica de varrido. Segundo Donaldson et al. (1985), entre 15 e 40% do espaço poroso tipicamente continua preenchido por óleo residual em uma região do reservatório bem varrida pelos fluidos imiscíveis injetados.

Os métodos de recuperação terciária, usualmente referenciados como *Enhanced Oil Recovery* (EOR), têm por objetivo produzir o óleo remanescente das recuperações primária e secundária. Nesta etapa, são injetados fluidos especiais como gases miscíveis ou produtos químicos e/ou é realizado um suprimento de energia térmica pela combustão in-situ ou injeção de vapor. A injeção de emulsões se insere na classe de métodos químicos de recuperação terciária (Rosa et al., 2006).

Os problemas de recuperação melhorada são profundamente relacionados com a geometria do espaço poroso. No nível microscópico, com grande variedade de tamanhos e formatos de poros e diversos grau de conectividade provido pelas gargantas de poros, as forças inerciais são negligenciáveis face às forças viscosas e interfaciais, devido às baixas magnitudes de velocidade de fluxo e, consequentemente, ao baixo número de Reynolds – raramente superior à unidade, segundo Donaldson et al. (1985). A partir de uma relação crítica entre forças viscosas e forças capilares, o óleo preso é mobilizado, podendo também ocasionar efeitos adicionais de coalescência e quebra de gotas.

Além do uso de emulsões para recuperação melhorada, a reinjeção de água produzida, que é uma emulsão diluída de óleo em água, é uma tendência atual de

todas as operadoras devido à crescente pressão das agências ambientais, ao forte apelo ambiental e ao aspecto econômico (Farias, 2013).

1.1.

Justificativa

Devido ao potencial de se utilizar emulsões como método de recuperação melhorada e à tendência de reinjeção de água produzida, assim como se conhecendo a dependência do comportamento macroscópico do escoamento aos mecanismos atuantes na microescala do sistema poroso, decidiu-se estudar o escoamento de uma gota imiscível imersa em fluido contínuo em capilar restrito.

A geometria do capilar emula a restrição ao fluxo imposta pela garganta de poros entre dois poros vizinhos. O escoamento de uma gota imiscível em fase livre mimetiza a condição de fluxo do escoamento de uma emulsão, representada neste estudo por uma gota única. Desta forma, com este estudo numérico, pretende-se estudar o escoamento de emulsões através de uma garganta de poro e avaliar como os parâmetros do escoamento influenciam na resistência ao fluxo da fase aquosa. O comportamento macroscópico no meio poroso está diretamente relacionado com o escoamento na escala de poro.

O método de Lattice-Boltzmann foi escolhido para se realizar este estudo pela facilidade de se aplicar o mesmo em geometrias complexas de parede, como a do sistema poroso, e de fluido, como a de simulação de fluidos imiscíveis com interface. Este método não necessita de nenhum método adicional de rastreamento de interface e não apresenta problemas de conservação de massa se aplicado respeitando os limites de baixas velocidades, sendo, portanto, bastante adequado para os objetivos deste estudo.

1.2.

Objetivos do Trabalho

O objetivo principal deste trabalho é realizar um estudo numérico do escoamento bifásico de uma gota imersa em fluido contínuo escoando por um capilar restrito, utilizando o método de Lattice-Boltzmann.

Os objetivos secundários foram:

- Avaliar o potencial do método de Lattice-Boltzmann na solução de problemas transientes com superfícies livres onde as forças capilares são importantes; e
- Avaliar a influência da geometria do capilar, da razão de viscosidade dos fluidos, do tamanho da gota, do número de capilaridade e do número de Reynolds no diferencial de pressão.

1.3.

Divisão da Dissertação

O trabalho está dividido em cinco capítulos. O primeiro capítulo apresenta a introdução, no qual o trabalho é recortado do universo, bem como são fornecidos a justificativa e os objetivos da realização deste estudo.

O segundo capítulo traz a revisão da literatura, no qual se discorre inicialmente sobre o equacionamento clássico de mecânica dos fluidos, na qual se insere a equação de Navier-Stokes. Em seguida, explana-se sobre o método de Lattice-Boltzmann e a modelagem matemática utilizada na resolução do problema tratado neste trabalho. Expõe-se, por fim, o estado da arte do escoamento de

emulsões em meio poroso, obtida por estudos numéricos e experimentais.

O terceiro capítulo provê a explicação do método utilizado para resolução do problema, juntamente com a exposição das entradas e saídas da simulação e dos *softwares* e das linguagens de programação que foram utilizados.

No quarto capítulo são apresentados os resultados numéricos obtidos neste estudo.

O quinto capítulo fornece as conclusões do estudo e a sugestão de trabalhos futuros.

2

Revisão da Literatura

2.1.

Mecânica dos Fluidos

A Mecânica dos Fluidos é o ramo da Mecânica dos Meios Contínuos que estuda o comportamento dos fluidos em repouso ou em movimento (Fox et al., 2003). Em desenvolvimento desde a Antiguidade, teve como um de seus precursores Arquimedes (285-212 A.C.), que formulou as leis do empuxo aplicadas ao estudo de corpos flutuantes e submersos (White, 2009).

Fluidos são substâncias que se deformam continuamente sob a aplicação de tensão cisalhante. O estado de um fluido em movimento é completamente determinado pelas três componentes da velocidade \bar{u} , a pressão p e a massa específica ρ (Landau & Lifschitz, 1987).

Em um sistema de referência inercial, além das condições de contorno associadas e de uma relação de estado termodinâmica como $\rho = \rho(p, T)$, sendo T a temperatura, qualquer fluxo deve respeitar as três principais leis da Mecânica, que são a Conservação de Massa ou Equação da Continuidade, a Conservação da Quantidade de Movimento Linear ou Segunda Lei de Newton e a Conservação de

Energia ou Primeira Lei da Termodinâmica (White, 2009).

Este trabalho considera o escoamento como isotérmico. Desta forma, a equação de energia não é discutida no trabalho. As equações de conservação de massa e de quantidade de movimento linear são apresentadas nas eqs. (1) e (2).

$$\iiint \frac{d}{dt} \rho dV + \iint \rho (\bar{u} \cdot \vec{n}) dS = 0 \quad (1)$$

$$\sum F = \frac{d}{dt} \left(\iiint \rho \bar{u} dV \right) + \iint \rho \bar{u} (\bar{u} \cdot \vec{n}) dS \quad (2)$$

Sendo $\bar{\bar{T}}$ o tensor de tensões e \mathbf{g} a aceleração da gravidade, as equações de conservação de massa e de quantidade de movimento linear podem ser escritas na forma diferencial (Pritchard & Leylegian, 2011; Roca-Reyes, 2011), conforme exposto na eq. (3).

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \\ \rho \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \rho \bar{u} \cdot \bar{\nabla} \bar{u} = \rho \mathbf{g} + \bar{\nabla} \cdot \bar{\bar{T}} \end{cases} \quad (3)$$

Em um fluido Newtoniano, o tensor das tensões é linearmente proporcional ao tensor da taxa de deformação. Desta forma, as tensões normais σ_{ii} e de cisalhamento τ_{ij} ficam definidas conforme exposto na eq. (4), sendo μ a viscosidade dinâmica do fluido.

$$\begin{cases} \tau_{ij} = \tau_{ji} = \mu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \\ \sigma_{ii} = -p - \frac{2}{3} \mu \bar{\nabla} \cdot \bar{u} + 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \end{cases} \quad (4)$$

Inserindo estas definições na equação diferencial de conservação da quantidade de movimento linear, obtém-se a equação de Navier-Stokes, apresentada em sua forma vetorial na eq. (5), a qual é amplamente utilizada na descrição de escoamentos de fluidos.

$$\rho \left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + (\bar{u} \cdot \bar{\nabla}) \bar{u} \right] = \rho \mathbf{g} - \bar{\nabla} \cdot p + \mu \nabla^2 \bar{u} + \frac{1}{3} \mu \bar{\nabla} (\bar{\nabla} \cdot \bar{u}) \quad (5)$$

Sendo σ a tensão interfacial, \bar{n} o vetor unitário normal à interface e $\frac{d\bar{\epsilon}}{ds}$ a curvatura da interface, o balanço de forças na interface entre os fluidos fornece uma das condições de contorno na interface entre dois fluidos (Roca-Reyes, 2011), conforme apresentado na eq. (6). A outra condição de contorno é dada pela continuidade da velocidade.

$$\bar{n} \cdot (\bar{T}_w - \bar{T}_o) = \sigma \frac{d\bar{\epsilon}}{ds} \quad (6)$$

A equação de Navier-Stokes (eq. (5)), a equação da continuidade (eq. (1)) e a relação de estado termodinâmica provêm um conjunto de cinco equações não lineares acopladas. Juntamente com as condições iniciais e de contorno, estas equações podem idealmente ser resolvidas ao se determinar \bar{u} , p e ρ para cada coordenada (x, y, z, t) , definindo completamente o estado de um fluido em movimento, conforme afirmado por Landau & Lifschitz (1987).

Uma vez que este conjunto de equações não lineares apresenta solução analítica somente para poucos casos simples, vários métodos computacionais de dinâmica de fluidos (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) foram desenvolvidos nos últimos trinta anos, permitindo a aplicação destas equações até mesmo industrialmente em problemas reais mais complexos, em áreas tão diversas quanto biomecânica, energia e esporte (Pritchard & Leylegian, 2011).

Um dos métodos de CFD desenvolvidos é a família de métodos conhecidos como Métodos de Lattice-Boltzmann (LBM).

Os métodos de CFD mais disseminados são o método de resíduos ponderados, aplicado ao método de elementos finitos (FEM) e ao método de volumes finitos (FVM), e o método de diferenças finitas (FDM).

Nos métodos de resíduos ponderados, o domínio é discretizado em elementos ou volumes e as equações diferenciais não lineares são convertidas em equações algébricas, as quais são resolvidas iterativamente até a convergência. As variáveis contínuas - velocidade, pressão e temperatura - são aproximadas por valores discretos.

Dentre os casos que apresentam solução analítica, destacam-se o escoamento desenvolvido incompressível em regime permanente entre placas planas (geometria 2D) e em tubo (geometria 3D), conhecido na literatura como Fluxo de Poiseuille ou Fluxo de Hagen-Poiseuille ou Lei de Poiseuille. G. Hagen (1839) e J. L. M. Poiseuille (1840) estabeleceram quase que concomitantemente a relação empírica entre a vazão Q , a queda de pressão no escoamento Δp e o raio do tubo R (Landau & Lifshitz, 1987).

Para a configuração entre placas planas fixas, considerando a gravidade negligenciável e impondo um gradiente de pressão na direção x , obtém-se, a partir da equação da continuidade, que as componentes u_y e u_z são nulas e $u_x = u(y)$ somente. A partir da equação de quantidade de movimento, obtém-se que $\frac{\partial p}{\partial y} = \frac{\partial p}{\partial z} = 0$. Desta forma, $p = p(x)$ somente.

Aplicando a condição de não deslizamento a cada parede na equação de quantidade de movimento linear em x , a solução é obtida conforme apresentada na eq. (7). Cada parede é posicionada em $y = \pm R$, sendo $2R$ a espessura entre as placas.

$$u_x = -\frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} h^2 \left(1 - \frac{y^2}{h^2}\right) = u_{max} \left(1 - \frac{y^2}{h^2}\right) \quad (7)$$

A queda de pressão neste fluxo é dada pela eq. (8).

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} = \mu \frac{\partial^2 u_x(y)}{\partial y^2} = -\mu u_{max} \left(\frac{2}{h^2} \right) \leftrightarrow \Delta p = -\frac{2\mu L u_{max}}{h^2} \quad (8)$$

2.2.

Métodos de Lattice-Boltzmann (LBM)

O método de Lattice-Boltzmann (LBM) surgiu em 1988, proposto por McNamara e Zanetti, como uma evolução do método de *Lattice-gas Cellular Automata* (Mohamad, 2011; Velloso, 2010).

Desde então, apresentou grande desenvolvimento devido à sua habilidade em resolver problemas complexos de dinâmica de fluidos, como o fluxo por geometrias complexas e o fluxo multifásico com fronteiras móveis, no qual não é necessário o uso de algum método adicional de rastreamento da interface (*interface tracking*). Com métodos tradicionais de CFD, faz-se necessário o uso de um método especial para o tratamento da interface, como, por exemplo, o método de *Level-Set*, o qual foi aplicado em conjunto com o método de Elementos Finitos por Roca-Reyes (2011) para resolver um problema similar ao tratado neste estudo.

Outras vantagens de usar LBM são a precisão adequada para representar problemas de micro e macro escala incorporando termodinâmica, a simplicidade para paralelizar o código, devido à natureza local das etapas de colisão e propagação, e a não necessidade de resolver a equação de Laplace em cada passo de tempo, que é uma etapa integrante da solução de métodos de CFD tradicionais, bastante onerosa em tempo de processamento (Mohamad, 2011).

No LBM, o espaço é dividido em uma rede regular e as velocidades são discretizadas em um conjunto finito de velocidades possíveis quanto ao módulo e direção, conforme exposto na Figura 1. Cada velocidade possível \bar{e}_i representa as direções de ligações ou conexões com os elementos de rede vizinhos. Por ser possível também alterar o número de dimensões n , as redes são identificadas pelo símbolo $DnQi$. As redes mais populares são as redes D2Q9, D3Q15 e D3Q19.

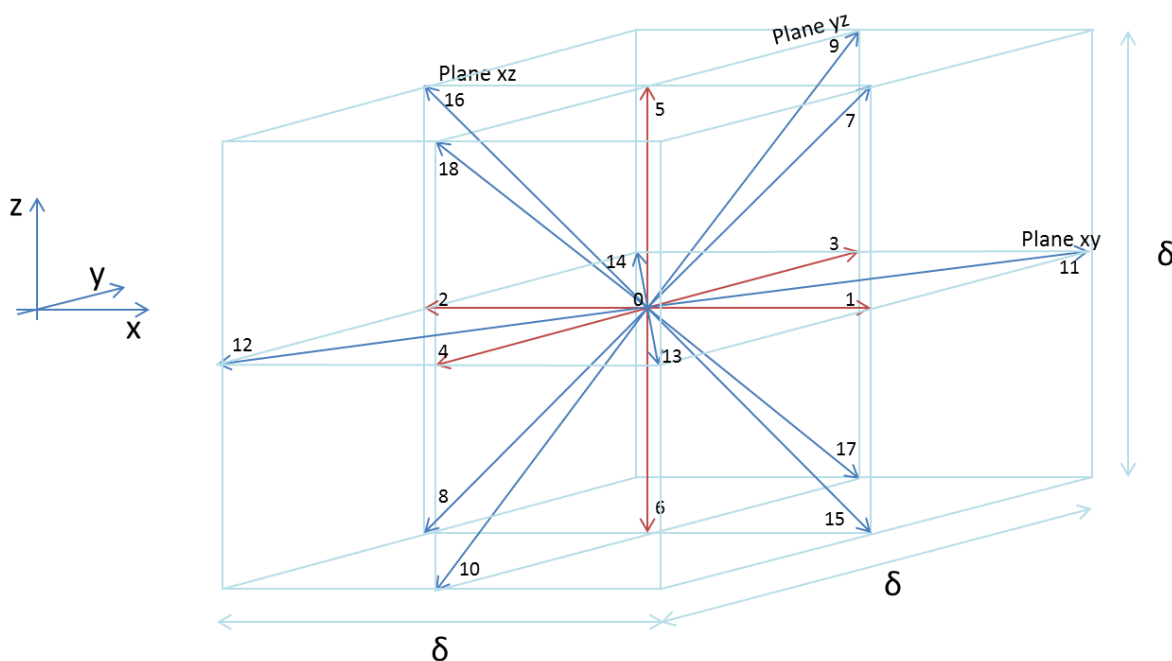


Figura 1: Diagrama de um elemento de rede utilizado neste estudo com 19 velocidades de rede \bar{e}_i .

Toda matéria é constituída por “partículas” que se movem aleatoriamente no espaço sob a ação de forças externas e forças intermoleculares, satisfazendo condições de conservação de massa, quantidade de movimento e energia.

Segundo a Mecânica Estatística, desenvolvida por Ludwig E. Boltzmann, as propriedades fenomenológicas ou macroscópicas da matéria, como a viscosidade e a condutividade térmica, podem ser previstas a partir das propriedades microscópicas dos átomos. Maxwell observou que o parâmetro mais importante para caracterizar o efeito das moléculas em uma descrição estatística do sistema é a função distribuição (Mohamad, 2011).

A função distribuição f fornece a probabilidade de encontrar partículas em determinada faixa de posição \bar{x} em certo instante de tempo t com velocidades dentro de uma determinada faixa $[c, c + dc]$.

Aplicado à rede, as partículas que residem em cada nó \bar{x} no tempo t são descritas pela função distribuição $f(\bar{x}, t)$. As partículas se movem ou se propagam nas direções possíveis i com velocidade e_i , sendo cada estado i representado por uma função distribuição de partícula f_i .

Desta forma, o fluido é modelado como um conjunto de distribuições de partículas para cada estado i e fase k , as funções distribuição $f_i^k(\bar{x}, t)$, o que representa o número esperado de partículas da fase k na posição da rede \bar{x} e no tempo t propagando com velocidade \bar{e}_i . Após a propagação, as partículas colidem no ponto central de cada elemento da rede, seguindo modelos simples que descrevem o espalhamento de partículas.

Uma vez que o fluido é modelado como uma distribuição de partículas, o LBM é considerado como um método de mesoescala, o qual provê um bom compromisso entre as abordagens “top-down”, abordagem padrão de macroescala, na qual o contínuo é descrito usando equações diferenciais parciais como a eq. (5) em um volume de controle infinitesimal, e “bottom-up” ou abordagem de microescala da dinâmica molecular, na qual cada átomo ou molécula é modelado usando as equações de movimento de Newton (Chen et al., 1994).

Vários tipos de LBM foram propostos para simular fluxos multifásicos. Aidun & Clausen (2010) enfatizaram o modelo de *color-fluid* proposto por Gustensen et al. (1991), o modelo de potencial interpartícula proposto por Shan & Chen (1993), o modelo de energia livre proposto por Swift et al. (1996) e o modelo de teoria de campo médio proposto por He e al. (1998).

Philippi et al. (2012) propuseram um modelo cinético para representar de forma realista a mistura e segregação isotérmica de misturas não ideais utilizando parâmetros de força moleculares. O modelo de *color-fluid* modificado proposto por Liu et al. (2012) é utilizado neste estudo.

A equação de Boltzmann, que é uma equação diferencial parcial não linear, é discretizada no tempo e nas direções de \bar{e}_i , assumindo a forma da eq. (9), na qual δ_t é o passo de tempo e Ω_i^k é o operador de colisão. Esta equação descreve a submissão de cada fase à colisão e à propagação para os elementos de rede vizinhos $\bar{x} + \bar{e}_i \delta_t$ no próximo passo de tempo $t + \delta_t$ (Velloso, 2010). Esta é uma equação de advecção com termo fonte $\Omega_i^k(\bar{x}, t)$, o qual é também uma função de f , sendo, portanto, uma equação de difícil solução.

$$f_i^k(\bar{x} + \bar{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^k(\bar{x}, t) + \Omega_i^k(\bar{x}, t) \quad (9)$$

O operador de colisão representa a taxa de mudança da distribuição de partículas no intervalo de tempo δ_t . Tolke et al. (2002) descrevem este operador como uma combinação de três suboperadores, como exposto na eq. (10).

$$\Omega_i^k(x, t) = \Omega_i^{k(3)} \left[\Omega_i^{k(1)} + \Omega_i^{k(2)} \right] \quad (10)$$

Introduzido em 1954, o operador de colisão de Bhatnagar-Gross-Krook (BGK), $\Omega_i^{k(1)}$, é o modelo simplificado que assume que as partículas colididas são relaxadas do seu estado inicial em direção à distribuição de equilíbrio local, $f_i^{k,eq}$, em uma taxa constante $1/\tau_k$, na qual τ_k é o tempo de relaxação da fase k , conforme apresentado na eq. (11).

$$\Omega_i^{k(1)} = -\frac{1}{\tau_k} (f_i^k - f_i^{k,eq}) \quad (11)$$

A função distribuição de equilíbrio $f_i^{k,eq}$, apresentada na eq. (12), é obtida através da expansão de Taylor da função distribuição de Maxwell normalizada, na

qual c é a velocidade da rede, \bar{u} é a velocidade macroscópica do meio e w_i^k são os coeficientes de peso escalares escolhidos para respeitar a equação da continuidade e a conservação da quantidade de movimento linear e, como resultado, responsáveis por capturar a variável macroscópica massa específica (Mohamad, 2011).

$$f_i^{k,eq} = \rho_k w_i^k \left(1 + \frac{3}{c^2} \bar{e}_i \cdot \bar{u} + \frac{9}{2c^4} (\bar{e}_i \cdot \bar{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \bar{u}^2 \right) \quad (12)$$

O tempo de relaxação τ_k está relacionado com a viscosidade cinemática ν_k , conforme exposto na eq. (13). Esta equação provê a recuperação das equações macroscópicas de Navier-Stokes para fluxo monofásico (Liu et al., 2012).

$$\nu_k = \frac{c^2}{3} \left(\tau_k - \frac{1}{2} \right) \delta_t \quad (13)$$

Quanto maior o valor de τ_k , maiores os erros obtidos na simulação com LBM. Zou & He (1997) trabalharam com a faixa [0.5, 20].

Tolke et al. (2002) propuseram uma interpolação linear para a obtenção do tempo de relaxação τ para as misturas binárias, dada pela eq. (14), na qual R e B são os índices utilizados para identificar as fases do fluido – Vermelho (R) e Azul (B). O campo de fases ρ^N , definido por ρ_R e ρ_B como na eq. (15), assume valores no intervalo [-1,1], sendo 1 quando o fluido é puramente vermelho, -1 quando puramente azul e 0 quando exatamente na interface.

$$\tau = \frac{1 + \rho^N}{2} \tau_R + \frac{1 - \rho^N}{2} \tau_B \quad (14)$$

$$\rho^N = \frac{\rho_R - \rho_B}{\rho_R + \rho_B} \quad (15)$$

O operador de perturbação $\Omega_i^{k(2)}$ é usado para gerar a região interfacial da mistura e para modelar a tensão interfacial σ . A eq. (16) provê a forma do operador derivado por Liu et al. (2012). Com este operador, a tensão interfacial é calculada conforme exposto na eq. (17), controlada pelo uso do parâmetro livre A_k . Liu et al. (2012) sugerem usar $A_R = A_B = A$ e $B_0 = -1/3$, $B_{1-6} = 1/18$ e $B_{7-18} = 1/36$.

$$\Omega_i^{(2)} = \frac{A_k}{2} |\nabla \rho^N| \left[w_i \frac{(\bar{e}_i \cdot \nabla \rho^N)^2}{|\nabla \rho^N|^2} - B_i \right] \quad (16)$$

$$\sigma = \frac{2}{9} (A_R + A_B) \tau c^4 \delta_t \quad (17)$$

O operador de recoloração $\Omega_i^{k(3)}$, proposto por Latva-Kokko & Rothman (2005), é utilizado para promover a segregação de fases e garantir a nitidez da interface. Este algoritmo, explicitado para cada fase k nas eqs. (18) e (19), gera uma distribuição simétrica ao redor da interface, sendo responsável por reduzir as velocidades espúrias e o problema de *lattice pinning*.

$$\Omega_i^{k(3)}(f_i^R) = \frac{\rho_R}{\rho} f_i^{\text{pós-perturbação}} + \beta \frac{\rho_R \rho_B}{\rho} \cos(\varphi_i) f_i^{eq} \Big|_{u=0} \quad (18)$$

$$\Omega_i^{k(3)}(f_i^B) = \frac{\rho_B}{\rho} f_i^{\text{pós-perturbação}} - \beta \frac{\rho_R \rho_B}{\rho} \cos(\varphi_i) f_i^{eq} \Big|_{u=0} \quad (19)$$

Nestas equações, β é o parâmetro de segregação, relacionado com a espessura da interface, e φ é o ângulo entre $\nabla \rho^N$ e a velocidade \bar{e}_i , como mostrado na eq. (20). O parâmetro β deve ser definido no intervalo $[0,1]$ para garantir a obtenção de funções distribuição positivas. Liu et al. (2012) testaram β igual a 0.7

e 1.0 e verificaram que quanto maior for o parâmetro β , mais acurada é a tensão interfacial e maiores são as velocidades espúrias. Liu et al. (2012) também concluíram que $\beta = 0.7$ representa o melhor compromisso com a relação teórica de Taylor entre a deformação e número capilar.

$$\cos(\varphi_i) = \frac{\bar{e}_i \cdot \nabla \rho^N}{|\bar{e}_i| |\nabla \rho^N|} \quad (20)$$

Aplicando a equação da continuidade e a conservação da quantidade de movimento linear, as variáveis macroscópicas ρ e \bar{u} são obtidas, conforme mostrado nas eqs. (21) e (22). A variável macroscópica p é obtida a partir da relação de estado exposta na eq. (23), onde c_s^k é a velocidade do som da fase k na rede.

$$\rho_k = \sum_i f_i^k \quad (21)$$

$$\rho \bar{u} = \sum_i \sum_k f_i^k \bar{e}_i \quad (22)$$

$$p_k = \rho_k (c_s^k)^2 \quad (23)$$

O método de Lattice-Boltzmann é recomendado para uso em aplicações com fluidos quasi-incompressíveis, pois o erro no método é da ordem de Ma^2 . Para garantir esta condição, deve-se trabalhar com Ma baixos que respeitem $Ma < 0,3$ (Mohamad, 2011; White, 2009).

As condições de contorno para o modelo de rede utilizado neste trabalho, D3Q19, foram derivadas utilizando a lógica de *bounceback* da distribuição de não-equilíbrio proposta por Zou & He (1997). A derivação destas condições de contorno são apresentadas no Apêndice B.

As condições de contorno utilizadas neste estudo são:

- *Bounceback* nas paredes, assumindo parede localizada na metade do caminho entre nó de fluxo e nó de parede (*half-way wall bounceback*);
- Pressão imposta na saída; e
- Velocidade imposta na entrada.

2.3.

Emulsões

O fluxo de uma gota por um capilar restrito serve como base para definir o comportamento do escoamento de emulsão em meio poroso. Este esquema foi estudado experimentalmente por Olbricht & Leal (1983), Cobos et al. (2009) e Robles-Castillo (2011).

Olbricht & Leal (1983) observaram que a gota experimenta uma grande alteração morfológica ao fluir por uma restrição. Esta deformação é acompanhada por uma queda de pressão adicional, ou um aumento da perda de carga no escoamento, quando comparado com o comportamento do fluxo através de capilares retos. Este aumento na queda de pressão pode ser responsável pela retenção de gotas em certas condições de gradiente de pressão e de diâmetro de garganta.

Segundo Olbricht & Leal (1983), a queda de pressão adicional observada no escoamento está relacionada com a atuação de três mecanismos:

- Efeito capilar, o qual está relacionado com a oposição à deformação da gota;
- Efeito viscoso, o qual é causado pela substituição do líquido da fase contínua pelo líquido mais viscoso da gota; e

- Interação entre gota e parede do capilar.

Neste estudo, foi verificado, também, que o efeito da geometria do tubo no movimento de gotas deformáveis é fortemente dependente do número de capilaridade. Para números de capilaridade suficientemente grandes, uma grande deformação da gota pode levar à quebra de gotas. Estes efeitos no formato da gota são intrinsecamente relacionados com razão de viscosidade e número de capilaridade.

Cobos et al. (2009) propuseram um fator redutor de mobilidade f calculado conforme exposto na eq. (24), usado para descrever o efeito do bloqueio parcial de poros, representado como um aumento da queda de pressão experimentada no fluxo. $\Delta P_{monofásico}$ é a queda de pressão em regime permanente obtida no fluxo monofásico e $\Delta P_{emulsão}$ é o pico de pressão observado durante o fluxo da emulsão.

$$f = \frac{\Delta P_{monofásico}}{\Delta P_{emulsão}} \quad (24)$$

Em emulsões compostas por gotas de pequeno diâmetro quando comparado ao diâmetro da garganta, f não depende do número de capilaridade, sendo somente uma função da razão de viscosidade e do tamanho da gota. Para gotas de diâmetro comparáveis ao diâmetro da garganta, f é fortemente dependente do número de capilaridade, como observado previamente em Olbricht & Leal (1993).

Robles-Castillo (2011) observaram a mesma dependência com o tamanho da gota, fator considerado como um dos parâmetros mais importantes deste tipo de escoamento. Neste estudo numérico, observou-se pequena sensibilidade do fator f ao número de capilaridade Ca , ao se avaliar escoamento através de capilar restrito com dimensões semelhantes às utilizadas neste estudo (100 μm de diâmetro de capilar e 50 μm de diâmetro de garganta), faixa de vazões idêntica e razão de

viscosidade 10.

Robles-Castillo (2011) justificam este resultado pelo fato de o efeito viscoso dominar o fluxo nesta geometria de poros. Para um capilar com diâmetro de capilar de 200 μm , mantendo o mesmo diâmetro de garganta, observaram um maior domínio do efeito capilar no fluxo, o qual apresentou mecanismo de bloqueio de poros com números de capilaridade baixos.

Roca-Reyes (2011) e Roca & Carvalho (2013) apresentaram um estudo numérico resolvido pelo acoplamento totalmente implícito de um método de *level-set* modificado ao método de elementos finitos. Este estudo obteve as mesmas relações de dependência com o tamanho de gota apresentadas no estudo experimental de Cobos et al. (2009).

Para gotas pequenas quando comparadas ao diâmetro da garganta (valor testado $d_{drop}/D = 0.4$), há um efeito fraco na queda de pressão adicional causada pelo fluxo da gota, sendo praticamente insensível a alterações no número de capilaridade. Conforme o diâmetro da gota aumenta, a mobilidade reduz consideravelmente, sendo, neste caso, f fortemente dependente do número de capilaridade.

Roca & Carvalho (2013) também observaram que um aumento no número de capilaridade é acompanhado por um incremento no fator redutor de mobilidade f , devido à menor resistência à deformação da gota na passagem pela restrição quanto menor for a magnitude da tensão interfacial. Para um número de capilaridade infinito, o fator redutor de mobilidade f diminui, ou seja, aumenta a resistência ao fluxo, conforme aumenta a razão de viscosidade ou a razão geométrica entre diâmetros da gota e da garganta do capilar.

Conforme demonstrado por estes estudos numéricos e experimentais, ao projetar certa redução da mobilidade de fluxo pela injeção de emulsões, as características da emulsão devem ser cuidadosamente projetadas em termos de razão de viscosidade, de tensão interfacial e de tamanho de gota em relação à distribuição de gargantas de poros.

3

Método

As Figuras 2 e 3 apresentam o fluxograma que descreve a metodologia utilizada neste estudo.

Para realizar as simulações, foram utilizadas as linguagens de programação MATLAB e C++. Dois programas desenvolvidos em Velloso (2010), um em cada linguagem de programação, foram fornecidos pela Professora Raquel Quadros Velloso. A partir destes programas base, foram geradas rotinas que permitiram a simulação do problema estudado.

A linguagem de programação MATLAB foi utilizada com maior frequência nos testes iniciais, com malhas tridimensionais utilizadas em domínios bidimensionais (terceira dimensão com um elemento de rede e condição de contorno periódica nesta direção). Para a simulação de malhas tridimensionais, apesar de otimizações do código MATLAB, optou-se por prosseguir com a simulação utilizando o aplicativo *standalone* gerado pelo código C++, o qual apresenta menor tempo de computação e pode ser rodado simultaneamente em diversas máquinas, independente de haver biblioteca ou *software* instalado.

Para o pós-processamento, foi utilizado o *software* MATLAB para desenvolvimento de uma rotina responsável pela conversão dos arquivos de saída da simulação em matrizes quadridimensionais e para visualização dos resultados.

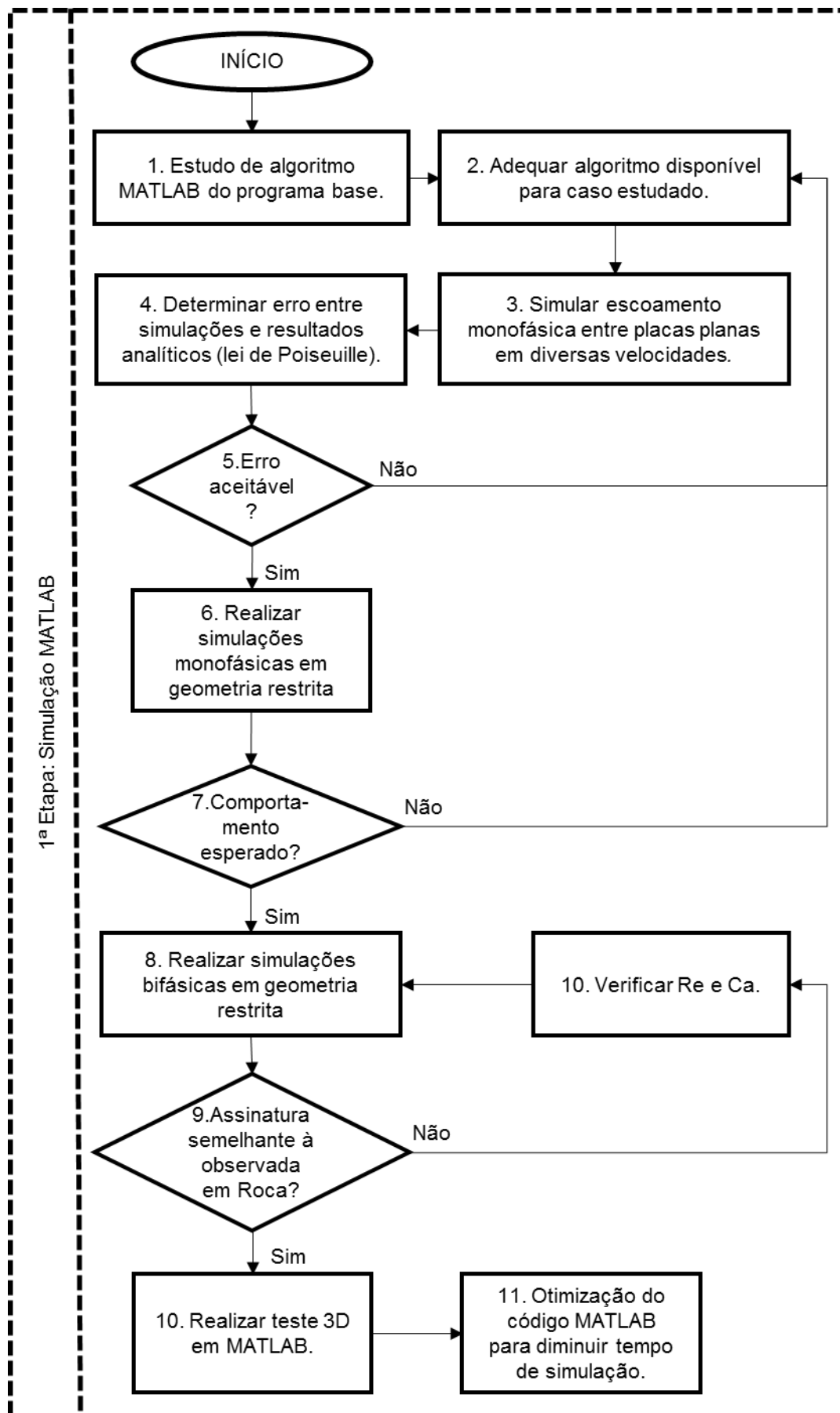


Figura 2: Fluxograma de etapas iniciais realizadas com simulação MATLAB.

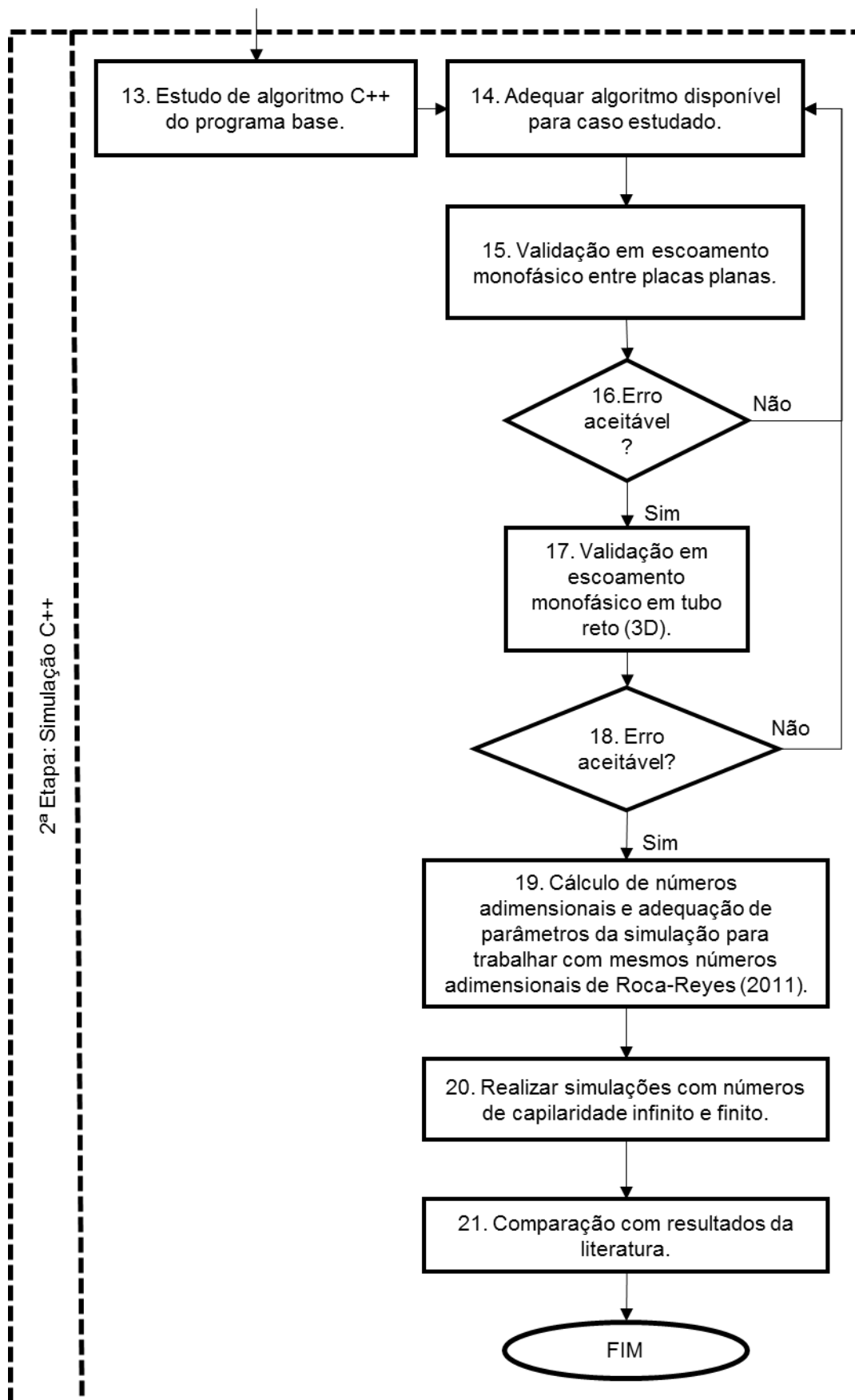


Figura 3: Fluxograma de etapas realizadas com simulação em C++.

Para o pré-processamento, somente planilhas eletrônicas eram utilizadas inicialmente para calcular o perfil geométrico da seção do tubo e para determinar o vetor de raios do tubo, o qual é uma entrada da simulação. Posteriormente, para facilitar a simulação de diversas geometrias utilizando uma malha de dimensão variável, inseriu-se o cálculo para geometria do tubo dentro da rotina C++. Desta forma, a rotina C++ se tornou uma rotina parametrizada que tem como entradas os seguintes parâmetro:

- *Flag* para identificar a geometria do tubo entre Reta ou Restrita;
- Raio do capilar, o qual é utilizado nas simulações com geometria plana;
- Comprimento ($L^{capilar} = L^I + L + L^O$), diâmetro do capilar (Φ_C), diâmetro da garganta (Φ_g) e raio de curvatura (R), os quais são utilizados nas simulações com geometria restrita.

Para simular um caso com geometria restrita no qual se desconheça o raio de curvatura, pode se utilizar uma planilha eletrônica que calcula este parâmetro, de forma a se obter um tubo com determinado comprimento, diâmetro de capilar e diâmetro de garganta. O raio de curvatura é definido de modo que os arcos de circunferência que compõem o tubo se tangenciem.

O esquema da descrição paramétrica da geometria do tubo é apresentado na Figura 4. Na Figura 5, é apresentada a geometria utilizada na maior parte das simulações.

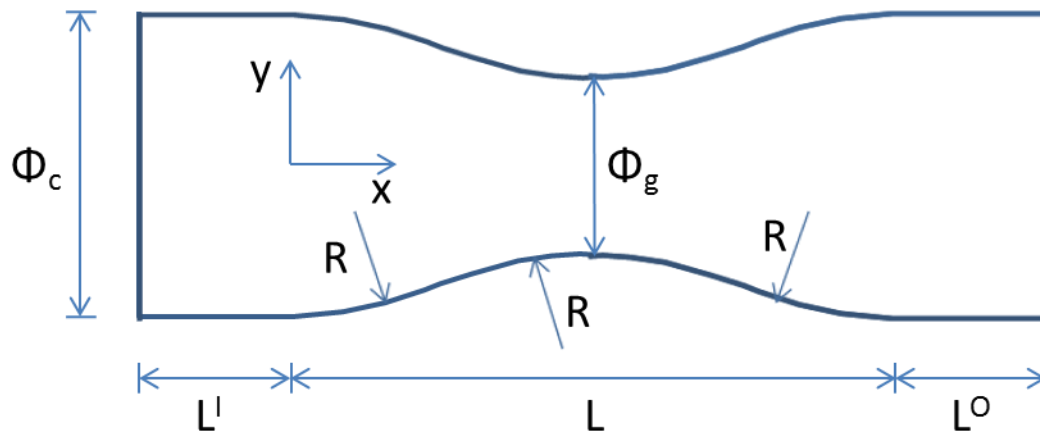


Figura 4: Descrição paramétrica da geometria do tubo.

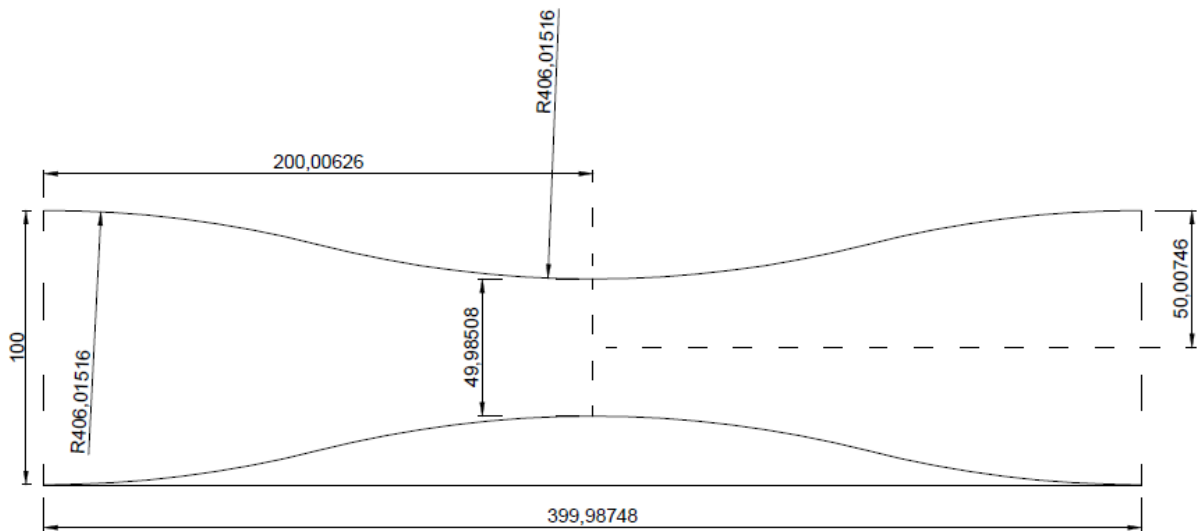


Figura 5: Esquema da geometria utilizada na maior parte das simulações com medidas na unidade μm .

Na entrada dos dados para a simulação, são fornecidos dados relativos à simulação, às características da malha, à geometria do tubo, à geometria inicial da gota, às condições do escoamento e aos parâmetros do método Lattice-Boltzmann. Os parâmetros, divididos por campo, são:

- Simulação: Nome dos arquivos de saída, tempo final da simulação, intervalo de tempo para impressão dos dados;
- Características da malha: Número de elementos de rede nas direções

x , y e z ;

- Geometria do tubo: *flag* para identificação da geometria entre opções reta e restrita, raio do capilar em unidades de elementos de rede (utilizado para geometria reta), raio de curvatura, diâmetro do capilar, diâmetro da garganta e comprimento do capilar (todas as medidas em metro e utilizadas para geometria restrita);
- Geometria da gota: formato da gota (possibilidades esfera, elipsoide oblata ou elipsoide aproximada), posição do centro da gota, raio e comprimento da gota (ambos em unidade de elementos de rede);
- Condições do escoamento: Massa específica em unidades LBM do fluido, velocidade máxima na direção x utilizada para calcular perfil parabólico de velocidades impostas na face de entrada, massa específica imposta na face de saída (diretamente relacionada com a pressão imposta);
- Parâmetros do método Lattice-Boltzmann: Tempos de relaxação τ dos fluidos Vermelho e Azul (parâmetro relacionado à viscosidade do fluido), β (parâmetro relacionado com a espessura da interface entre fluidos), A (utilizado para imposição da tensão interfacial), p (parâmetro relacionado com a molhabilidade das paredes).

A rede implementada é do tipo D3Q19, apresentada com mais detalhes no Apêndice A. O algoritmo considera velocidade da rede unitária, ou seja, que são iguais os tamanhos característicos da rede de espaço, δ_x , e de tempo, δ_t . Isto é comum no desenvolvimento dos métodos de Lattice-Boltzmann, pois o parâmetro c influencia na velocidade máxima e no tempo de relaxação τ , os quais apresentam intervalo permitido limitado.

Devido à flexibilidade na definição de parâmetros da geometria do capilar e da gota, a versão final da rotina, que é utilizada na maior parte dos testes, é considerada totalmente parametrizada.

Na saída dos dados da simulação, são registrados seis tipos de arquivos, sendo que cinco destes arquivos são escritos periodicamente com a frequência

dada pelo tempo de impressão dos arquivos.

O primeiro arquivo, que não é periódico e é escrito somente no tempo inicial, é um arquivo com $4 \cdot n_x \cdot n_y \cdot n_z$ números, sendo n_i o número de elementos na direção i . Para cada elemento de rede, são escritas as coordenadas I , J e K e o *flag* do elemento de rede. Os elementos de rede que representam parede são identificados com o *flag* -1 e os elementos de rede que representam fluido são identificados pela numeração sequencial dos elementos, que é um número natural não nulo.

Os arquivos periódicos são vetores com dimensão n_p , sendo n_p o número de elementos de rede que não são parede. Os cinco arquivos periódicos são a massa específica do fluido vermelho, a massa específica do fluido azul, a velocidade na direção x , a velocidade na direção y e a velocidade na direção z .

4

Resultados

Este capítulo foi dividido em dois subcapítulos.

No primeiro subcapítulo, são apresentados os estudos numéricos iniciais de domínios bidimensionais simulados utilizando malhas tridimensionais utilizando programas escritos nas linguagens de programação MATLAB e C++. A linguagem interpretada MATLAB apresenta maior tempo de processamento. Por este motivo, foi utilizada somente com domínios bidimensionais.

No segundo subcapítulo, são apresentados os estudos numéricos de domínios tridimensionais realizados utilizando um programa escrito na linguagem de programação C++.

A referência de literatura principal para a comparação das simulações é a dissertação de Roca-Reyes (2011). Buscou-se reproduzir as condições utilizadas no trabalho de referência, de forma a possibilitar a comparação dos resultados de métodos numéricos diferentes.

Duas das condições aplicadas em Roca-Reyes (2011) não puderam ser aplicadas neste estudo:

- Pressão nula na face de saída do capilar;
- Fase contínua com viscosidade 0,11 Pa.s, aproximadamente cem

vezes superior à viscosidade da água em pressão e temperatura ambiente.

No LBM, a pressão está relacionada com a massa específica do fluido, seguindo a relação de estado expressa na eq. (23). Impor pressão nula implica em se adotar massa específica nula no fluido, o que, além de não ser físico, traz grandes instabilidades à simulação. Foram testadas massas específicas baixas na face de saída e, mesmo nestes casos, o programa apresentou sérios problemas de estabilidade. Entretanto, tal fato não atrapalha a análise, pois a medida relativa queda de pressão no escoamento será analisada ao invés da pressão absoluta.

Quanto à viscosidade, o LBM apresenta restrições na adoção direta de viscosidades elevadas, uma vez que esta propriedade é imposta na simulação através do parâmetro tempo de relaxação τ (eq. (13)). Neste estudo, salvo em alguns testes, ficou-se restrito ao intervalo utilizado por Zou & He (1997), [0.5, 20]. Tentativas de simular com viscosidades cem ou dez vezes superiores à viscosidade utilizada inicialmente, a viscosidade da água, não foram bem sucedidas, pois foram observadas instabilidades na simulação.

4.1.

Simulações de domínios bidimensionais

4.1.1.

Escoamento monofásico

Em um primeiro estágio, verificou-se a capacidade do algoritmo de representar adequadamente o escoamento monofásico entre placas planas, caso

que apresenta solução analítica conhecida como lei de Poiseuille. Neste caso, a simulação é comparada à solução de uma seção longitudinal de escoamento entre placas planas com abertura $\delta_z = \delta_x$, conforme exposto no Anexo A. A solução analítica é utilizada para se calcular o desvio do resultado da simulação.

Foi realizada uma simulação em domínio bidimensional (terceira dimensão com um elemento de rede e condição de contorno periódica nesta direção), utilizando malha tridimensional D3Q19.

Foi utilizada uma malha de $144 \times 38 \times 1$ elementos de rede para simular um domínio de fluxo com dimensões $R_{capilar} = 0,05 \text{ mm}$, $L = 0,4 \text{ mm}$ e $e = \delta_x = 2,78e - 6 \text{ m}$. Na dimensão y , para qualquer x , todos os nós em $y = 1$ e em $y = 38$ constituem parede, não contribuindo, portanto, para o fluxo. Os tamanhos característicos referentes a estas condições são $\delta_x = 2,78E - 6 \text{ m}$, $\delta_t = 2,78E - 6 \text{ s}$ e $\delta_m = 2,14335E - 14 \text{ kg}$. O passo de tempo da simulação, Δt , é igual a δ_t .

De forma condensada, a simulação foi realizada com as seguintes condições:

- Massa específica unitária do fluido em todo o domínio aberto ao fluxo, equivalente a uma massa específica de 1000 kg/m^3 ;
- Tempo de relaxação igual a 1,58432 relativo a fluido com viscosidade dinâmica de $0,001004 \text{ Pa.s}$, que é a viscosidade da água em pressão atmosférica e temperatura de 20°C .

Testou-se a condição de contorno de pressão imposta na entrada e na saída.

Foram estudados casos que apresentam números de Reynolds entre 0,14 e 11,95, os quais apresentam, respectivamente, velocidades máximas do perfil de velocidades $u_{x,max}$ entre 0,001415 e 0,12 m/s. A definição dos números adimensionais utilizados neste estudo é feita no Anexo B. Alguns dos perfis parabólicos de velocidade testados, com as respectivas condições de vazão, as quais são utilizadas para o cálculo do diferencial de pressão imposto no escoamento, são apresentados na Figura 6.

Velocidades para diferentes vazões

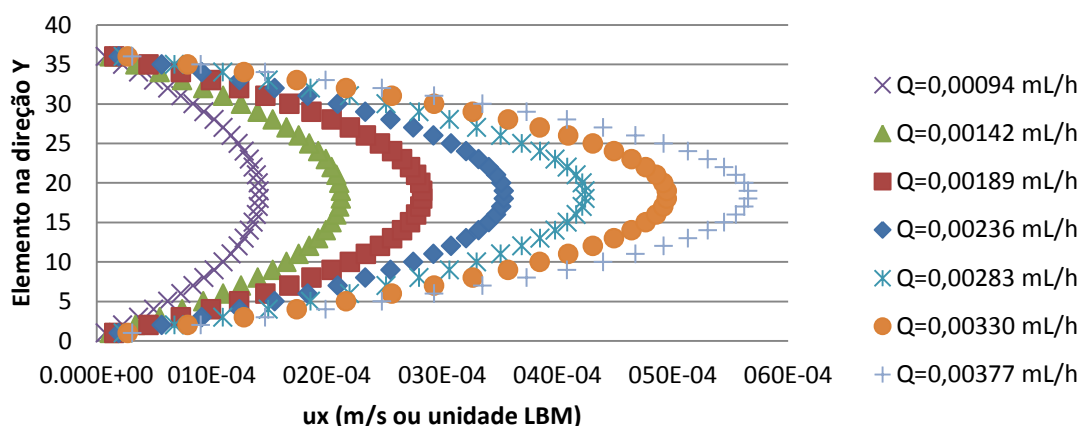


Figura 6: Alguns dos perfis parabólicos de velocidade testados e respectivas vazões.

Esta simulação de calibração, com 8.000 passos de tempo, foi realizada com os seguintes objetivos:

- Verificar se as condições de contorno de pressão estavam sendo impostas corretamente; e
- Verificar a faixa de números de Reynolds e de velocidades máximas do escoamento nas quais o algoritmo consegue representar bem o resultado analítico.

Sabendo-se que a condição de pressão é imposta pela definição da massa específica e que não é possível aplicar massas específicas muito baixas no escoamento, impõe-se pressão unitária em toda a face de saída e a pressão a ser imposta em toda a face de entrada é calculada com base no diferencial de pressão analítico calculado para a velocidade de cada caso.

A simulação com imposição de pressão apresenta baixos desvios percentuais com relação à solução analítica (Figura 7). Na Figura 8, visualiza-se a faixa de diferenciais de pressão que é bem capturada na simulação.

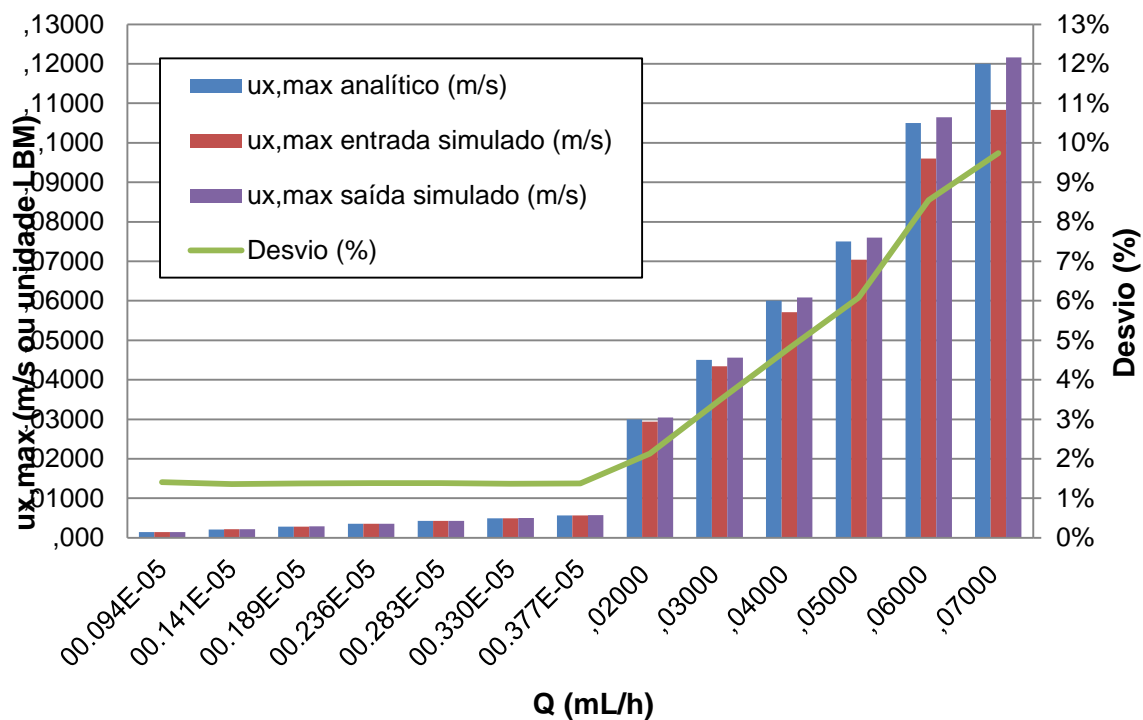


Figura 7: Comparação entre velocidade máxima na direção x analítica (azul), simulada na entrada (vermelho) e simulada na saída (roxo), juntamente com desvio entre dado calculado e simulado (verde).

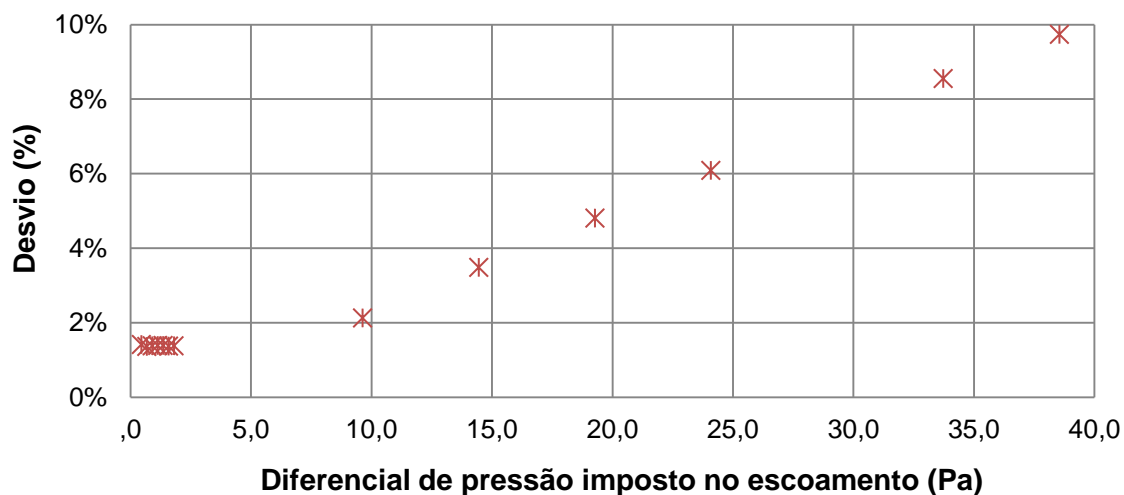


Figura 8: Desvio na estimativa da velocidade máxima na direção x em relação ao diferencial de pressão imposto no escoamento.

Verificou-se que, com $Re \leq 0.56$ ou $u_{x,m\acute{a}xima} = 0,005659 m/s$ ou $Q \leq 3,77e - 3 ml/h$, o desvio entre as velocidades m\acute{a}ximas na dire\c{c}\~ao x entre a solu\c{c}\~ao anal\acute{t}ica e a simula\c{c}\~ao fica restrito a 1,41%. Para $Re \geq 2.99$ ou $Q \geq 0.02 ml/h$ ou $u_{x,max} \geq 0,03 m/s$ ou $Ma \geq 0,05$, a simula\c{c}\~ao come\c{c}a a divergir da solu\c{c}\~ao anal\acute{t}ica. Come\c{c}a-se a observar a n\~ao converg\~encia com Ma inferior ao limite de 0,3 considerado para fluxos praticamente incompress\acute{i}veis.

Este fen\~omeno est\~a associado \~a imposi\c{c}\~ao de velocidades de elevada magnitude na simula\c{c}\~ao, o que torna o problema quase compress\acute{i}vel. O LBM \acute{e} um m\acute{e}todo de compressibilidade artificial e apresenta restri\c{c}\~oes quanto \~a simula\c{c}\~ao de velocidades e n\acute{u}mero de Mach elevados. Segundo Mohamad (2011), para reduzir erros de simula\c{c}\~ao, a velocidade deve ser mantida at\~e a ordem de 0.1 unidade LBM.

As velocidades mais altas foram testadas somente neste caso para reproduzir as mesmas vaz\~oes volum\acute{e}tricas aplicadas por Roca-Reyes (2011) na simula\c{c}\~ao de escoamento em tubo. Entretanto, nas simula\c{c}\~oes em dom\�nio tridimensional, vai se trabalhar com n\acute{u}meros de Reynolds restritos ao valor unit\~ario e m\acute{a}xima velocidade de fluxo de 0,005659 m/s ou 0,005659 unidade LBM, intervalo no qual as simula\c{c}\~oes com dom\�nio bidimensional se mostraram precisas.

Observa-se, na Figura 9, a reprodu\c{c}\~ao do perfil sim\acute{e}trico de velocidades u_x em toda se\c{c}\~ao x . Ou seja, $u_x = u_x(y)$ somente e u_x independe de x . \acute{E} poss\�vel tamb\acute{e}m observar o gradiente bem estabelecido de press\~ao na dire\c{c}\~ao principal do escoamento, o que era esperado para um Fluxo de Poiseuille.

Na Figura 10, pode-se verificar a influ\~encia do processo de propaga\c{c}\~ao na distribui\c{c}\~ao das propriedades. S\~ao apresentadas as diferen\c{c}as entre a velocidade simulada, $u_{x,simulada}$, e a velocidade anal\acute{t}ica, $u_{x,anal\acute{t}ica}$, em cada ponto do dom\�nio de fluxo. Pode-se perceber que, entre os tempos de registro 7.950 Dt e 8.000 Dt, h\~a uma propaga\c{c}\~ao das velocidades m\acute{a}ximas e m\�nimas na dire\c{c}\~ao x. Este efeito transiente de pequen\�ssima escala \acute{e} comum \~a fam\�lia de m\acute{e}todos LBM.

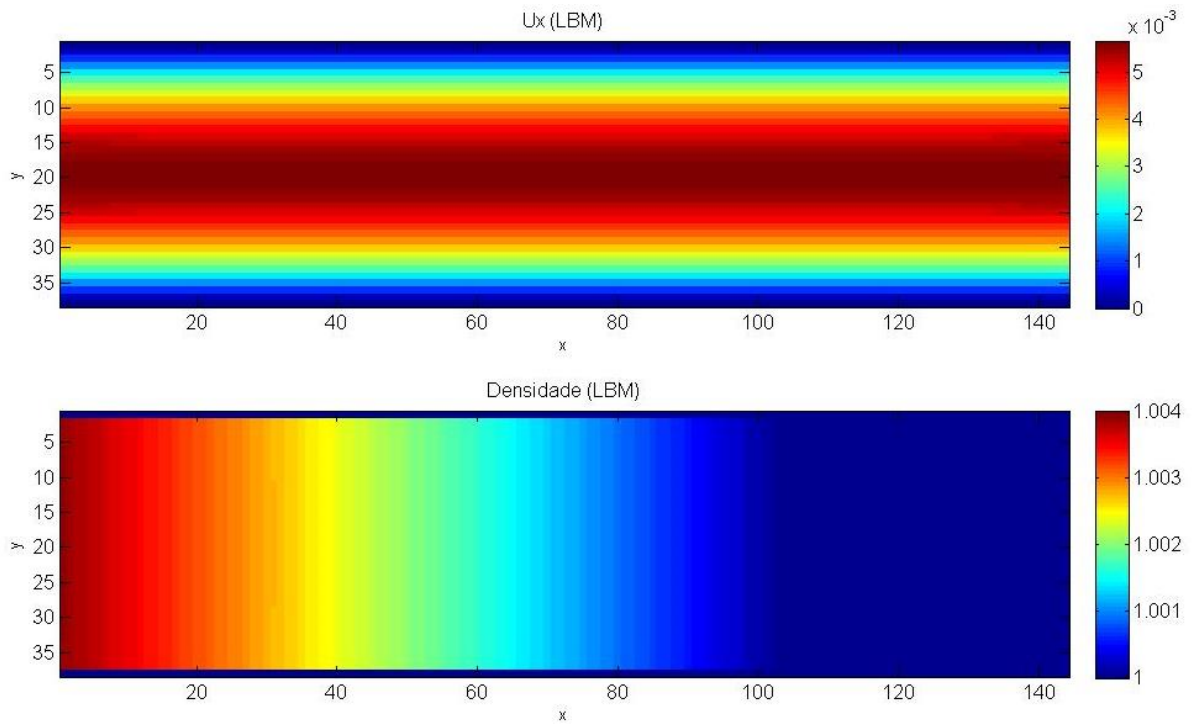


Figura 9: Campo de u_x e ρ no tempo 8.000 passos de tempo para o caso $u_{x,max} = 0.005659 \text{ m/s}$.

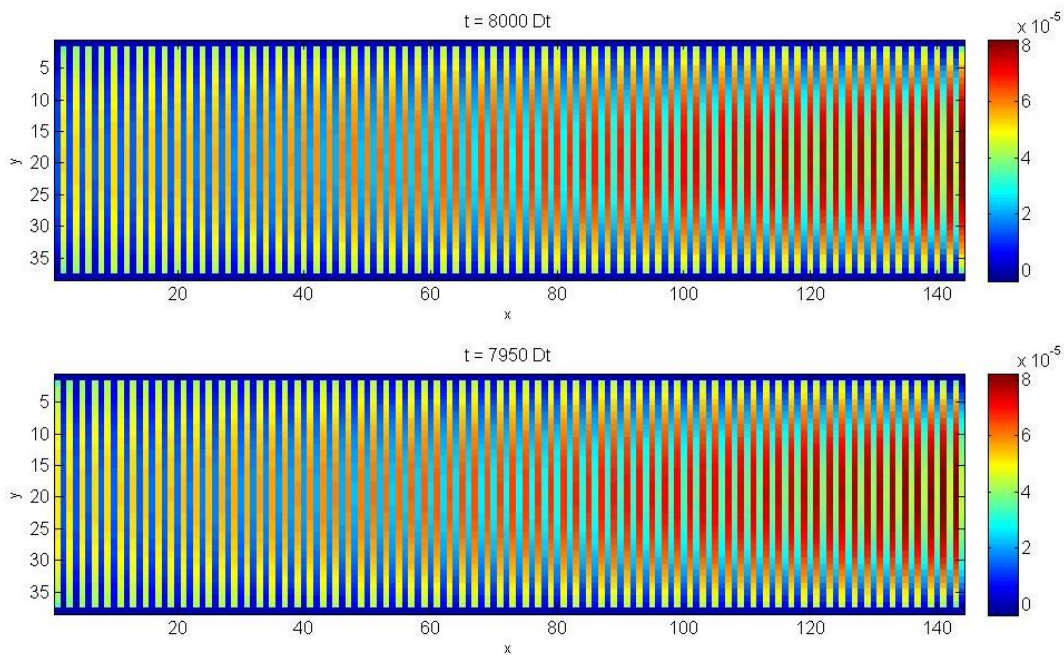


Figura 10: Evolução da diferença ($u_{x,simulada} - u_{x,analitica}$) no tempo de simulação.

Com este experimento, concluiu-se, também, que as condições de contorno

estão sendo corretamente inseridas na simulação e que a discretização espacial e temporal utilizadas estão adequadas.

Trabalha-se, nas próximas simulações, com inserção da restrição ao fluxo e condições de contorno de pressão imposta na saída e velocidade imposta na entrada, utilizando velocidade máxima do perfil parabólico de 0,005659 m/s.

Conforme visto na Figura 11, há um incremento da queda de pressão (pico) no período transiente, relacionada com o período necessário para estabilizar a distribuição de velocidades no domínio (Figura 12).

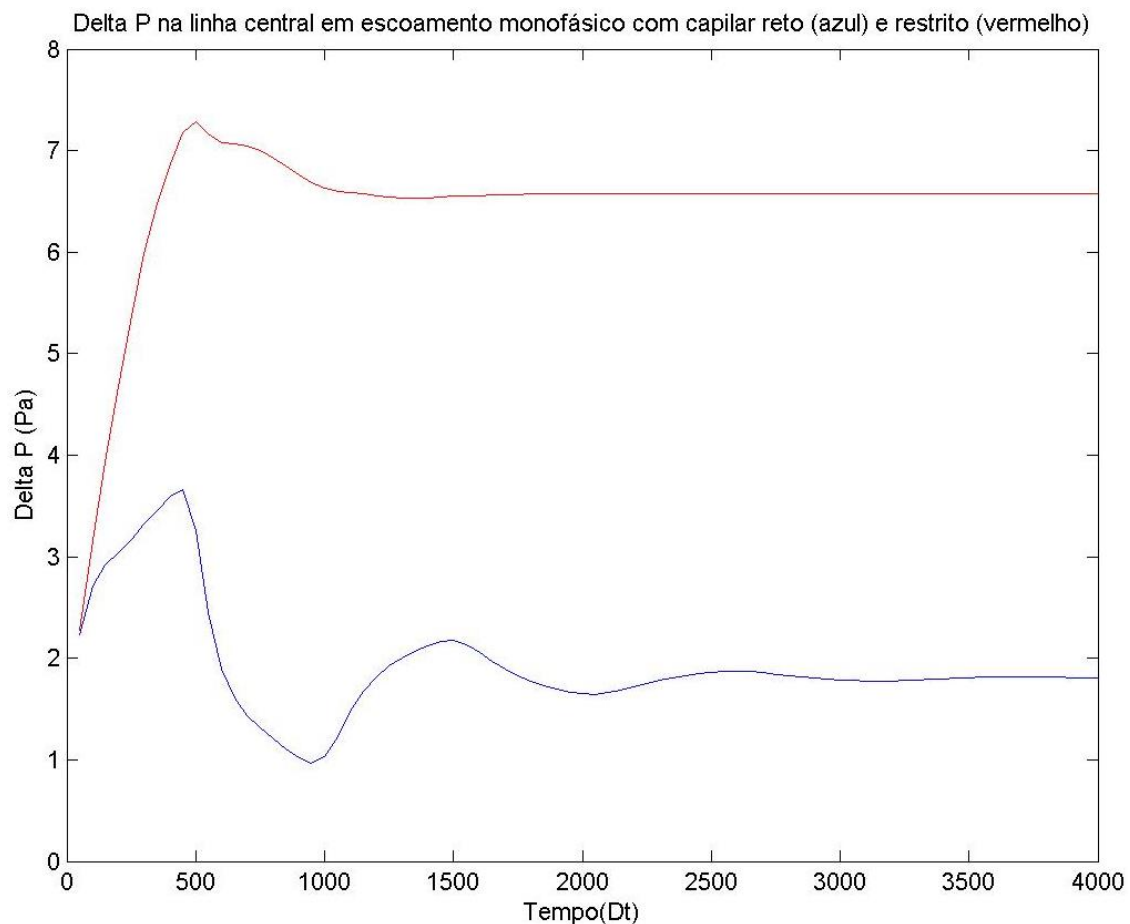


Figura 11: Queda de pressão na linha de simetria durante tempo de simulação para escoamento monofásico em geometria reta (azul) e restrita (vermelho).

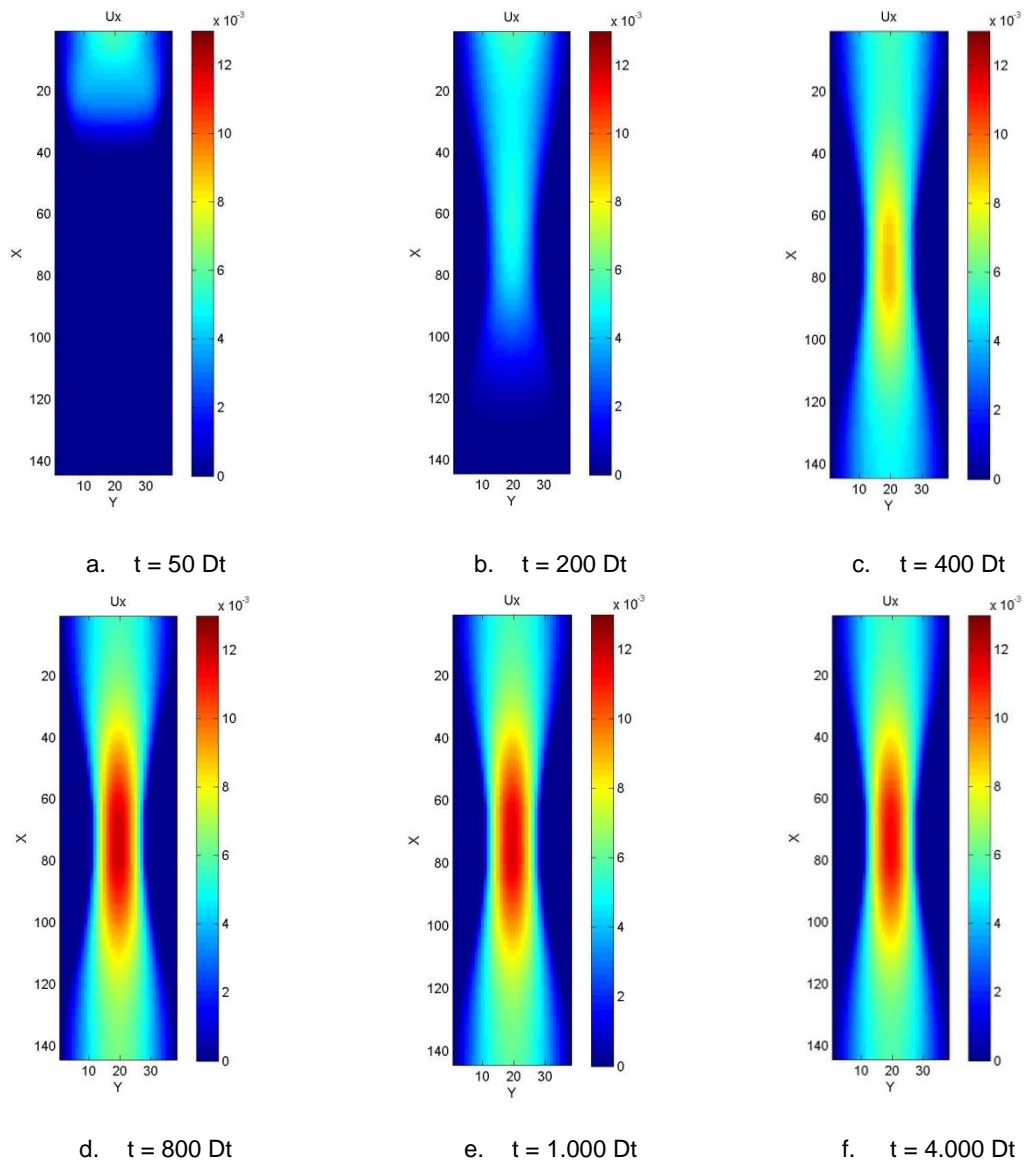


Figura 12: Evolução do campo velocidade durante tempo de simulação para o fluxo monofásico em capilar com restrição.

Em cada instante, a queda de pressão é calculada com base nas pressões simuladas na linha central do capilar, sendo igual à diferença entre a pressão no ponto central da seção de entrada e a pressão no ponto central da seção de saída.

A natureza da propagação das partículas na rede e o fato de este ser um método de compressibilidade artificial são responsáveis pela existência de um período transiente inicial oscilatório. Apesar de a amplitude das oscilações estar diretamente relacionada com a magnitude das velocidades testadas, não houve variação expressiva no tempo de estabilização entre os diferentes casos testados.

A convergência para o registro permanente foi inferida utilizando o tempo após o qual não há registro posterior com variação de pressão superior ou igual a 0,01 Pa, sabendo que a frequência de registro utilizada nestas simulações foi de 50 passos de tempo. A introdução da restrição, com a qual a simulação convergiu após 1.200 passos de tempo, equilibrou o sistema mais rapidamente do que a geometria reta, a qual estabilizou em 2.900 passos de tempo. Além disto, o caso restrito apresentou menores amplitudes de oscilação.

Como se esperava, o diferencial de pressão no tempo final de simulação de 4.000 passos de tempo obtido na geometria restrita, de 6,57 Pa, foi superior ao observado na geometria reta, de 1,81 Pa.

4.1.2.

Escoamento bifásico

Os casos testados de escoamento bifásico utilizam as seguintes condições:

- Capilar restrito;
- Velocidade imposta na entrada com $u_{x,max} = 0,005659 \text{ m/s}$;
- Pressão imposta na saída;
- Razão de viscosidade 2 entre fases dispersa e contínua;
- Razão de geometria entre diâmetros de gota e do capilar de 0,6;
- Tensão interfacial de 0,98 mN/m ou 0,3521 em unidade LBM, calculada usando a eq. (17) e considerando $A = A_R = A_B = 0,5$ e velocidade da rede c unitária, ou seja, $\delta_t = \delta_x$;
- Adotado $\beta = 1$;
- Mesmas condições de ρ , τ e μ utilizadas na seção 4.1.1.

O valor de tensão interfacial adotado foi julgado adequado para ser utilizado nesta etapa, pois Roca-Reyes (2011) reportou o uso de um valor próximo de tensão interfacial de 1,1 mN/m nos testes com número de capilaridade finito.

Foram utilizados os mesmos tamanhos característicos da seção 4.1.1, $\delta_x = 2,78E - 6\text{ m}$, $\delta_t = 2,78E - 6\text{ s}$ e $\delta_m = 2,14335E - 14\text{ kg}$. Para se obter a estabilização do período transiente inicial antes de o escoamento começar a sofrer a influência da entrada da gota na restrição, aumentou-se o comprimento inicial do domínio de fluxo, com a adição de 50 elementos de rede no trecho com maior seção transversal aberta ao fluxo. Desta forma, a dimensão da malha com a qual se trabalhou foi de 194 x 38 x 1 elementos de rede.

Outro cuidado tomado foi o de afastar suficientemente o centro da gota da seção de entrada. Esta medida buscou evitar os efeitos de borda relacionados com a intersecção da gota dispersa na seção de entrada, o que afeta a distribuição de pressão nos tempos iniciais de simulação nesta posição.

Para avaliar o escoamento da gota por todo o comprimento do domínio de fluxo, foi necessário aumentar o tempo simulado para 30.000 passos de tempo. O tempo total de simulação foi de 13h 04 min.

Para a verificação do efeito do escoamento da gota no capilar restrito, é utilizado somente o período entre 0 e 27500 passos de tempo, período no qual a gota está totalmente incluída no domínio de fluxo (Figura 13).

Antes da entrada na restrição, há a estabilização do regime transiente. Observa-se, qualitativamente, a mesma assinatura de pressão observada em Roca-Reyes (2011), com incremento da queda de pressão conforme a gota começa a sofrer processo de deformação no escoamento através da restrição.

A Figura 14, que apresenta a distribuição de pressão na fase contínua (fase R), é utilizada para acompanhar as alterações morfológicas presentes em cada período da simulação.

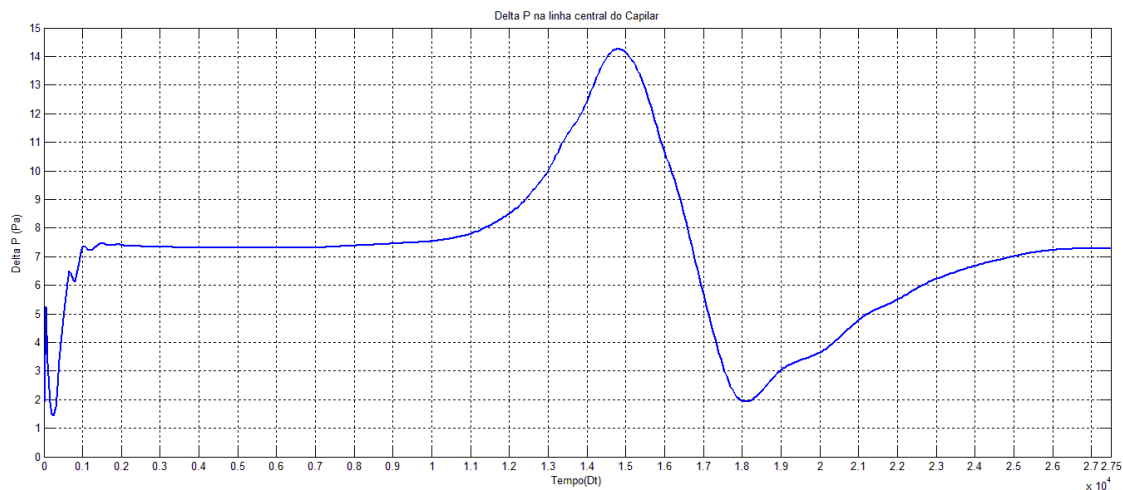


Figura 13: Queda de pressão na linha de simetria entre tempos 0 e 27.500 Dt.

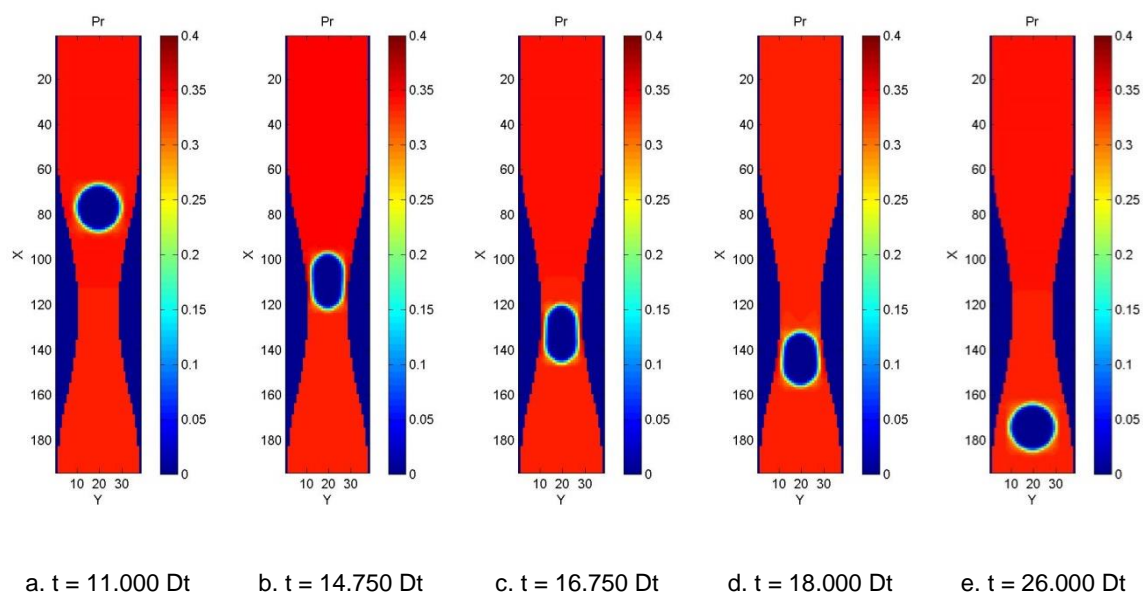


Figura 14: Variação da pressão na fase contínua (R) durante tempo de simulação.

O incremento na queda de pressão se inicia no tempo simulado de 11.000 passos de tempo, quando a gota começa a se deslocar em seção com diâmetro reduzido quando comparado ao diâmetro da gota (a razão geométrica entre diâmetros da gota e da seção do capilar é de aproximadamente 80%). É necessário um diferencial de pressão adicional para se realizar a deformação da gota.

No tempo de simulação de 14.750 passos de tempo, a metade anterior da gota ocupa a seção mais restrita do escoamento. Nesta posição, a gota está em seu maior estágio de deformação, que corresponde à máxima área superficial para o volume de gota testado e ao maior diferencial de pressão no escoamento, necessário para reagir à força interfacial que se opõe à deformação da gota.

A partir do tempo 16.750 passos de tempo, a queda de pressão simulada difere do comportamento obtido no estudo de Roca-Reyes (2011), apresentando uma queda de pressão inferior à queda de pressão observada após estabilização do período transiente.

Uma hipótese inicialmente aventada para explicar este fenômeno é que o mesmo seria causado pela incidência de oscilações comumente presentes na simulação LBM em regime transiente, dada a natureza inerentemente transiente do escoamento em contração-expansão.

Com os testes realizados na sequência, demonstrou-se que tal comportamento pode ser causado por uma relação específica entre as forças inerciais, viscosas e interfaciais. Neste contexto, a reprodução da mesma relação entre forças viscosas e interfaciais, expressa pela igualdade do número de capilaridade, mostrou ser o parâmetro mais importante para a obtenção da mesma assinatura de queda de pressão.

Apesar de influenciar o campo de pressão no escoamento, a inserção de gota com viscosidade diferente e com tensão interfacial não nula não afeta significativamente a queda de pressão no regime permanente inicial e final com relação ao resultado do regime monofásico. O comportamento é semelhante ao observado na simulação de domínios tridimensionais, conforme exposto na Figura 48 da seção 4.2.3.3.

4.1.2.1.

Sensibilidade à viscosidade

Visando se aproximar do valor de viscosidade utilizado por Roca-Reyes (2011), foram realizados testes impondo viscosidade cem ou dez vezes superior à utilizada anteriormente, mantendo a razão de viscosidade. Estes casos, nos quais se adotou tempos de relaxação da água, respectivamente, de 108,93 e 11,34, não foram bem sucedidos, apresentando graves instabilidades numéricas como a dispersão aleatória da gota (Figura 15).

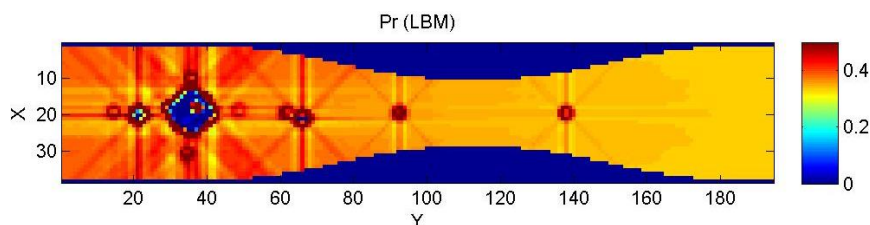


Figura 15: Campo de pressão da fase contínua (R) no tempo 10.000 Dt em simulação com viscosidades dez vezes superiores às utilizadas anteriormente.

Não se observou dispersão da gota ao se aplicar uma viscosidade quatro vezes maior, mantendo a razão de viscosidade, com tempo de relaxação da água de 4,84. Entretanto, foram observadas quedas de pressão negativas (Figura 16) e escoamento da gota em direção oposta à direção imposta ao escoamento pelas condições de contorno (Figura 17). Este fenômeno observado não é físico.

Realçado nos estudos com viscosidade aumentada, o campo de pressão apresenta uma concentração de baixos valores relativos de pressão nas extremidades da gota. Estas distorções locais no campo de pressão podem ser transportadas nas direções principais de propagação da rede, conforme exposto nas Figuras 15 e 17.

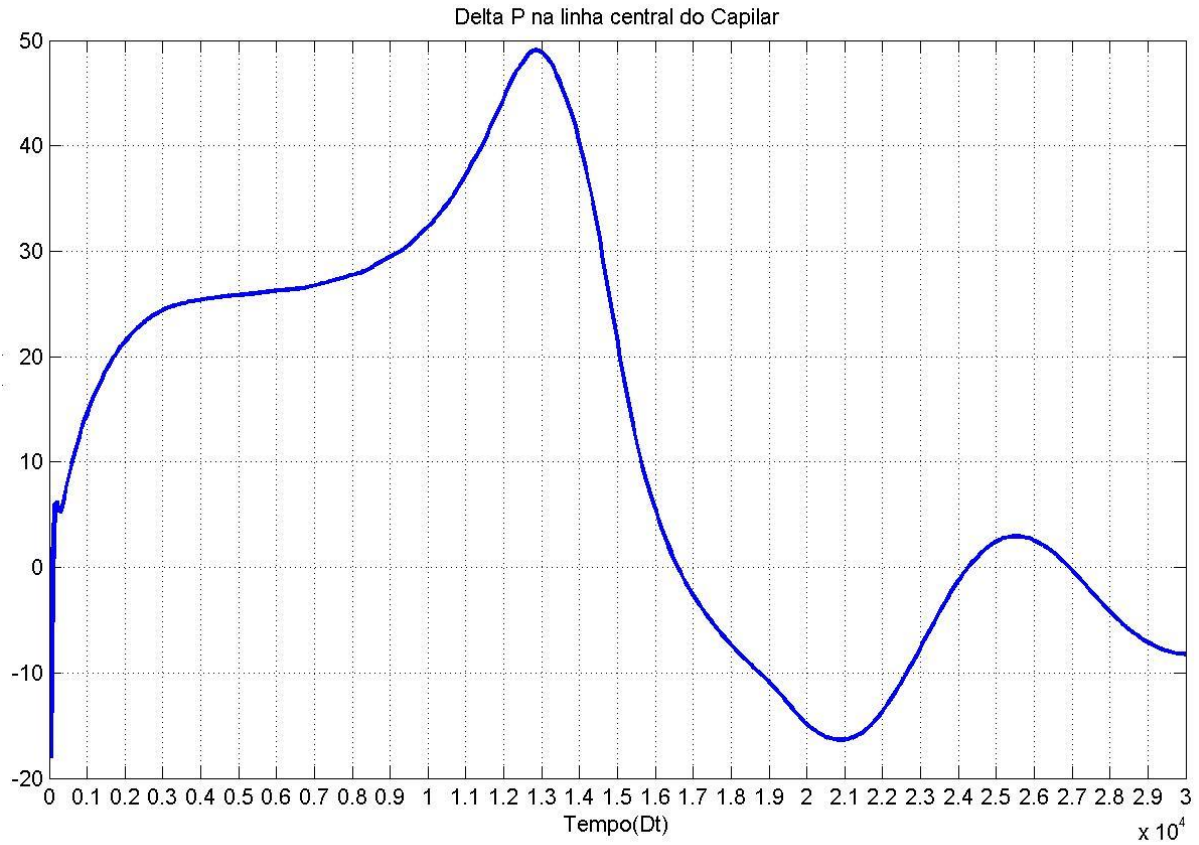


Figura 16: Queda de pressão na linha central da seção entre tempos 0 e 30.000 passos de tempo.

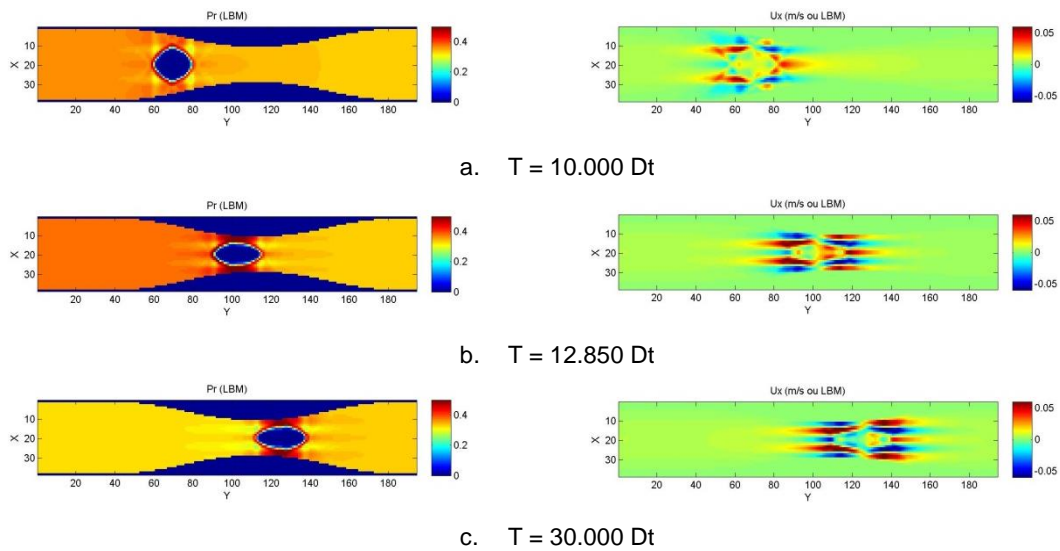


Figura 17: Campos de pressão da fase livre (R) e da velocidade u_x entre tempos 1 e 30.000 passos de tempo.

4.1.2.2.

Adequação do Número de Reynolds pela alteração da velocidade

A limitação identificada na representação da viscosidade utilizada por Roca-Reyes (2011) impõe uma diferença expressiva entre os números de Reynolds e de capilaridade utilizados neste estudo e no estudo de referência, conforme visto na Tabela 1. É apresentado o intervalo dos números de capilaridade reportados por Roca-Reyes (2011), utilizado nas simulações com número de capilaridade finito. A rotina de cálculo destes números adimensionais, em unidades de medida SI e LBM, é apresentada no Apêndice C.

Estudo	Presente Estudo	Roca-Reyes (2011)
Número de Reynolds	3,76 E-01	2,57 E-03
Número de Capilaridade	3,87 E-03	[0,026, 0,75]

Tabela 1: Números adimensionais utilizados no estudo atual e em Roca-Reyes (2011).

Para adequação do número de Reynolds, é reduzido o módulo da velocidade máxima do perfil parabólico imposta na seção de entrada. Entretanto, esta medida é responsável por um desajuste ainda maior nos números de capilaridade de ambos os estudos. Esta sensibilidade foi feita para verificar se o balanço entre forças inerciais e viscosas do sistema seria responsável pela assinatura da queda de pressão obtida.

Foram testados casos com redução da velocidade máxima do perfil parabólico a $0,1u_{x,max}^{original}$ e $0,01u_{x,max}^{original}$. Dado que a gota escoar mais lentamente, para economizar tempo de processamento, foi adotada a configuração de malha 144 x 38 x 1. Em ambos os casos, há estabilização do período transiente antes que a queda de pressão comece a ser afetada pela entrada da gota na restrição.

A Figura 18 mostra que o caso com velocidade $0,1u_{x,max}^{original}$ ainda apresenta queda de pressão negativa, o que não é físico. Não há queda de pressão negativa

no caso com velocidade $0,01u_{x,max}^{original}$ (Figura 19). Entretanto, a queda de pressão se aproxima assintoticamente de zero, nível inferior ao nível estabilizado após período transiente inicial. Há estagnação da gota na saída da restrição nos dois casos (Figuras 20 e 21).

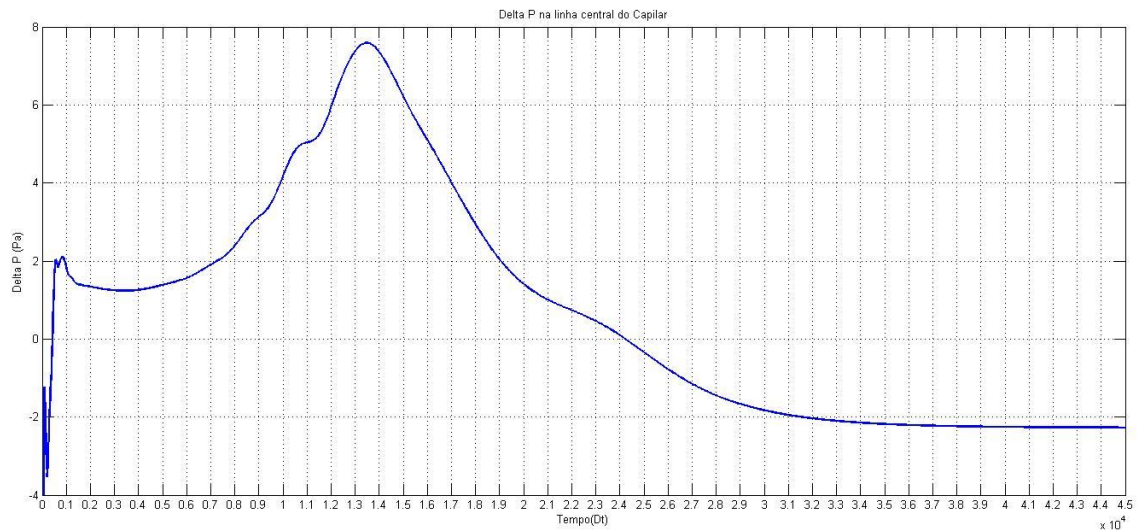


Figura 18: Queda de pressão na linha de simetria entre tempos 0 e 45.000 passos de tempo em simulação com velocidade reduzida a 10% da velocidade original.

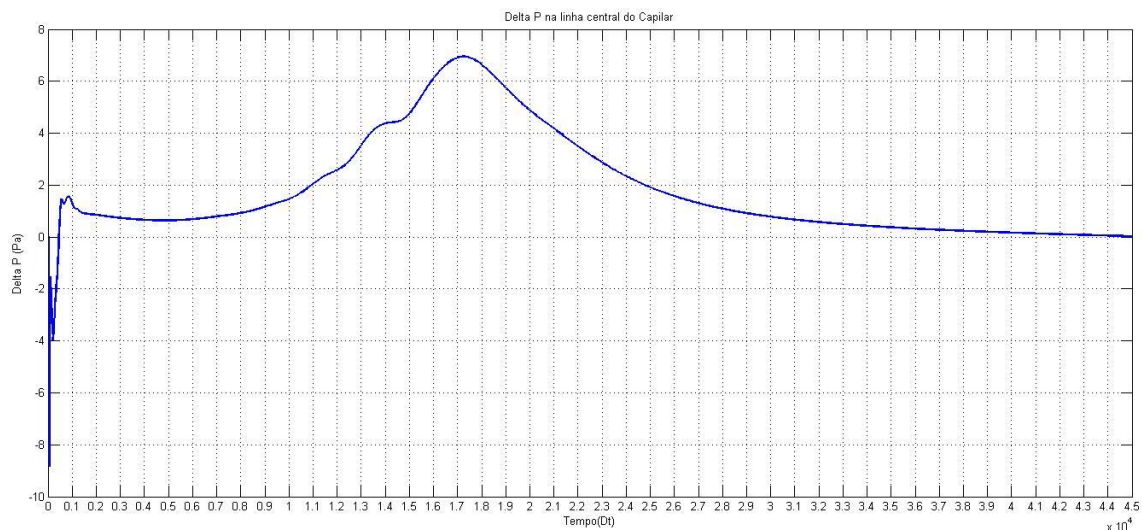


Figura 19: Queda de pressão na linha de simetria entre tempos 0 e 45.000 passos de tempo em simulação com velocidade reduzida a 1% da velocidade original.

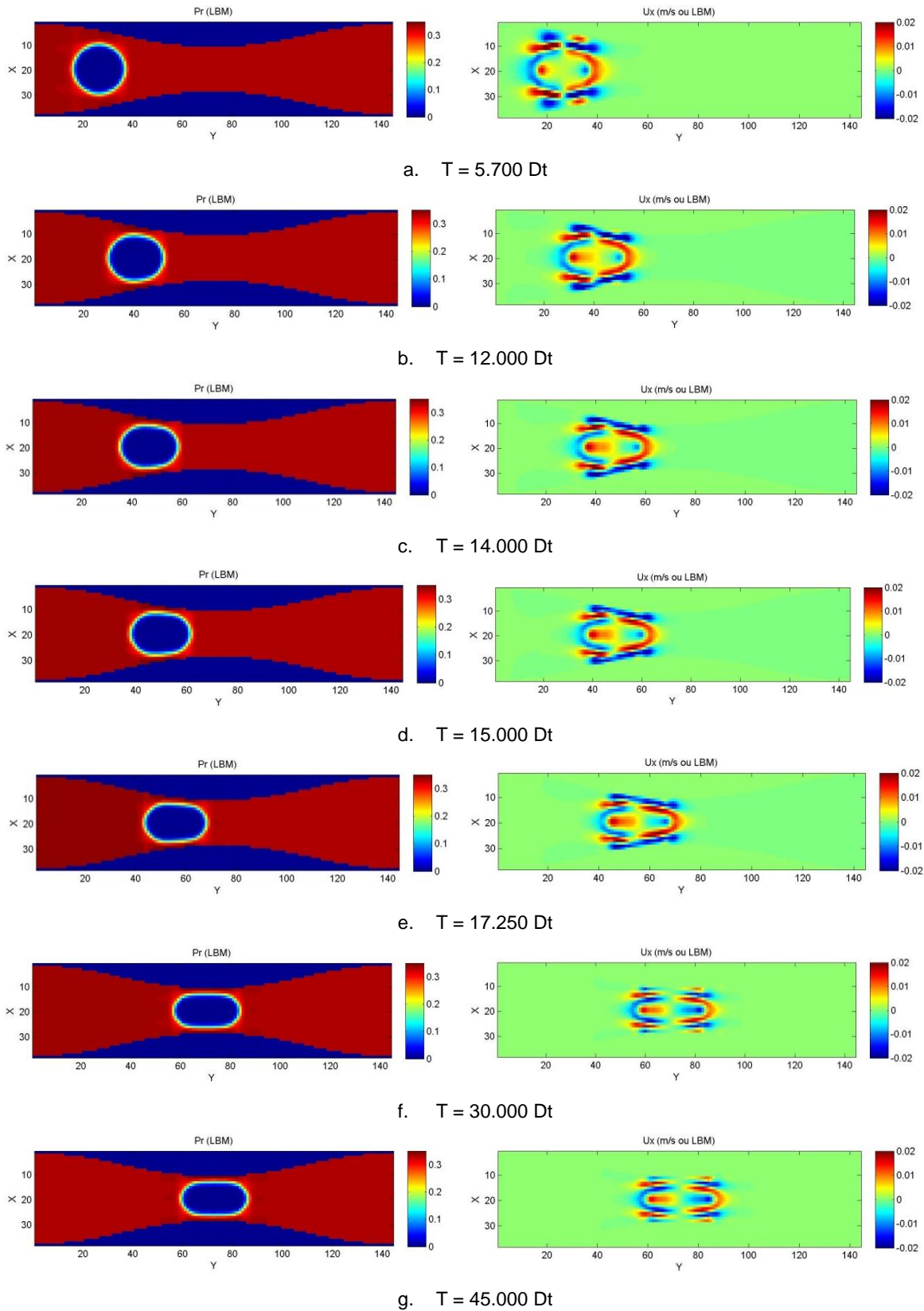


Figura 20: Distribuição de pressão da fase contínua (R) e velocidade u_x entre tempos 5.700 e 45.000 passos de tempo de simulação com velocidade reduzida a 1% da velocidade original.

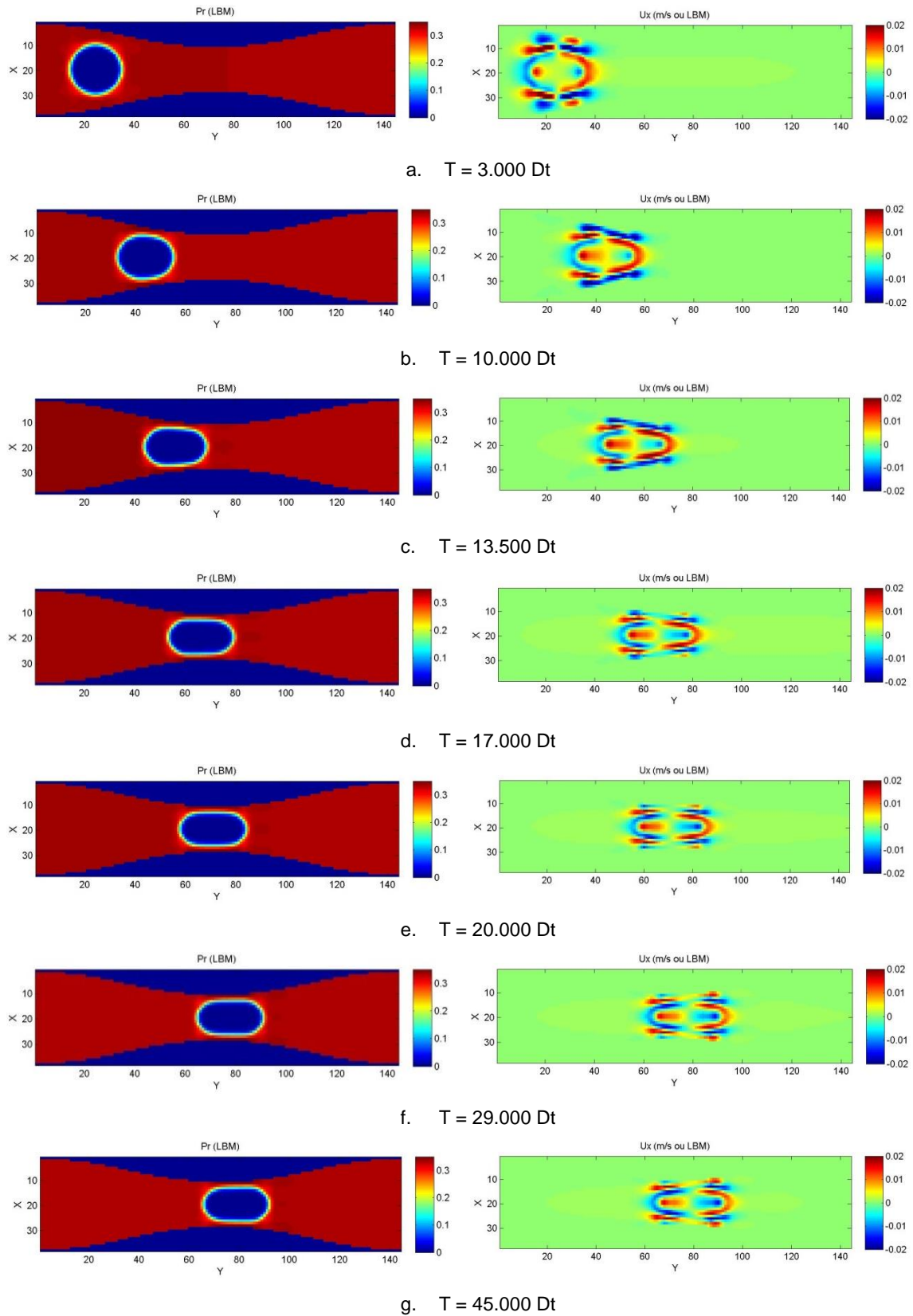


Figura 21: Distribuição de pressão da fase contínua (R) e velocidade u_x entre tempos 3.000 e 45.000 passos de tempo de simulação com velocidade reduzida a 10% da velocidade original.

4.1.2.3.

Adequação do Número de Capilaridade pela alteração da tensão interfacial e Sensibilidade à Tensão Interfacial

Conforme apresentado na Tabela 1, o número de capilaridade usado neste estudo é uma ou duas ordens de grandeza inferior aos números apresentados em Roca-Reyes (2011), causado também pela impossibilidade de se utilizar o mesmo valor de viscosidade.

Para se trabalhar com o mesmo balanço entre forças interfaciais e viscosas, foi feito um teste reduzindo a tensão interfacial a 10% do valor utilizado anteriormente, sem alterar a velocidade ($u_{x,max} = 0,005659 \text{ m/s}$). A alteração da tensão interfacial é feita pela modificação do parâmetro $A = A_R = A_B$.

Neste exercício, foi obtida uma assinatura de queda de pressão idêntica à observada no estudo de referência, conforme exposto na Figura 22. Não são observados valores de queda de pressão inferiores ao valor estabilizado após o período transiente inicial.

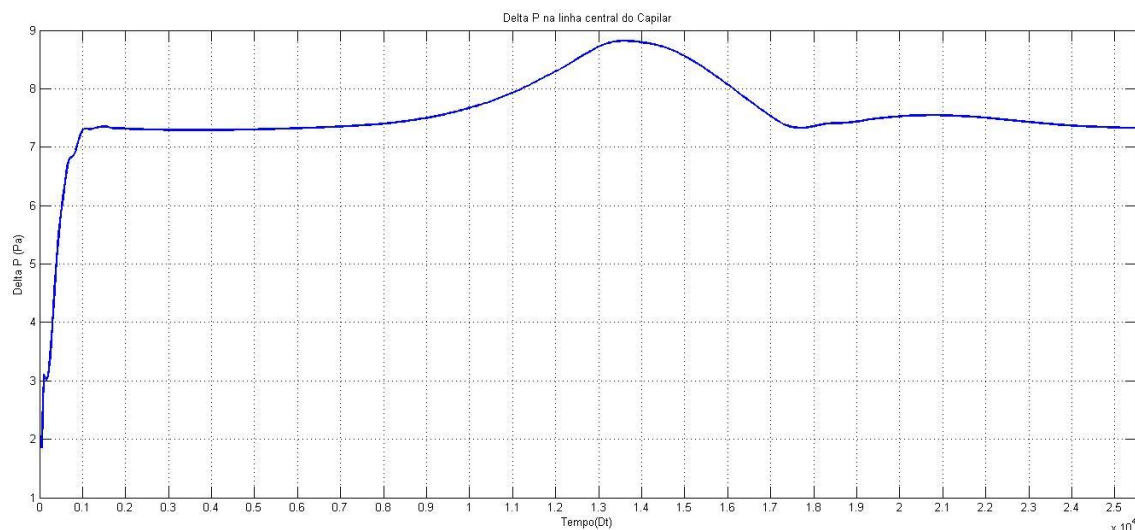


Figura 22: Queda de pressão na linha de simetria entre tempos 0 e 25.500 passos de tempo de simulação com tensão interfacial reduzida a 10% da original.

O fator redutor de mobilidade f obtido neste estudo foi de 0,84, muito próximo ao obtido no estudo de referência, que foi de 0,88 para condições de fluxo semelhantes. Os resultados não são totalmente comparáveis, pois os domínios de fluxo são diferentes: axissimétrico no estudo de referência e seção longitudinal de abertura δ_x entre placas com restrição neste estudo.

Apesar de estar apresentado em intervalo de pressões mais restrito na Figura 23, quando comparado aos gráficos apresentados para os estudos anteriores, não são observados os pontos de menor pressão nas quatro extremidades da gota, que estavam presentes nos exercícios anteriores.

Conforme discorrido anteriormente, estes pontos de menor pressão são causados pela imposição de força interfacial muito importante quando comparada às outras forças atuantes no sistema, que são as forças viscosas e inerciais.

Para verificar o efeito da magnitude da tensão interfacial no campo de pressão, foi realizada uma análise de sensibilidade variando a magnitude da tensão interfacial. Fora o caso já apresentado, com tensão interfacial reduzida, tentou-se realizar teste com tensão interfacial cinco vezes superior à tensão original. Este caso apresentou graves instabilidades numéricas em um intervalo de tempo simulado inferior a 50 passos de tempo.

Desta forma, realizou-se teste com tensão interfacial duas vezes superior à tensão original. Esta simulação não foi interrompida por instabilidades. Conforme esperado, apresentou a mesma assinatura de queda de pressão com valores inferiores ao valor estabilizado pós-transiente inicial (Figura 24).

Na Figura 25, é possível avaliar a importância da magnitude da tensão interfacial na geração da distorção do campo de pressão, representada pela região de menor pressão nas extremidades da gota.

Com esta sensibilidade, foi possível concluir sobre a importância da relevância das forças interfaciais em relação às demais forças atuantes no sistema, algo esperado para escoamento bifásico em contração-expansão com baixo número de Reynolds, que são as condições esperadas para o escoamento em meios porosos.

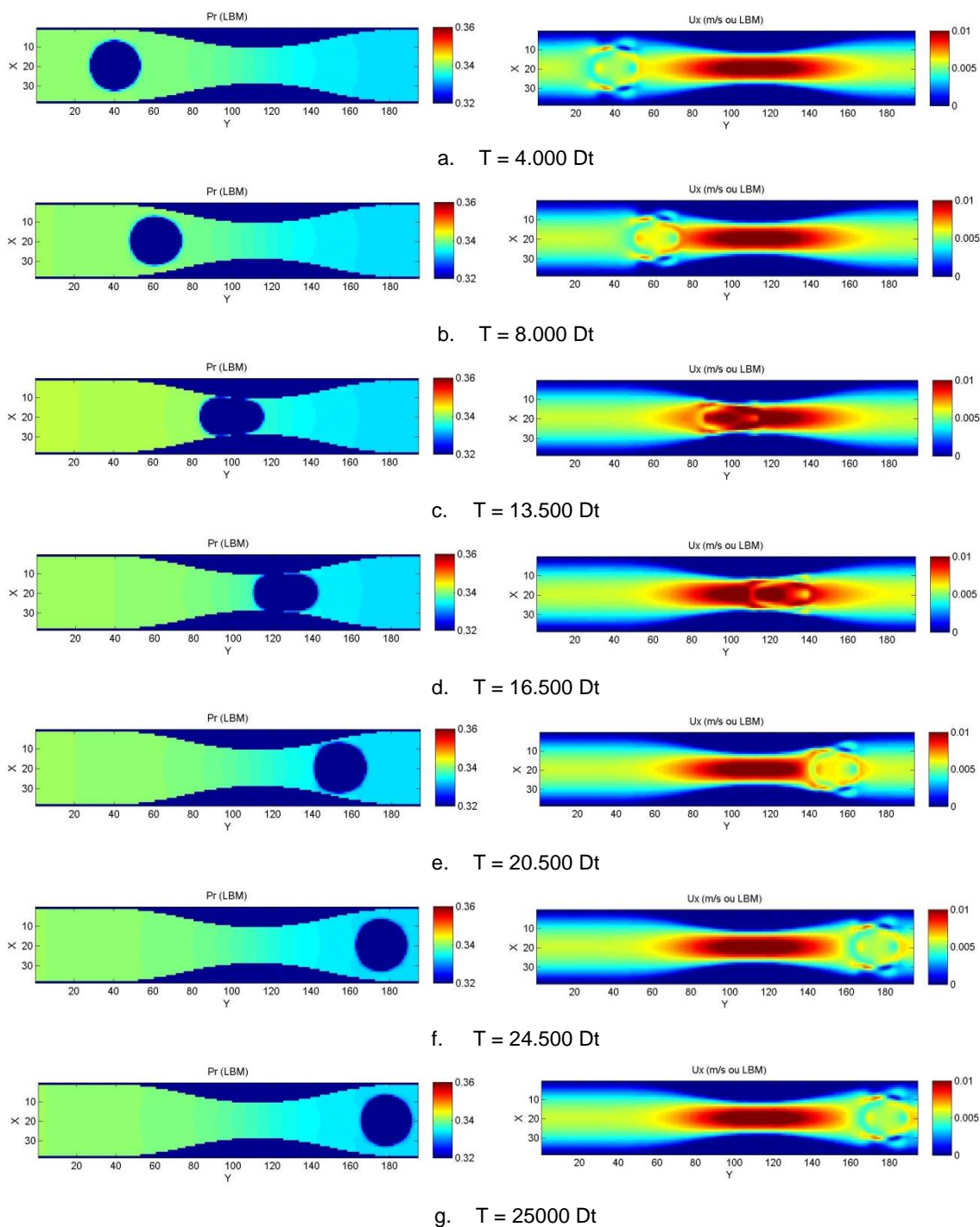


Figura 23: Distribuição de pressão da fase contínua (R) e velocidade u_x entre tempos 3.000 e 45.000 passos de tempo de simulação com tensão interfacial reduzida a 10% da original.

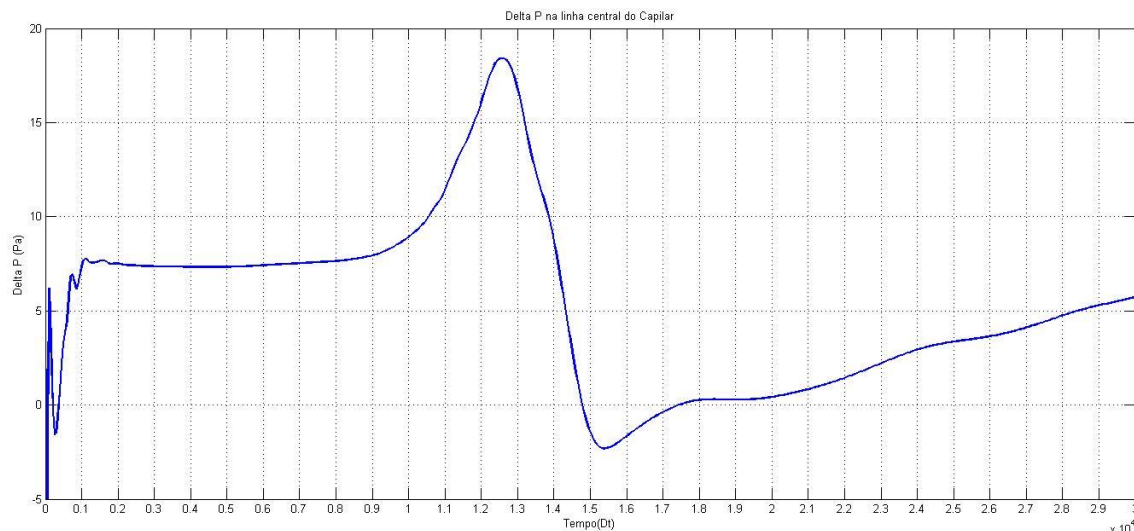


Figura 24: Queda de pressão na linha de simetria entre tempos 0 e 25.500 passos de tempo de simulação com tensão interfacial aumentada a 200% da original.

Uma tensão interfacial de alta magnitude afeta fortemente o escoamento, pois realiza força contrária à inserção da gota na restrição, pela oposição à deformação, e auxilia na saída da gota da restrição, pelo favorecimento ao restabelecimento da geometria esférica da gota.

Além disto, a tensão interfacial de alta magnitude aumenta a distorção do campo de pressão nas extremidades da gota. Para números de capilaridade inferiores a 0,0038, o método de Lattice-Boltzmann apresentou perturbações significativas no campo de pressão ao redor da gota.

Comparando os exemplos apresentados em 4.1.2.2 e 4.1.2.3, a imposição do mesmo número de capilaridade se mostrou mais importante do que a imposição do mesmo número de Reynolds para a obtenção da mesma assinatura de queda de pressão do estudo de referência.

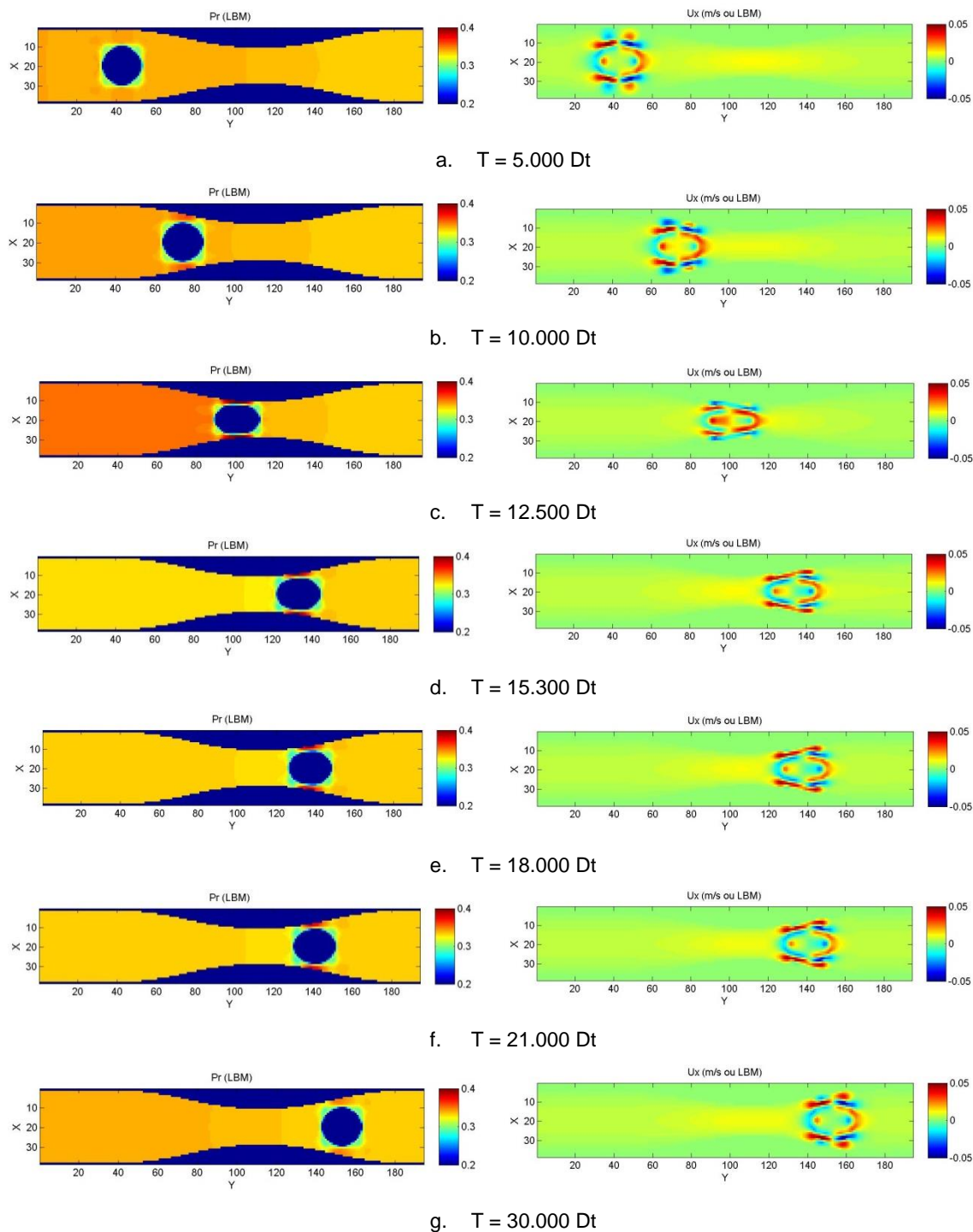


Figura 25: Distribuição de pressão da fase contínua (R) e da velocidade na direção u_x entre tempos 5.000 e 30.000 Dt de simulação com tensão interfacial aumentada a 200% da original.

4.1.2.4.

Sensibilidade ao parâmetro β

Conforme apresentado nas eqs. (18) e (19), o parâmetro β , pertencente ao operador de recoloração, é o parâmetro responsável pela segregação das fases e pela espessura da interface.

Visando verificar a influência deste parâmetro na resposta do escoamento e nas características da interface, fez-se uma análise de sensibilidade com alguns valores de β . Nas simulações anteriores, era utilizado o valor de $\beta = 1$.

Vale ressaltar que, por algum tempo, houve a suspeita de que estes pontos de menor pressão fossem os responsáveis pela queda de pressão a valores inferiores à queda de pressão obtida após o período transiente inicial, devido à propagação destes valores pela rede conforme a gota entrava na restrição.

A Figura 26 mostra que a variação deste parâmetro no intervalo testado não trouxe alterações significativas à assinatura da queda de pressão no escoamento.

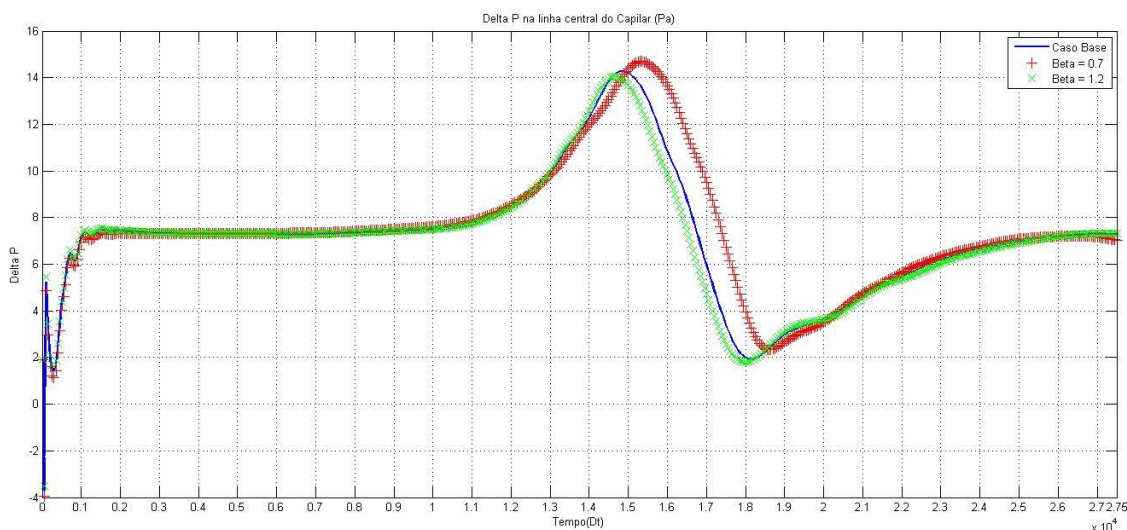


Figura 26: Queda de pressão na linha de simetria entre tempos 1 e 27.500 passos de tempo para caso base com $\beta = 1.0$ (Azul), $\beta = 0.7$ (Vermelho) e $\beta = 1.2$ (Verde).

Analisando a Figura 27, pode-se concluir que a adoção de um menor valor de β é responsável por uma menor distorção do campo de pressão nas extremidades da gota. Pode-se, também, concluir que este fenômeno não é o fator responsável pela obtenção de valores de queda de pressão inferiores ao valor obtido após o período transiente inicial.

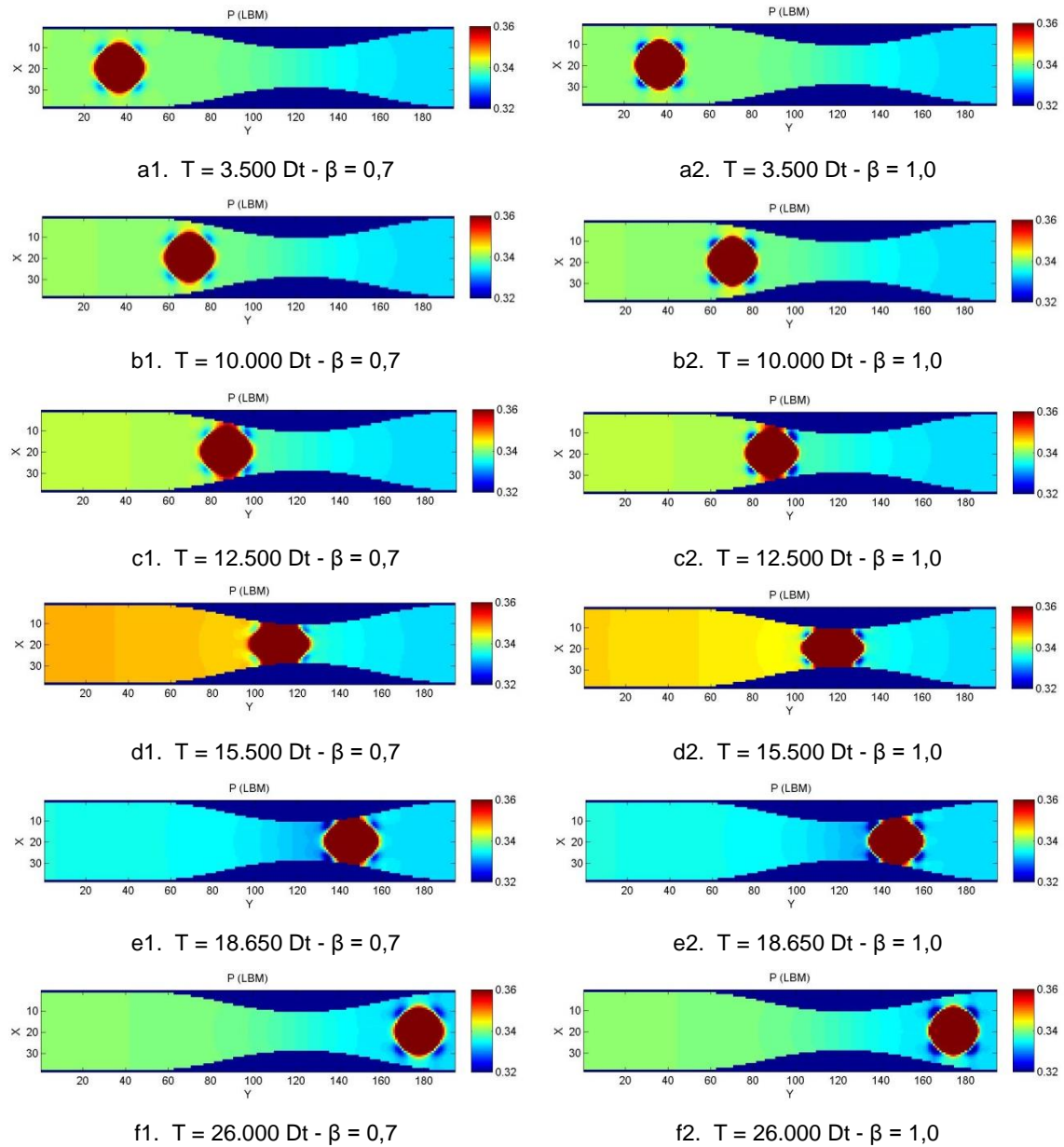


Figura 27: Distribuição de pressão total do fluido entre tempos 3.500 e 26.000 passos de tempo para casos com $\beta = 0,7$ (esquerda) e com $\beta = 1,0$ (direita).

Analisando a espessura e a morfologia da interface na Figura 28, verifica-se

que a interface é mais espessa quando β é menor. Além disso, a distribuição dos fluidos na interface é menos comprometida por efeitos de orientação de *grid*, assumindo um formato circular mais perfeito neste caso.

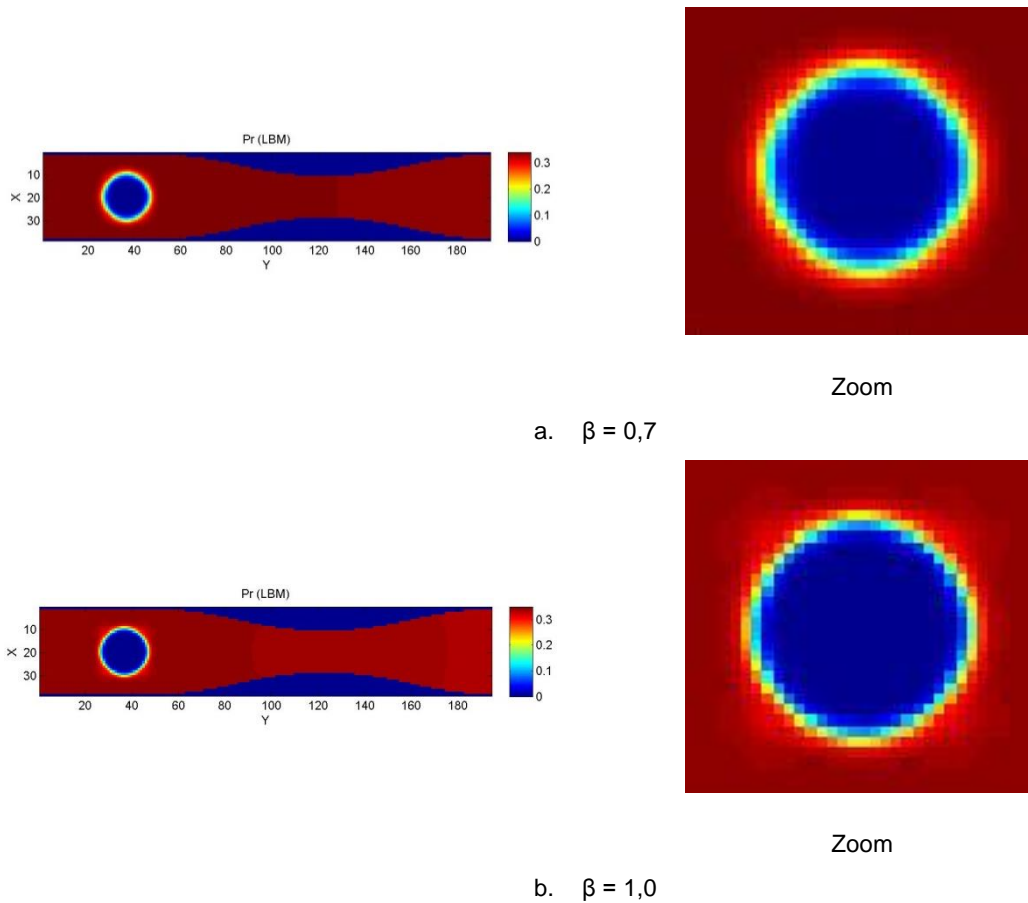


Figura 28: Distribuição da pressão na fase contínua no tempo 3.500 passos de tempo para casos com $\beta = 0,7$ (a.) e $\beta = 1,0$ (b.).

4.1.3.

Otimização do algoritmo em MATLAB

O esforço para diminuir o tempo de processamento das simulações MATLAB foi feito basicamente pela eliminação de *loops*, possível graças à

vetorização do código e pela adoção de rotinas MATLAB

As alterações foram realizadas de forma gradual, com validação de cada etapa. Primeiramente, focou-se na conversão de modelo de escoamento monofásico em tubo reto, não se alterando, portanto, partes da rotina relacionadas com escoamento bifásico. Nesta etapa, analisando somente os primeiros 50 passos de tempo, obteve-se um algoritmo 6,28 vezes mais rápido – 9,4 s – do que o algoritmo original - 58,9 s.

Todos os exercícios realizados na seção 4.1.3. foram efetuados em um notebook Intel Core i7-2670QM, CPU com *clock* de 2,2 GHz e 8 GB de RAM.

Nesta primeira etapa da otimização, os passos realizados foram:

- Reorganização dos dados de entrada, alteração da estrutura das matrizes, modificação dos algoritmos de cálculo de variáveis macroscópicas e de inserção de condições de contorno da saída, com retirada de *loops*, cálculo direto com vetores e uso de funções MATLAB. Estas mudanças foram responsáveis por redução de 70,12% no tempo de simulação (17,6 s);
- Modificação do cálculo da função de equilíbrio e do operador colisão, responsável por redução total no tempo de simulação de 83,53% (9,7 s);
- Modificação do cálculo do gradiente na etapa de colisão, responsável por redução total no tempo de simulação de 84,09% (9,4 s).

Não foi possível retirar o *loop* da etapa de propagação sem haver introdução de erro expressivo nos resultados. Desta forma, esta parte da rotina não foi alterada.

Em sequência, analisou-se o algoritmo otimizado, obtido na etapa anterior, em simulação de escoamento monofásico com geometria restrita (tempo de simulação de 45,3 s em 50 passos de tempo). A redução total do tempo de simulação foi de 83,11% (7,7 s). Com a retirada dos *loops* de inicialização do tubo restrito e da molhabilidade, continuou-se obtendo redução de 83,08% (7,7 s). O

algoritmo roda 5,9 vezes mais rápido do que o algoritmo original.

Analisando o algoritmo acima em escoamento bifásico com geometria restrita (78,8 s em 50 passos de tempo), a redução de tempo foi de 74,37% (20,2 s). Ao se retirar os *loops* de cálculo bifásico e para localização da gota, a redução total no tempo de simulação foi de 81,78% (14,4 s).

A versão final do algoritmo otimizado foi testada em simulação de 30.000 passos de tempo. Todas as propriedades geradas nesta simulação foram comparadas com as propriedades geradas em simulação de 30.000 passos de tempo utilizando o algoritmo MATLAB original, o qual levava 80.455s ou 22 horas e 21 minutos.

A máxima diferença observada em todas as propriedades sempre foi inferior a $1E-12$ no tempo simulado. A redução total no tempo de simulação foi de 93,87% (4.928 s ou 1 hora e 22 minutos). Apesar deste benefício, mostrou-se inviável trabalhar com domínios de fluxo tridimensionais em tempo aceitável utilizando o código otimizado. Optou-se, desta forma, por continuar o trabalho utilizando código em C++. A mesma simulação com 30.000 passos de tempo na linguagem C++ levou 496 s ou 8 minutos e 16 segundos.

4.2.

Simulações de domínios tridimensionais

4.2.2.

Escoamento monofásico

Após ter feito a validação do algoritmo na geometria 2D, prosseguiu-se com a verificação de o algoritmo representar com acurácia o escoamento monofásico

no capilar, caso que também apresenta solução analítica. O máximo Ma testado é de 0,0098.

4.2.2.1.

Capilar reto

A condição de contorno testada é de velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída.

Trabalhou-se, nesta etapa de validação, com um capilar de dimensões $R_{capilar} = 0,05 \text{ mm}$ e $L = 1 \text{ mm}$. Para se trabalhar com mesmo tamanho característico da malha nas direções x, y e z, ou seja, $\delta_x = \delta_y = \delta_z$, foi necessário alterar a discretização da malha utilizada na seção 4.1. Desta forma, a malha utilizada nestas simulações possui as dimensões 300 x 32 x 32. Destes 32 elementos nas direções y e z, somente 30 elementos estão abertos ao fluxo, sendo os outros dois elementos constituintes da parede. Os tamanhos característicos desta malha são iguais a $\delta_x = \delta_y = \delta_z = 3,33E - 06 \text{ m}$.

Foram estudados casos que apresentam números de Reynolds entre 0,14 e 0,56, os quais apresentam, respectivamente, velocidades máximas do perfil de velocidades entre 0,001415 m/s (vazão 0,02 ml/h) e 0,005659 m/s (vazão 0,08 ml/h). A viscosidade e a massa específica do fluido são, respectivamente, de 0,001004 Pa.s e de 1000 kg/m³.

Para 30.000 passos de tempo simulados, esta condição de contorno testada apresentou excelente desempenho, fornecendo desvios em relação à resposta analítica entre 0,17% e 1,51%. Os resultados são expostos na Figura 33, a qual se encontra na seção 4.2.2.2.

A condição de contorno com velocidade imposta na entrada e na saída, que

não é usualmente aplicada em problemas de CFD, chegou a ser testada. Esta condição de contorno apresentou maiores desvios com relação à resposta analítica do que a condição de contorno com velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída.

Para 10.000 passos de tempo e o mesmo intervalo de números de Reynolds, a condição de contorno com velocidade imposta na entrada e na saída apresentou desvios entre 2,19% e 2,45%, enquanto que a condição de contorno com velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída apresentou desvios entre 0,25% e 1,77%.

A condição de contorno de velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída foi adotada nos estudos posteriores.

Observa-se que a oscilação presente no transiente inicial das simulações 2D não é observado nas simulações 3D com velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída (Figura 29).

A hipótese para tal fenômeno é que a terceira dimensão participa como um amortecedor nas etapas de colisão e propagação, tornando o equilíbrio mais rápido. A amarração da pressão em um dos contornos também facilita o equilíbrio do sistema.

A seguir, são apresentados os resultados específicos para a simulação com velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída e com $u_{x,máximo} = 0.005659 \text{ m/s}$, caso que apresenta $Ma = 0,0098$.

Conforme pode se observar na Figura 30, apesar de não recuperar exatamente o perfil de velocidade introduzido na face de entrada em todas as seções, observa-se que a simulação apresenta resultados muito próximos ao esperado.

Para inferir convergência ao regime permanente, foram adotadas as métricas de regime permanente de pressão e quantidade de movimento expostas no Apêndice D.

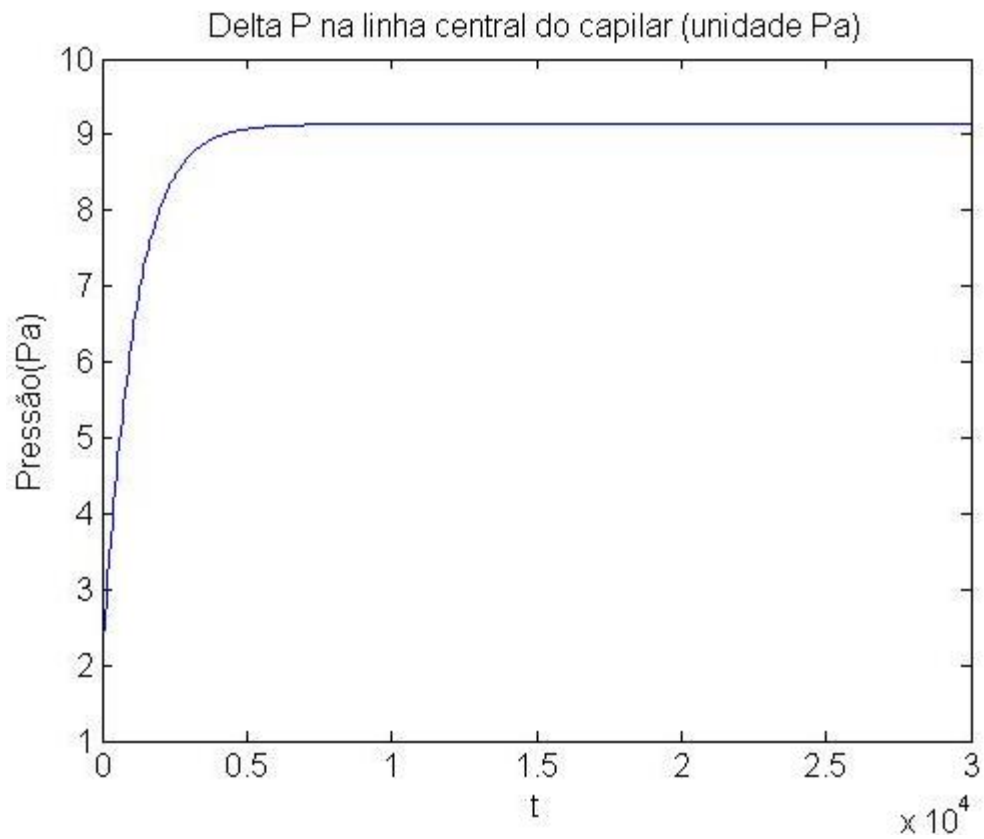


Figura 29: Diferencial de pressão na linha central do capilar durante o tempo simulado com velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída.

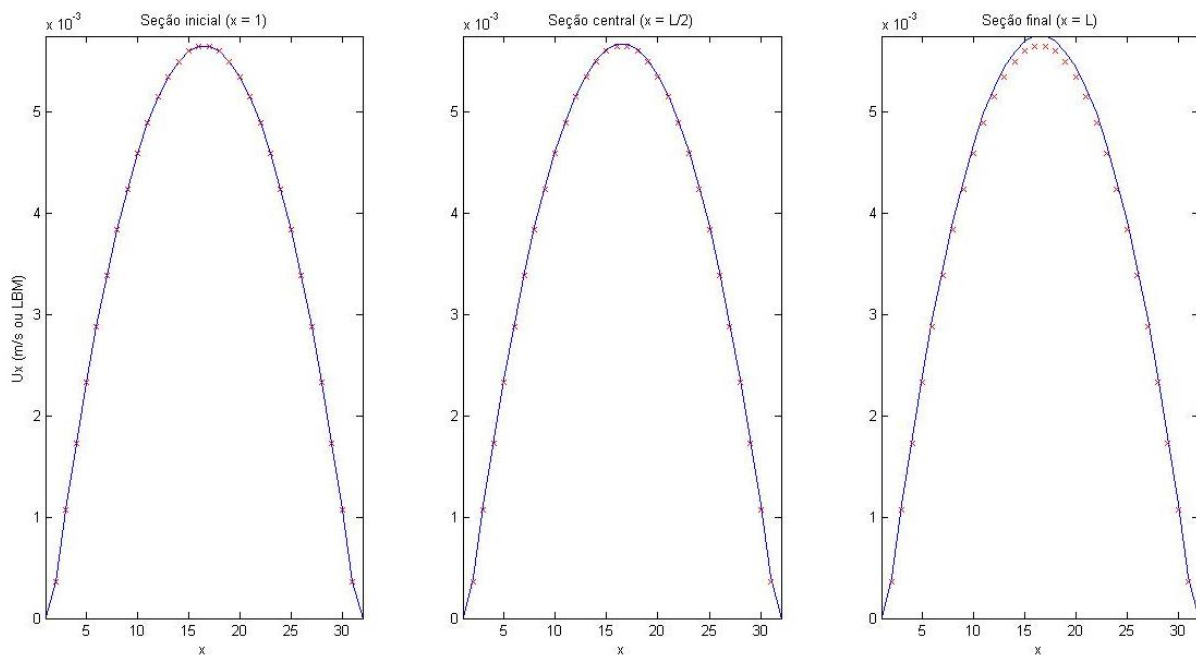


Figura 30: Velocidade imposta na face de entrada (marcadores vermelhos) e velocidade simulada (linha azul) nas faces de entrada, central e de saída.

A métrica de quantidade de movimento apresenta valor final de $9,5E-09$ em $t = 30.000$ passos de tempo (Figura 31). A métrica de pressão apresenta valor final nulo, apresentado a partir de $t = 15.000$ passos de tempo (Figura 32).

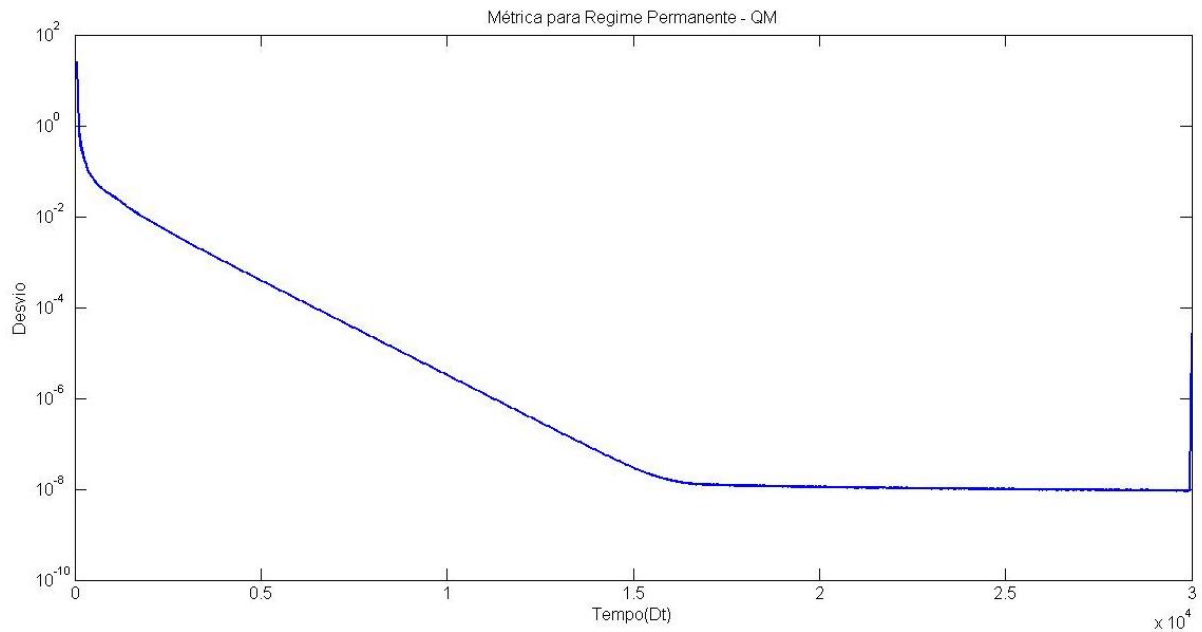


Figura 31: Evolução da métrica de regime permanente de Quantidade de Movimento com tempo.

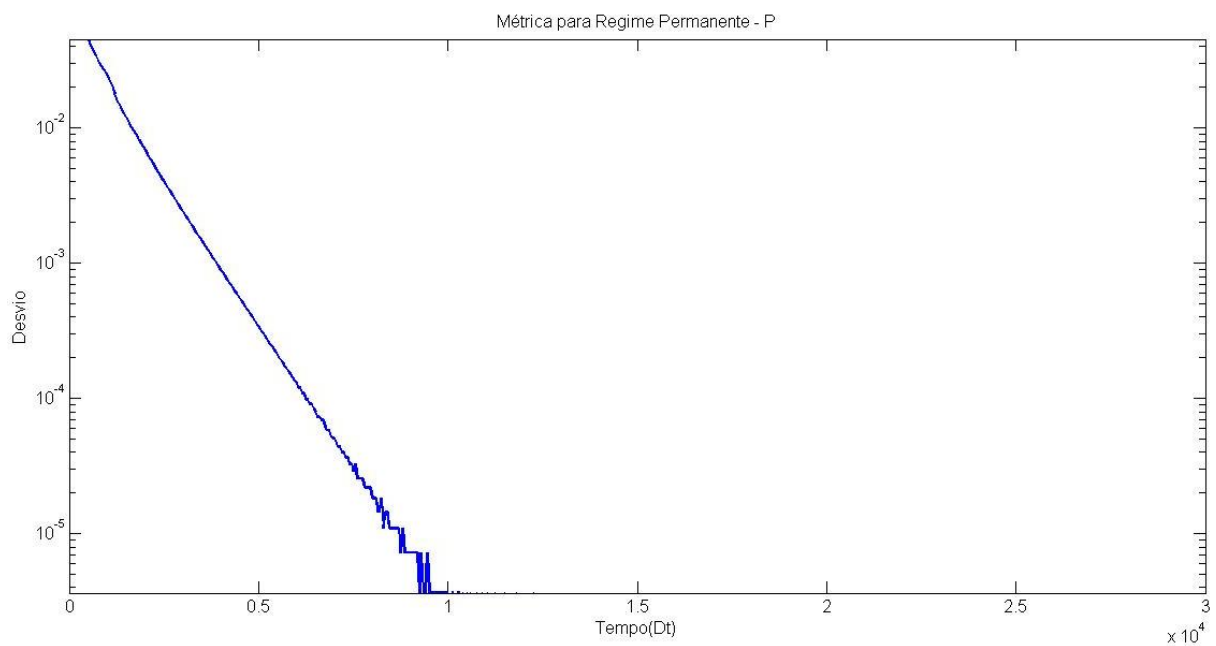


Figura 32: Evolução da métrica de regime permanente de Pressão com tempo.

4.2.2.2.

Discretização da malha

Ainda usando o domínio de fluxo reto com dimensões $R_{capilar} = 0,05 \text{ mm}$ e $L = 1 \text{ mm}$, fez-se um teste adicional com uma malha de dimensão $360 \times 38 \times 38$. Esta nova malha apresenta tamanhos característicos $\delta_x = 2,78 E - 06 \text{ m} = \delta_y = \delta_z$. A malha anterior apresentava dimensão $300 \times 32 \times 32$ e tamanhos característicos $\delta_x = \delta_y = \delta_z = 3,33 E - 06 \text{ m}$. As condições de contorno de velocidade imposta na entrada e de pressão imposta na saída foram utilizadas.

Como o tempo de relaxação é calculado com base na viscosidade cinemática e nos tamanhos característicos da malha, a adoção de uma discretização de malha diferente é acompanhada pela introdução de um tempo de relaxação específico para esta configuração. Os tempos de relaxação das malhas de dimensões $300 \times 32 \times 32$ e $360 \times 38 \times 38$ são de, respectivamente, 1,4036 e 1,5843.

Com a introdução de malhas com discretização mais refinada, é esperado haver maior acurácia na simulação. Entretanto, no caso do Lattice-Boltzmann, a introdução de elementos de rede com menor dimensão contribui, conforme visto acima, para a obtenção de tempos de relaxação ligeiramente maiores. Conforme já discutido, a acurácia do método diminui quando os tempos de relaxação se afastam do valor unitário. Desta forma, esta afirmação não pode ser feita automaticamente, o que pode ser observado nos resultados para 30.000 passos de tempo apresentados na Figura 33. Vale ressaltar que ambas as malhas foram bem projetadas, uma vez que o tamanho característico da malha é da ordem de $1 \mu\text{m}$.

Em todos os casos, a velocidade máxima do escoamento ficou restrita a $0,005659 \text{ m/s}$. Para a malha $360 \times 38 \times 38$, conforme a velocidade aumenta, aumenta-se o desvio da solução em comparação com a relação analítica. Para este domínio de fluxo simulado, a malha $300 \times 32 \times 32$ se mostra mais adequada à simulação para maiores velocidades, devido ao menor desgaste numérico introduzido no método com a adoção de um tempo de relaxação menor. Pode-se

notar, no entanto, que esta discretização oferece um mínimo local, voltando o erro a crescer para velocidades maiores. Como os desvios estão restritos a 2,28%, ambas as discretizações se mostram adequadas ao estudo que se pretende realizar.

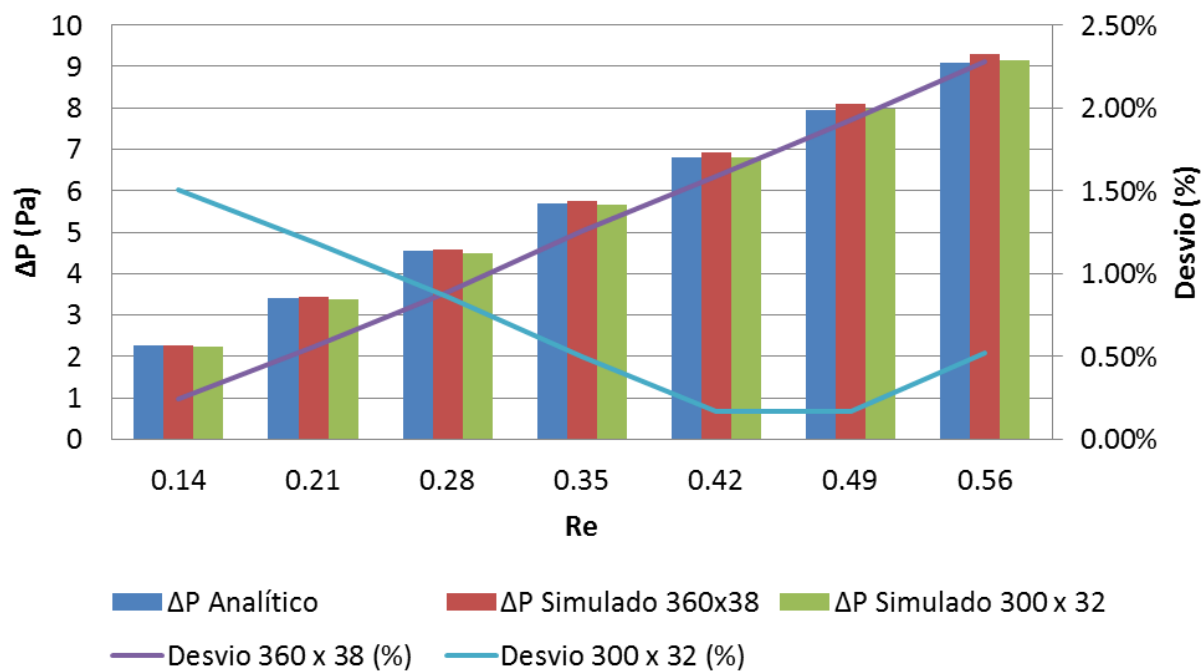


Figura 33: Queda de pressão analítica (azul), simulada com malha 360 x 38 x 38 (vermelho) e simulada com malha 300 x 32 x 32 (verde), juntamente com desvio percentual em relação à solução analítica das malhas de 360 x 38 x 38 (linha roxa) e de 300 x 32 x 32 (linha azul).

Por fim, realizou-se um teste utilizando um domínio de fluxo de comprimento $L = 0,4 \text{ mm}$, mantendo $R_{capilar} = 0,05 \text{ mm}$, que será adotado posteriormente nos testes bifásicos. A malha utilizada contém $144 \times 38 \times 38$ elementos com tamanho característico $\delta_x = \delta_y = \delta_z = 2,78 E - 06 \text{ m}$.

Conforme pode se observar na Figura 34, no intervalo de números de Reynolds testado, a simulação reproduz com alto grau de fidelidade a resposta analítica, apresentando desvios entre 0,63% e 0,82%. Este desvio de 0,82% foi obtido para $Re = 0,14$ e $u_{x,max} = 0,001415 \text{ m/s}$.

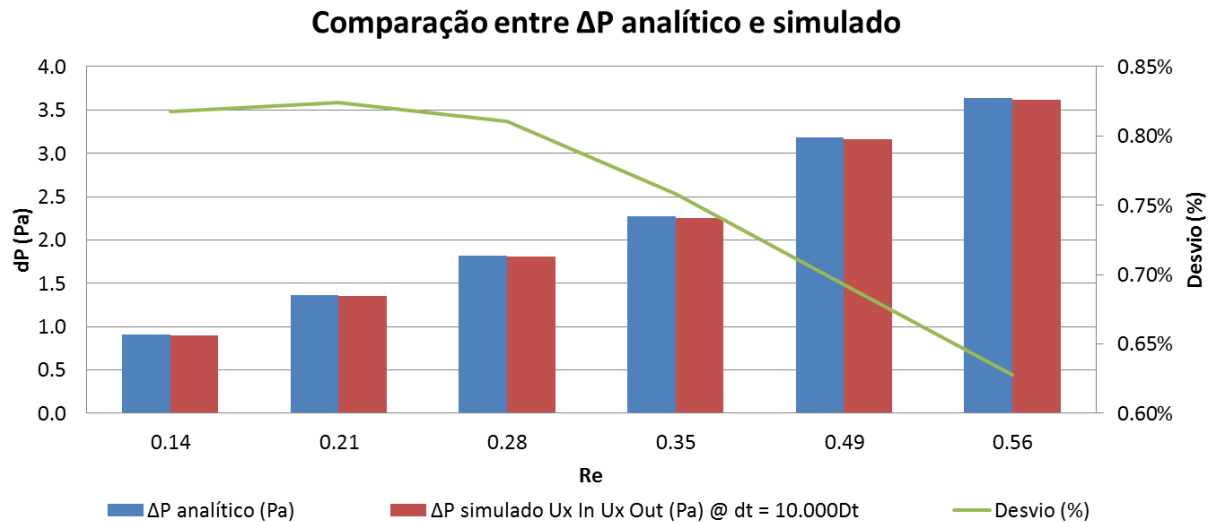


Figura 34: Queda de pressão analítica (azul) e simulada (vermelha) em 10.000 passos de tempo, juntamente com desvio (linha verde).

4.2.2.3.

Capilares restritos

Foram realizados testes com duas geometrias de capilares restritos, que também foram analisados por Roca-Reyes (2011). Como o programa parametrizado recebe como entrada o raio de curvatura do tubo, além do comprimento e dos raios do capilar e da garganta, calculou-se o raio de curvatura dos casos testados em uma planilha dedicada. Para tanto, considera-se que todos os arcos que compõem o capilar restrito apresentam o mesmo raio de curvatura e se tangenciam nos pontos de interseção dos arcos, $x = 25 \mu m$ e $x = 75 \mu m$.

As geometrias de capilar restrito testadas são:

- Comprimento $l = 1 mm$, diâmetro de garganta $50 \mu m$, diâmetro de capilar $100 \mu m$ e raio de curvatura $0.00250625 m$; e
- Comprimento $l = 1 mm$, diâmetro de garganta $50 \mu m$, diâmetro de capilar $200 \mu m$ e raio de curvatura $0.000852083333333333 m$.

As malhas utilizadas para simular estes casos contam, respectivamente, com $300 \times 32 \times 32$ e $300 \times 62 \times 62$ elementos de rede. A dimensão do elemento de rede utilizado é de $\delta_x = 3.33E - 06 \text{ m}$ e o tempo de relaxação é de 1.4036.

Com exceção de não apresentar a mesma magnitude de queda de pressão, o que é explicado pelo fato de não se utilizar a mesma viscosidade do fluido livre, o comportamento apresentado na Figura 35 é exatamente o mesmo observado em Roca-Reyes (2011). O crescimento da queda de pressão é linear com a vazão. Além disso, para uma mesma vazão, a perda de carga no escoamento através de capilar restrito é maior do que através de capilar reto.

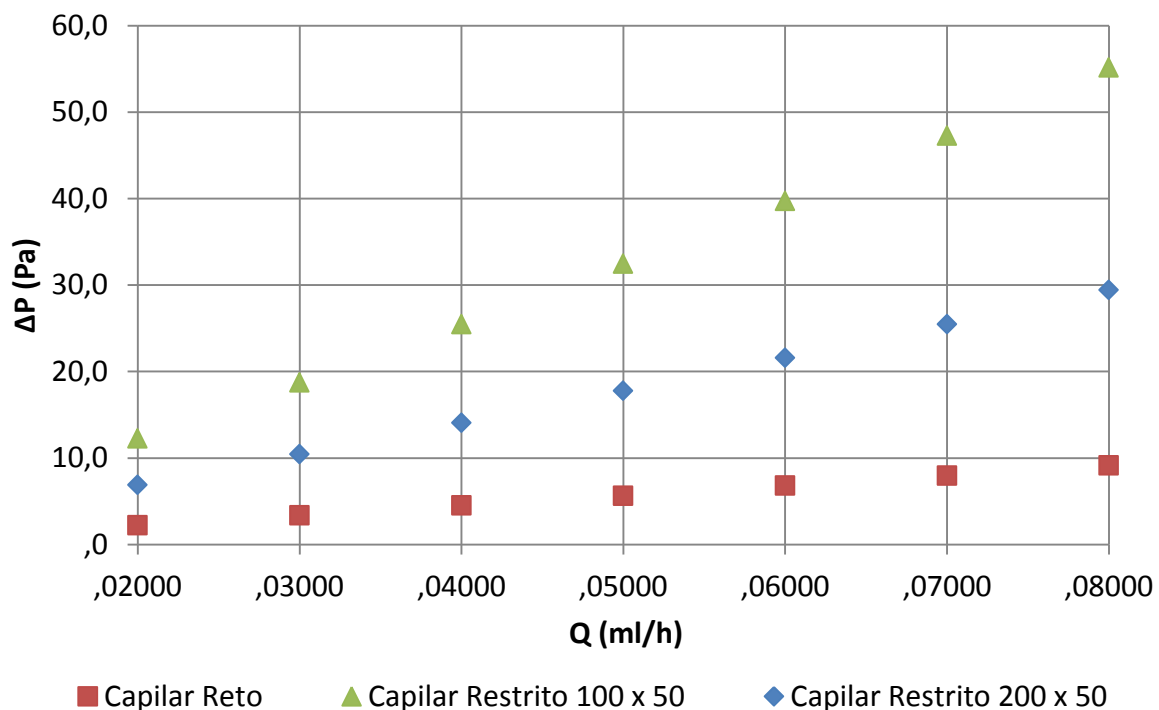


Figura 35: Quedas de pressão no escoamento obtidas em simulações com capilares reto (vermelho), restrito com diâmetro de capilar $100\mu\text{m}$ (verde) e restrito com diâmetro de capilar $200\mu\text{m}$ (azul).

Para validar que a queda de pressão simulada estava correta, calculou-se o raio equivalente do capilar restrito para, então, se calcular a queda de pressão

analítica pela lei de Poiseuille.

O raio equivalente do capilar restrito, r_{eq} , é calculado como na eq. (25).

$$\frac{L}{(r_{eq})^4} = \int_0^L \frac{dz}{[R(z)]^4} \quad (25)$$

Desta forma, em unidade LBM, o raio equivalente dos capilares testados é de 9.84209296125011 elementos de rede e 11.3519328993794 elementos de rede, respectivamente para os capilares com diâmetro de capilar $100\mu m$ e $200\mu m$.

Conforme pode ser observado nas Figuras 36 e 37, o desvio com relação à solução analítica cresce conforme se aumenta o Reynolds. Entretanto, apesar de apresentarem maiores desvios, os resultados obtidos são excelentes avaliações, dada a aproximação no cálculo da queda de pressão analítica utilizando um raio equivalente.

O desvio apresentado para o capilar com diâmetro $100\mu m$ fica entre 0,06% e 11,10%. O desvio percentual de 0,06% foi obtido para $Re = 0,14$ e $u_{x,max} = 0,001415\text{ m/s}$. Já para o capilar com diâmetro $200\mu m$, o desvio fica entre 0,36% e 5,82%.

Apesar de as Figuras 36 e 37 apresentarem resultados para números de Reynolds diferentes, em ambos os casos se trabalhou com a mesma faixa de vazões, [0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06, 0.07, 0.08] ml/h.

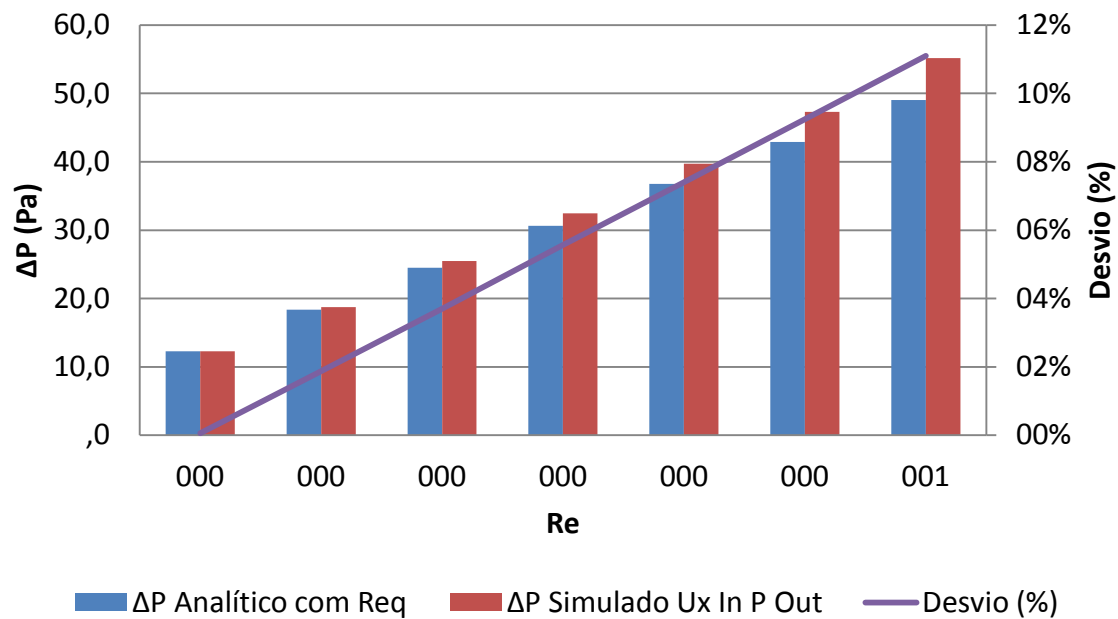


Figura 36: Quedas de pressão analítica (azul) e simulada (vermelho) para capilar restrito com diâmetro de capilar $100\mu\text{m}$, juntamente com desvio (roxo).

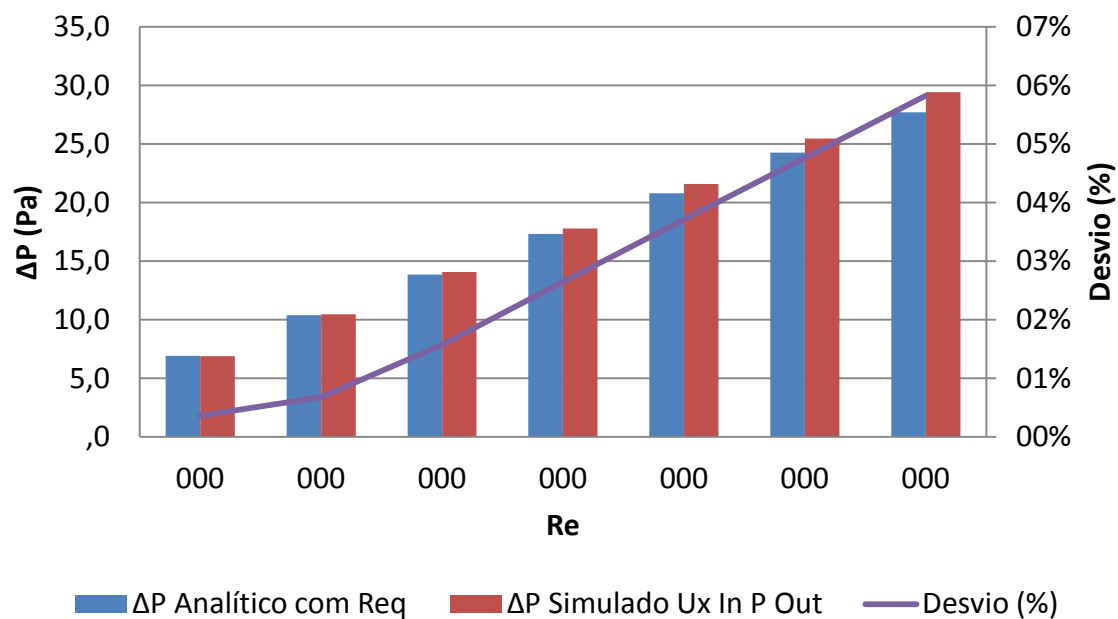


Figura 37: Quedas de pressão analítica (azul) e simulada (vermelho) para capilar restrito com diâmetro de capilar $200\mu\text{m}$, juntamente com desvio (roxo).

4.2.2.4.

Alternativas testadas para a imposição de maiores viscosidades

Visando realizar testes com os mesmos parâmetros utilizados por Roca-Reyes (2011), buscou-se impor viscosidade mais alta na fase livre: viscosidade dinâmica de 0,11 Pa.s e viscosidade cinemática de $1,1E-04 \text{ m}^2/\text{s}$.

O primeiro ensaio realizado foi de alterar diretamente o parâmetro τ , trabalhando com a geometria de capilar reto com comprimento 0,001 m e diâmetro 0,0001 m, usando a mesma discretização de malha, $300 \times 32 \times 32$, com tamanho característico da malha de $\delta_x = 3,33E - 06 \text{ m}$. Nestas condições, τ assume o elevado valor de 99.5.

Apesar de se verificar uma tendência de estabilização na queda de pressão (Figura 38), não se observa uma boa transmissão das condições impostas nos contornos ao centro do domínio testado (Figura 39).

A não propagação das distribuições se deve ao fato da baixa efetividade do operador colisão com um alto valor de τ . Desta forma, a tendência é haver pouca alteração das distribuições iniciais.

Ao se fixar um τ máximo de 1.5, próximo aos valores que se vinha utilizando, faz-se necessário alterar a discretização da malha. Para este valor de τ , os tamanhos característicos seriam de $\delta_x = 3,30E - 04 \text{ m}$ e $\delta_t = 3,30E - 04 \text{ s}$. Com isto, a malha teria as dimensões $n_x = 3$, $n_y = n_z = 2,3$ (contabilizando os dois elementos da parede). Uma malha desta dimensão não é aceitável. Da mesma forma, o tamanho característico espacial obtido não é da mesma ordem de grandeza recomendada, que é de $1\mu\text{m}$ (Mohamad, 2011).

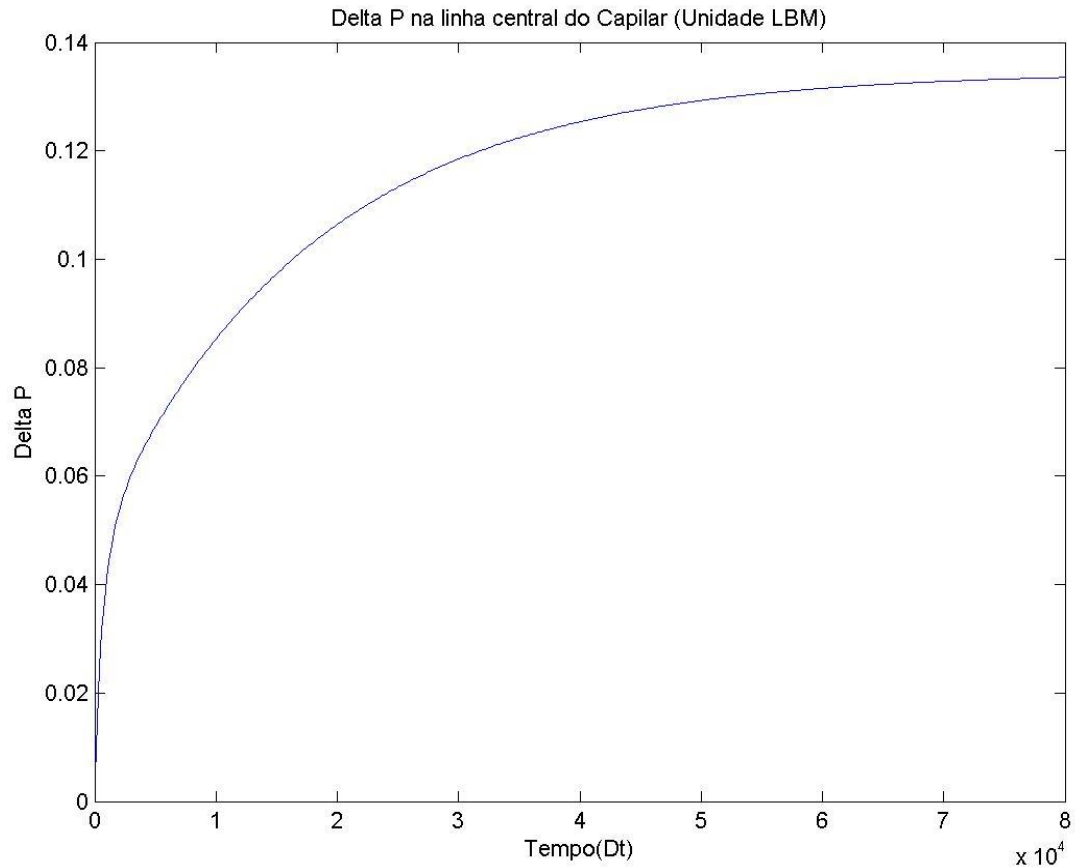


Figura 38: Queda de pressão no escoamento durante tempo simulado.

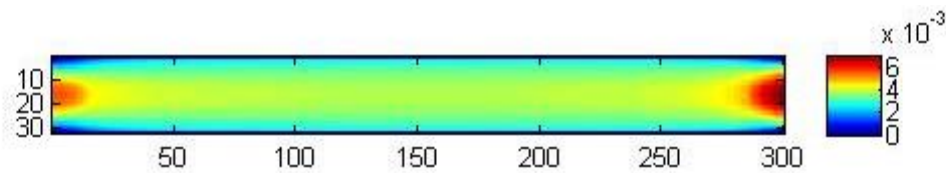


Figura 39: Distribuição de velocidade u_x na seção $z = nz/2$ no tempo final de simulação ($t = 80.000 \delta_t$).

Esta alternativa foi, portanto, desconsiderada. Partiu-se para o estudo utilizando mesmos números adimensionais utilizados em Roca-Reyes (2011), apresentado em 4.2.3.1.

4.2.3.

Escoamento bifásico

As análises descritas nos próximos tópicos foram realizadas utilizando malha com dimensões 144 x 38 x 38 elementos de rede com tamanhos característicos $\delta_x = 2,78E - 06 \text{ m}$, $\delta_t = 2,78E - 06 \text{ s}$ e $\delta_m = 2,14335E - 14 \text{ kg}$. A geometria do capilar restrito é descrita por comprimento 0.0004m, diâmetro do capilar 0.0001 m, diâmetro da garganta do capilar 0.00005 m e raio de curvatura 0.00040625m. O máximo Ma testado é de 0,0017.

4.2.3.1.

Adoção de números adimensionais

Foram estudadas algumas alternativas para se obter os mesmos números adimensionais de Reynolds e de Capilaridade utilizados em Roca-Reyes (2011).

Considerou-se a alteração da massa específica do fluido. Ao se alterar este parâmetro para 100 kg/m³, mantendo-se a discretização da malha, o tempo de relaxação τ obtido para a fase livre é de 11.3432. Este é um valor elevado, ao se considerar que a fase dispersa apresentará um tempo de relaxação ainda maior. Para uma razão de viscosidade 10, o tempo de relaxação da fase dispersa será de 108.932, ou seja, fora do intervalo utilizado por Zou e He (1997) e adotado neste estudo.

A alteração do diâmetro do tubo foi avaliada. Neste caso, de forma a se manter a razão de geometria entre os diâmetros do capilar e da garganta, faz-se necessário alterar, também, o diâmetro da garganta do capilar e o raio de curvatura.

Para um raio de capilar de 1E-05 m, ou seja, cinco vezes menor que o

utilizado originalmente, mantendo a massa específica e o comprimento, poderia se trabalhar com uma malha de dimensões $140 \times 9 \times 9$ elementos de rede com tamanho característico $\delta_x = 2.78 \cdot 10^{-6} \text{ m}$. Com esta malha, a seção de entrada teria 7 elementos de rede abertos ao fluxo e a seção central teria 4 elementos de rede abertos ao fluxo. Esta rede é demasiadamente restrita para observar os fenômenos desejados. Esta abordagem foi, portanto, desconsiderada.

Observou-se dificuldade em realizar alterações da massa específica e da geometria do capilar, devido à dependência entre estes parâmetros, os tamanhos característicos e o tempo de relaxação.

Desta forma, visando-se obter casos comparáveis, recalculou-se a velocidade e a tensão interfacial das simulações efetuadas neste estudo, para se trabalhar com baixos números de Reynolds ($Re_{max} < 0,1$) e com o mesmo número de capilaridade adotado por Roca-Reyes (2011).

Os valores utilizados nas simulações com número de capilaridade finito e razão de viscosidade 10 estão expostos na Tabela 2. Ao impor uma menor viscosidade, foi necessário adotar velocidades e tensões interfaciais baixas, para se trabalhar com os mesmos números adimensionais. Isto impactou fortemente no tempo de simulação, tendo algumas delas levado até 1.330.000 s (pouco mais de 2 semanas) para rodar 5.060.000 passos de tempo.

Caso	Ca = 0,066		Ca = 0,053		Ca = 0,026	
Autor	Roca-Reyes	Torquato	Roca-Reyes	Torquato	Roca-Reyes	Torquato
$u_{x,max}$ (m/s)	2,11E-03	1,00E-03	2,11E-03	1,00E-03	2,11E-03	1,00E-03
σ (N/m)	4,40E-04	7,60E-06	1,10E-03	9,50E-06	1,10E-03	1,90E-05
$\mu_{FaseLivre}$ (Pa.s)	2,75E-02	1,00E-03	5,50E-02	1,00E-03	2,75E-02	1,00E-03
$\mu_{FaseDispersa}$ (Pa.s)	2,75E-01	1,00E-02	5,50E-01	1,00E-02	2,75E-01	1,00E-02
Re (com $U_{x,médio}$)	3,84E-03	4,98E-02	1,92E-03	4,98E-02	3,84E-03	4,98E-02
Ca (com $U_{x,médio}$)	6,60E-02	6,60E-02	5,28E-02	5,28E-02	2,64E-02	2,64E-02

Tabela 2: Parâmetros e números adimensionais das simulações de Roca-Reyes (2011) e Torquato (2015).

4.2.3.2.

Número de Capilaridade Infinito

Diferentes razões de geometria entre diâmetro de gota e diâmetro de capilar foram testadas, conforme exposto na Tabela 3. Estas geometrias correspondem às gotas esféricas testadas por Roca-Reyes (2011).

Caso	Rgota (mm)	Lgota (mm)	$R_{GEO} = R_{gota}/R_{capilar}$
1	0,020	0,04	0,40
3	0,030	0,06	0,60
5	0,035	0,07	0,70

Tabela 3: Casos testados de gotas esféricas.

Para retirar o efeito capilar da simulação, os casos foram submetidos com tensão interfacial zero, obtido mediante a imposição do parâmetro A, que regula a tensão interfacial, como nulo. O número de capilaridade é infinito, pois as forças viscosas são infinitamente mais importantes que as forças interfaciais nestas simulações. O parâmetro β , que entra no operador de segregação de fluidos, não sendo, todavia, responsável pela imposição da tensão interfacial, foi imposto como 0.7, que foi o valor recomendado por Liu et al. (2012).

Conforme apresentado em Roca-Reyes (2011), há uma dependência entre o fator redutor de mobilidade f medido e a razão de geometria entre diâmetros da gota e do capilar, R_{GEO} , sendo menor f quanto maior R_{GEO} (Figura 40). Apesar de apresentar a mesma tendência, este estudo apresentou menores valores de f que os apresentados no estudo de referência. Estas simulações foram realizadas com razões de viscosidade 2 e 10.

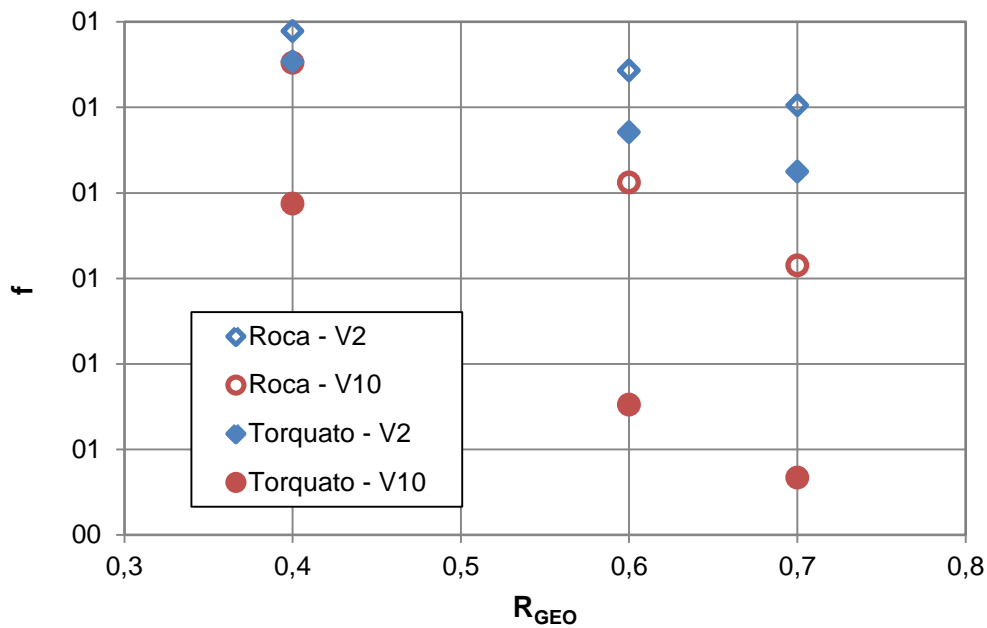


Figura 40: Valores do fator redutor de mobilidade f , obtidos em Roca-Reyes (2011) e neste trabalho, trabalhando com razões de viscosidade 2 (azul) e 10 (vermelho).

Os fatores f obtidos neste estudo são apresentados na Tabela 4.

Caso	Razão de Viscosidade	f
1	2	0,9535
	10	0,7872
3	2	0,8706
	10	0,5521
5	2	0,8248
	10	0,4671

Tabela 4: Fatores f obtidos em simulações com número de capilaridade infinito.

Estes casos simulados foram rodados com $Re_{u_{x,médio}} \cong 0.05$ e $Re_{u_{x,máximo}} \cong 0.1$, gerados com $u_{x,max} = 0,001 \text{ m/s}$. Para um valor próximo de velocidade máxima, $u_{x,max} = 0,001415 \text{ m/s}$, demonstrou-se nas seções 4.2.2.2 e 4.2.2.3 que os desvios obtidos em relação à solução analítica para capilar reto e em relação à solução aproximada usando raio equivalente para capilar restrito

foram, respectivamente, de 0.82% e 0.06%. Na seção 4.2.3.3, será mostrado que a imposição deste valor de Reynolds não traz impactos relevantes nem em simulações com número de capilaridade finito.

Na Figura 41, verifica-se que a diferença no fator redutor de mobilidade obtido neste estudo em relação ao apresentado por Roca-Reyes (2011) é muito maior para os casos testados com maior razão de viscosidade, tanto em termos absolutos quanto em termos percentuais. Para uma razão de viscosidade 2, os desvios percentuais ficam entre 3,6% e 8,6%. Já para uma razão de viscosidade 10, os desvios percentuais ficam entre 17,3% e 34,7%. Ou seja, por si só, a introdução de uma razão de viscosidade elevada introduz significativos erros numéricos.

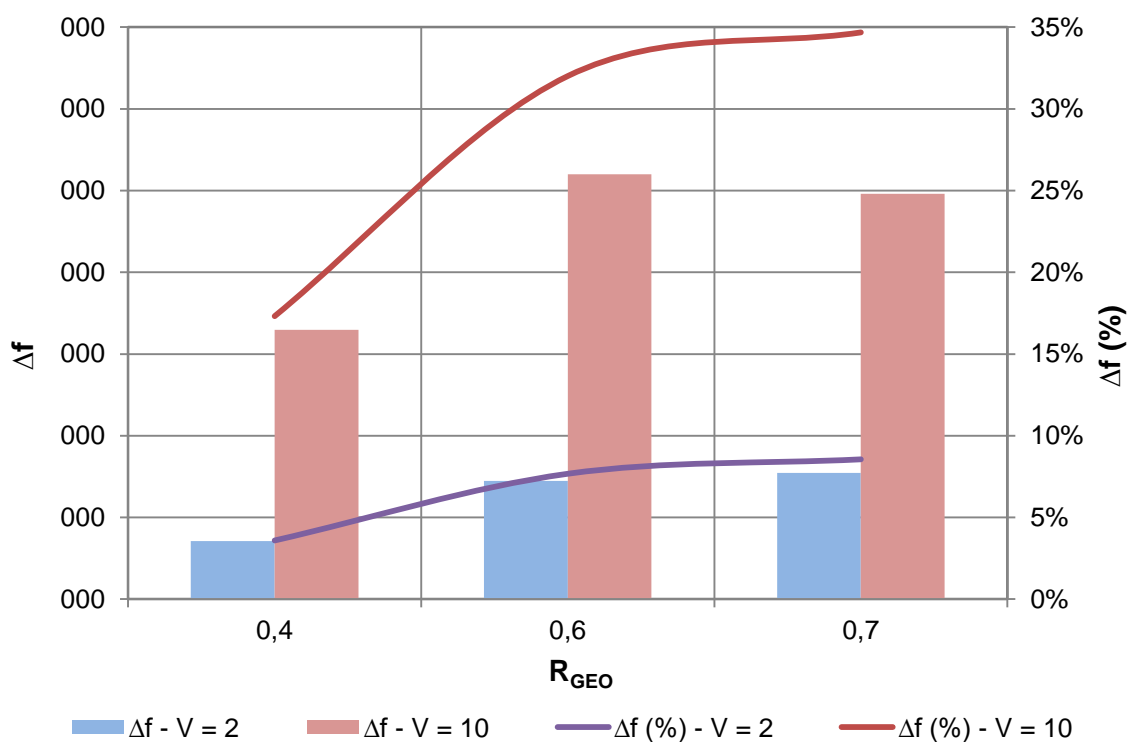


Figura 41: Diferença absoluta e percentual entre fator redutor de mobilidade f obtido em Roca-Reyes (2011) e neste trabalho, trabalhando com razões de viscosidade 2 (azul) e 10 (vermelho).

Dado que se comparam estudos numéricos realizados com métodos numéricos diferentes, cada qual com as suas limitações, a comparação dos

resultados é qualitativa. A rigor, o mais correto seria reportar a diferença entre os resultados como desvio.

Outro ponto de destaque na Figura 41 é que o desvio percentual aumenta com o aumento da razão de geometria (ou com o aumento da gota). Isto pode estar relacionado com a menor deformação experimentada pela gota no escoamento pela restrição, conforme apresentado na Figura 46, quando comparado aos resultados de Roca-Reyes (2011). Este resultado também pode estar relacionado com a geometria da parede do capilar discretizada em elementos de rede, devido à necessidade de se adotar uma malha isotrópica e indeformada na representação do perfil da seção do tubo.

Como pode se observar nas Figuras 42 e 43, o formato da queda de pressão experimentada no escoamento tem a mesma assinatura da queda de pressão observada em Roca-Reyes (2011).

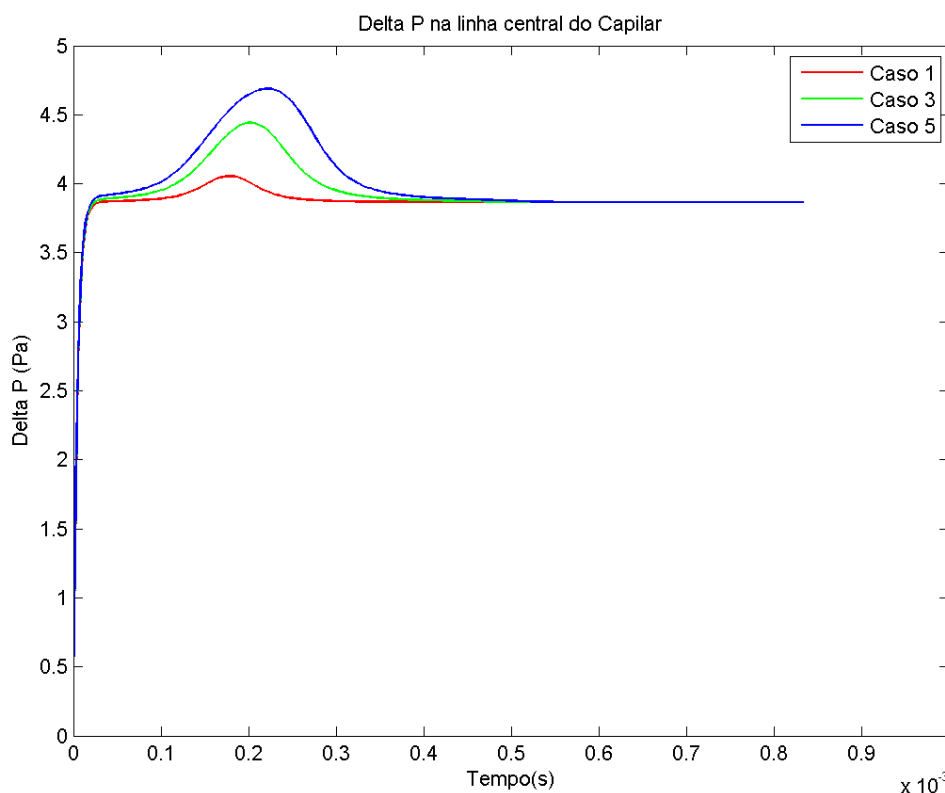


Figura 42: Queda de pressão na linha central do capilar em simulações com número de capilaridade infinito, razão de viscosidade 2 e razão de geometria 0,4 (Caso 1), 0,6 (Caso 3) e 0,7 (Caso 5).

Verificou-se que a tensão interfacial está sendo corretamente aplicada, como pode se observar na Figura 44, na qual não são observadas descontinuidades bem marcadas na pressão na interface da gota (identificada com setas), como observado quando há tensão interfacial entre fluidos.

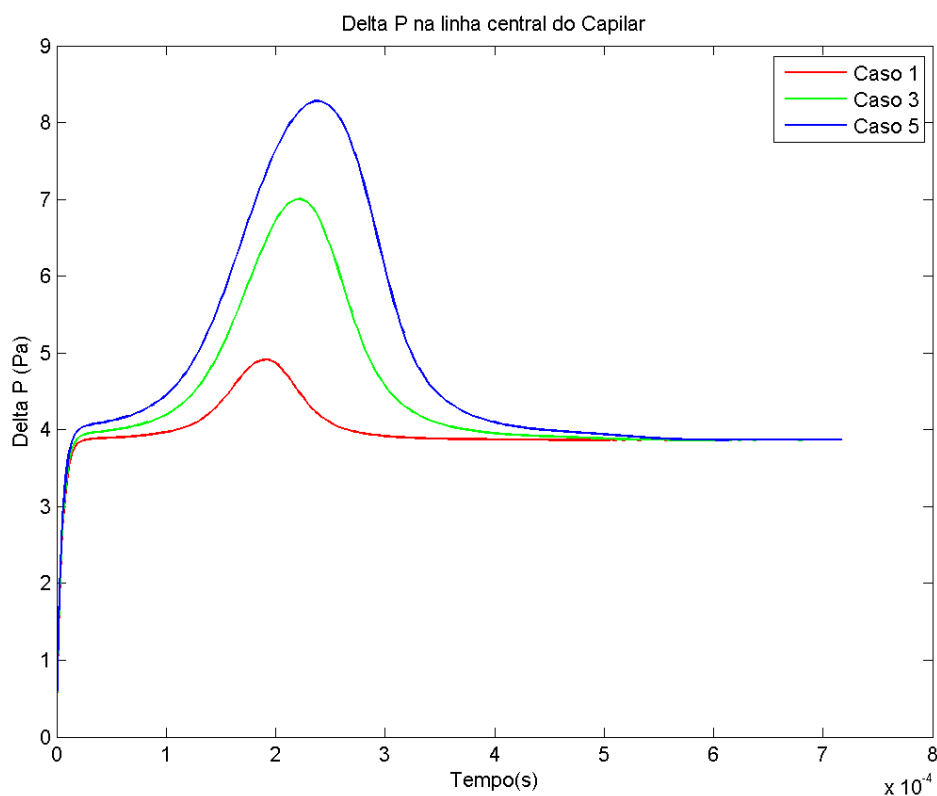


Figura 43: Queda de pressão na linha central do capilar em simulações com número de capilaridade infinito, razão de viscosidade 10 e razão de geometria 0,4 (Caso 1), 0,6 (Caso 3) e 0,7 (Caso 5).

A menor taxa de deformação da gota, que pode ser verificada nas Figuras 45, 46 e 47, pode ser a responsável pela diferença no comportamento de pressão. Em Roca-Reyes (2011), a interface da gota se deforma muito mais. Credita-se a menor deformação da gota à imposição do parâmetro β no operador recoloração, responsável pela manutenção da segregação dos fluidos.

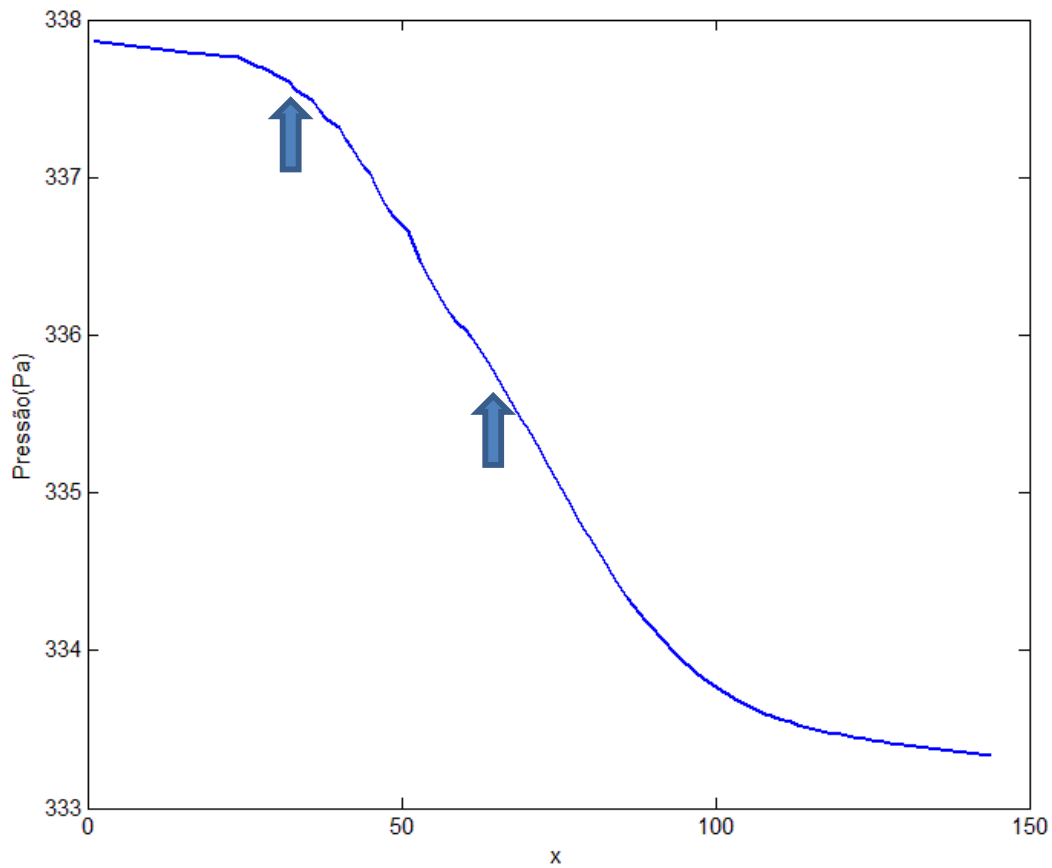


Figura 44: Perfil de pressão na linha central do escoamento no passo de tempo 19.000 Dt do caso com Razão de Geometria 0,7 e Razão de Viscosidade 10.

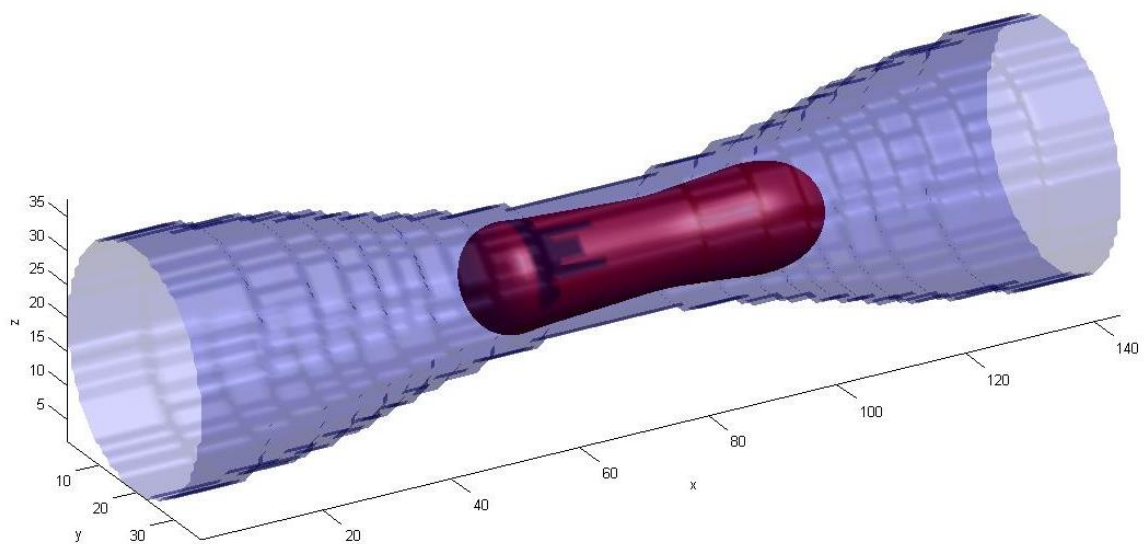


Figura 45: Superfície da parede do capilar e da interface entre fluidos na separação da gota, gerada utilizando o parâmetro massa específica normalizada, $\rho_0 N$, no tempo 40.000 Dt para razão de geometria 0,7 e razão de viscosidade 2.

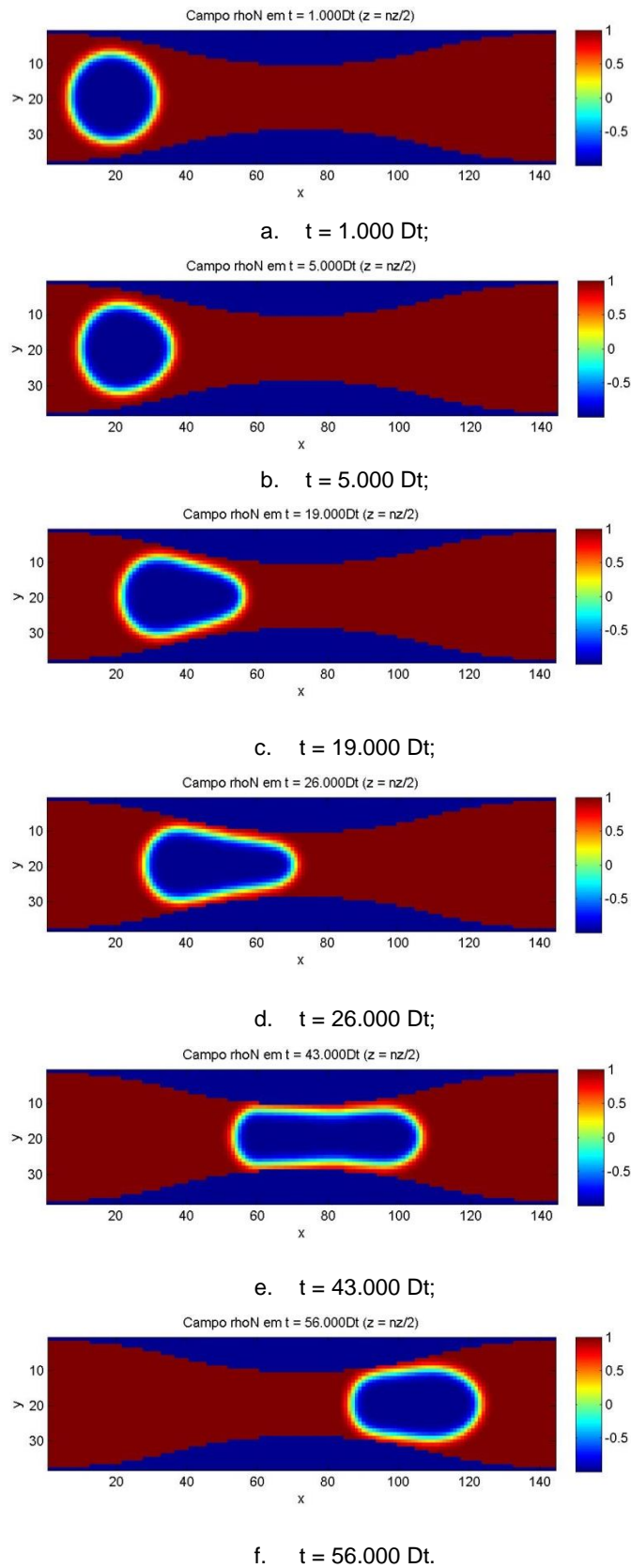


Figura 46: Evolução do *flag* massa específica normalizada, rhoN, no tempo de simulação para razão de geometria 0,7 e razão de viscosidade 10.

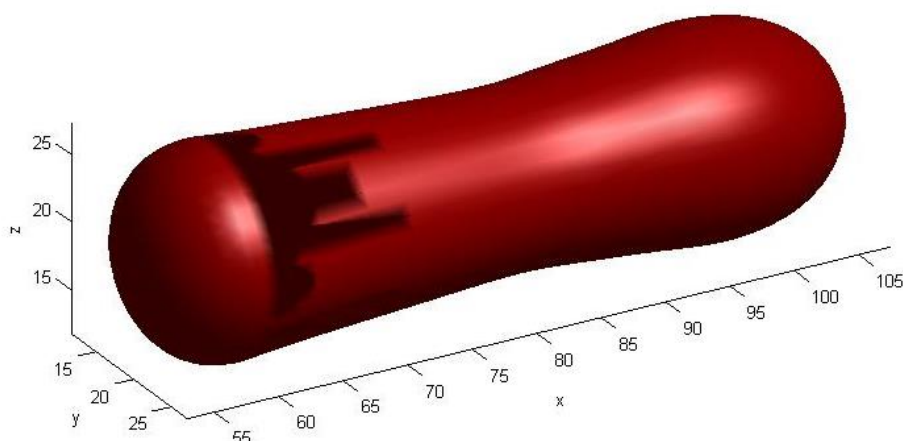


Figura 47: Superfície da interface entre fluidos na separação da gota, gerada utilizando o parâmetro massa específica normalizada, ρ_{0N} , no tempo $40.000 Dt$ para razão de geometria 0,7 e razão de viscosidade 2.

4.2.3.3.

Número de Capilaridade Finito

Inicialmente, os cenários descritos na Tabela 5 foram simulados.

Cenário	1	2	3
$u_{x,max}$ (m/s)	7,72E-05	3,86E-05	7,72E-05
σ (N/m)	2,39E-06	1,50E-06	5,98E-06
$\mu_{FaseLivre}$ (Pa.s)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03
$\mu_{FaseDispersa}$ (Pa.s)	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02
Re (com $U_{x,médio}$)	3,84E-03	1,92E-03	3,84E-03
Ca (com $U_{x,médio}$)	1,62E-02	1,30E-02	6,48E-03

Tabela 5: Parâmetros utilizados nas simulações tridimensionais bifásicas iniciais.

Os resultados desta análise são expostos na Figura 52, junto com os resultados das análises realizadas posteriormente.

Na Figura 48, expõe-se as quedas de pressão simuladas nos escoamentos monofásico e bifásico do cenário 2, o qual é exposto na Tabela 5.

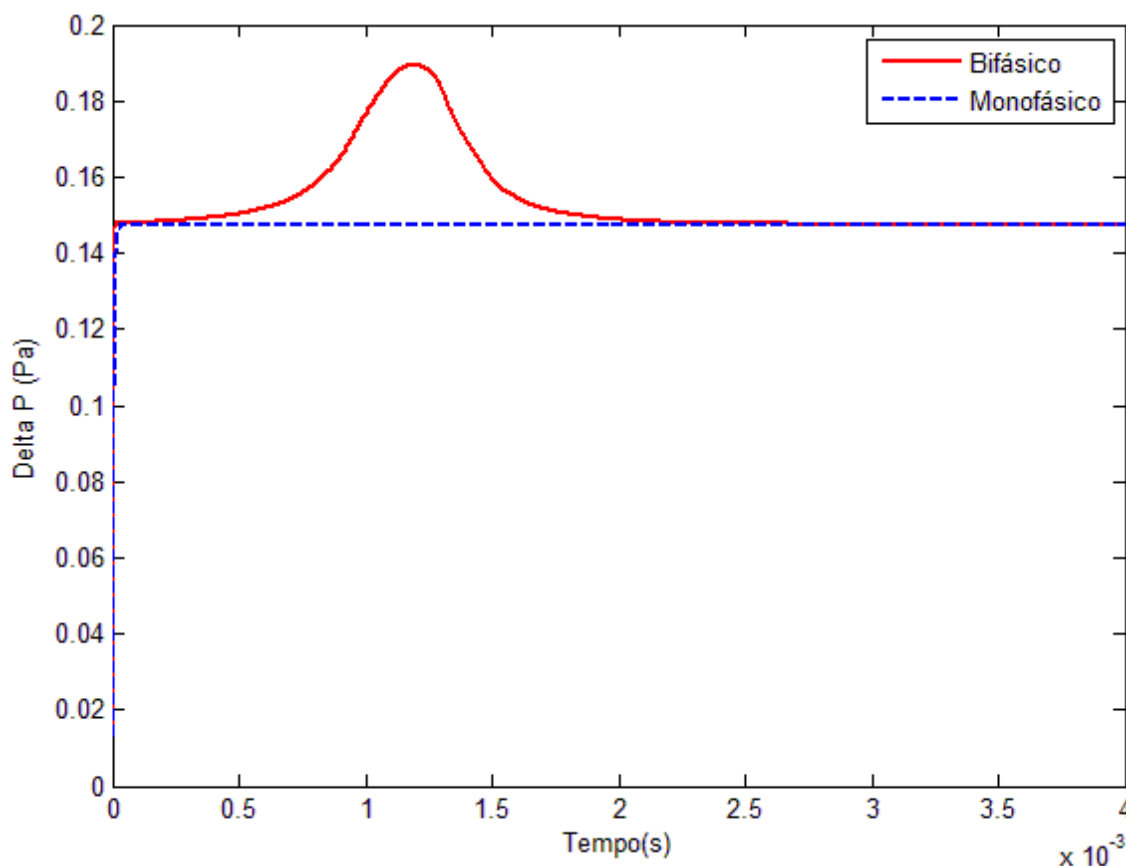


Figura 48: Queda de pressão simulada dos escoamentos monofásico (azul) e bifásico do Cenário 2 da Tabela 5 (vermelho).

Com base nos estudos prévios, tinha-se a percepção de que o número de capilaridade era mais importante do que o número de Reynolds no domínio de baixos valores de Reynolds testados ($Re_{Max} \leq 0,1$).

O uso de um número de Reynolds mais elevado, obtido pela imposição de velocidades mais elevadas, possibilita a realização de simulações com menor tempo computacional. Ao alterar o número de Reynolds, a tensão interfacial é

também modificada para se manter o mesmo número de capilaridade analisado.

Como pode se perceber pela Tabela 6, a adoção de um número de Reynolds uma ordem de grandeza maior não é responsável por alterações relevantes no fator f , para diversas razões de geometria de gota. Por este motivo, adotou-se esta condição de Reynolds, $Re = 0,05$, nos estudos posteriores.

β	Ca	Caso	R_{GEO}	Re	dP_{Max} (u.LBM)	dP_{SS} (u.LBM)	f
0,7	0,0162	1	0,4	0,00384	3,79E-04	2,95E-04	0,778755
				0,05000	4,92E-03	3,87E-03	0,785913
		5	0,7	0,00384	6,48E-04	2,95E-04	0,455275
				0,05000	8,47E-03	3,87E-03	0,456246

Tabela 6: Impacto da adoção de números de Reynolds distintos no fator redutor da mobilidade f avaliado nas razões de geometria 0,4 e 0,7.

Em seguida, fez-se uma sensibilidade ao parâmetro β , utilizando $Re = 0,05$ e $Ca = 0,0162$. Os resultados desta análise de sensibilidade são expostos na Figura 49 e na Tabela 7.

Como Roca-Reyes (2011) não utilizou a condição de $Ca = 0,016$, foram utilizadas duas estimativas do valor de f para esta condição de número de capilaridade:

- Adoção do fator f do número de capilaridade mais próximo, $Ca = 0,026$; e
- Cálculo do fator f como função do número de capilaridade, obtido através de extrapolação logarítmica dos valores apresentados por Roca-Reyes (2011).

A primeira condição funciona como limite superior, enquanto que a segunda condição atua como limite inferior da estimativa. As extrapolações logarítmica e polinomial são apresentadas no Apêndice E.

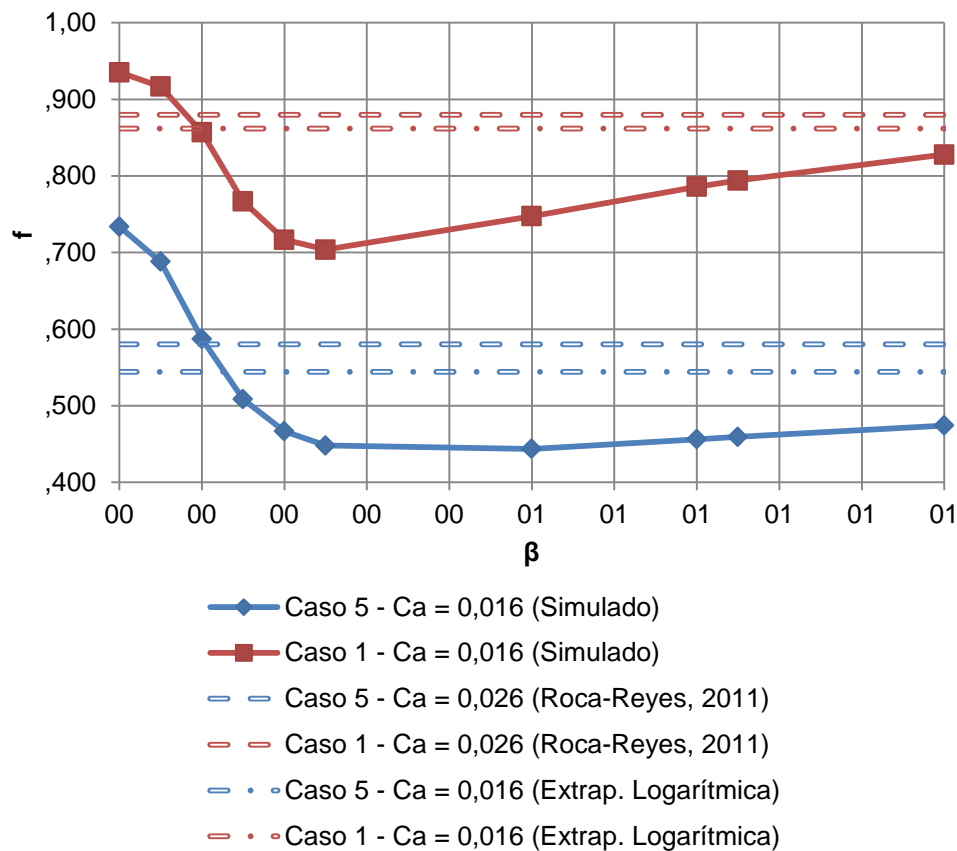


Figura 49: Fator redutor da mobilidade f para diversos valores do parâmetro β comparado aos valores obtidos por Roca-Reyes (2011) nas linhas tracejadas.

Os fatores f simulados são sempre inferiores ao fator f obtido em Roca-Reyes (2011) para $\beta > 0,13$. Aproxima-se do fator f obtido no estudo de referência, conforme β se aproxima de 0. De fato, os valores de f se igualam quando $\beta \in [0,08, 0,13]$. Quanto menor for β , mais espessa se torna a interface, sendo que, no caso com $\beta = 0$, a gota se dispersa no fluido rapidamente.

Conforme pode se ver nas Figuras 50 e 51 do Caso 5, o uso do parâmetro β igual a 0,15 leva a interfaces muito espessas e a um perfil de pressão não bem definido devido à mistura dos fluidos. Na parte central da gota, ρ_{0N} assume o valor de -0,69, ou seja, não se tem fluido Blue ou Óleo puro.

Ca	Re	Caso	β	dP_{Max} (u.LBM)	dP_{SS} (u.LBM)	f
0,0162	0,05	1	0,00	4,13E-03	3,87E-03	0,935313
			0,05	4,22E-03	3,87E-03	0,916655
			0,10	4,51E-03	3,87E-03	0,857017
			0,15	5,04E-03	3,87E-03	0,766733
			0,20	5,39E-03	3,87E-03	0,716693
			0,25	5,49E-03	3,87E-03	0,703752
			0,50	5,17E-03	3,87E-03	0,747435
			0,70	4,92E-03	3,87E-03	0,785913
			0,75	4,87E-03	3,87E-03	0,793949
			1,00	4,67E-03	3,87E-03	0,827827
		5	0,00	5,27E-03	3,87E-03	0,733816
			0,05	5,62E-03	3,87E-03	0,688002
			0,10	6,59E-03	3,87E-03	0,58719
			0,15	7,61E-03	3,87E-03	0,50842
			0,20	8,29E-03	3,87E-03	0,466674
			0,25	8,63E-03	3,87E-03	0,448041
			0,50	8,71E-03	3,87E-03	0,443668
			0,70	8,47E-03	3,87E-03	0,456246
			0,75	8,42E-03	3,87E-03	0,459388
			1,00	8,16E-03	3,87E-03	0,474047

Tabela 7: Fator redutor da mobilidade f para diversos valores do parâmetro β testados.

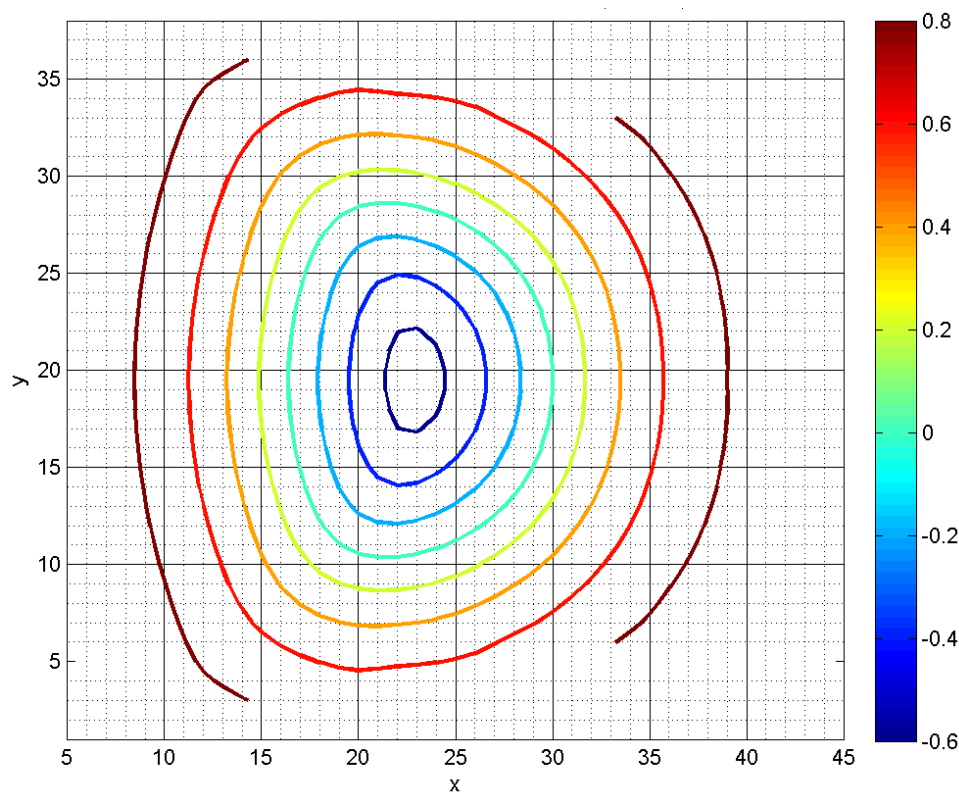


Figura 50: Curvas de nível da variável ρN no instante de tempo de $2.000 Dt$ em $z = nz/2$.

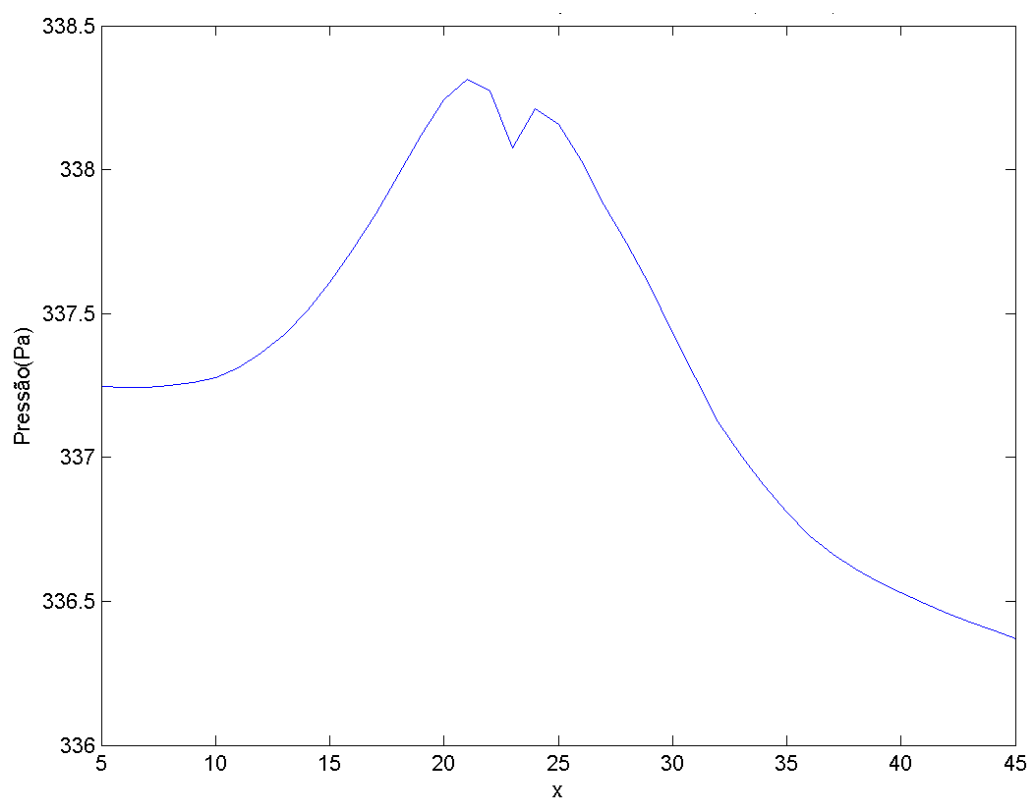


Figura 51: Pressão na linha central do capilar no instante de tempo de $2.000 Dt$.

A variável ρN só atinge o nível $+0,999$ na linha central de simetria em $x = 62$. Considerando este critério para a definição do final da área de transição, a espessura total da interface, no tempo apresentado, é de $32 \delta_x$ ou de $0,089$ mm. Se for considerado como critério a obtenção do valor $+1,0$ pela variável ρN na linha central de simetria, a espessura total da interface é de $56 \delta_x$ ou de $0,156$ mm.

Considerando estes motivos e a orientação de Liu et al. (2012) de utilizar valores deste parâmetro dentro do domínio $\beta \in [0,7, 1,0]$, decidiu-se por continuar adotando um valor deste parâmetro pertencente a este domínio.

Como o número de Reynolds imposto nestes ensaios é muito baixo (situação de escoamento quasi-estático), calculou-se a tensão interfacial efetiva, $\sigma^{efetiva}$, com base na curvatura apresentada pela gota, R_{curv} , e na pressão capilar simulada, P_c , de acordo com a Equação $\sigma^{efetiva} = p_c \cdot R_{curv}/2$.

Na Tabela 8, há uma comparação, para diversos valores de número de capilaridade, entre as tensões interfaciais impostas e efetivas nos tempos de simulação inicial e referente ao pico de pressão, tempo no qual há a maior deformação da gota. Os valores são fornecidos em uma faixa para incorporar a incerteza contida principalmente na medição do raio de curvatura.

beta	Ca	Caso	Tensão Interfacial (N/m)		
			Imposta	Efetiva (t Inicial)	Efetiva (t dPmax)
0,7	0,0065	5	5,98E-06	4,94E-06 \pm 2,25E-06	4,14E-06 \pm 1,10E-06
	0,0130		1,50E-06	1,33E-06 \pm 5,42E-07	1,21E-06 \pm 3,91E-07
	0,0162		2,39E-06	2,15E-06 \pm 8,50E-07	1,68E-06 \pm 4,15E-07
	Infinito		0	0,00E+00 \pm 0,00E+00	0,00E+00 \pm 0,00E+00

Tabela 8: Tensão interfacial imposta e efetiva mínima e máxima para tempos de simulação inicial e do pico de queda de pressão para diversos casos de número de capilaridade, trabalhando com razão de viscosidade 10, razão de geometria de gota 0,7 (Caso 5) e $\beta = 0,7$.

Não há variação substancial entre os valores de tensão interfacial efetiva nos dois intervalos de tempo verificados. A manutenção da tensão interfacial imposta

em intervalos de tempo com deformações distintas era um dos pontos que se queria verificar com esta análise da tensão interfacial efetiva.

Também se pode concluir que a tensão interfacial imposta está sendo bem representada, por estar em geral contida dentro da faixa de tensão interfacial efetiva analisada. Apesar de não pertencer ao intervalo de tensão interfacial efetiva no tempo de pico de pressão em dois dos casos analisados, a tensão interfacial imposta é bem próxima ao limite superior desta faixa de tensão efetiva. A boa representação da tensão interfacial pelo modelo era outro objetivo desta análise.

Mostra-se, na Tabela 9, que a imposição de um valor de β maior é responsável por um ligeiro aumento no limite superior da faixa de tensão interfacial efetiva. Este fator conduz à representação da tensão interfacial imposta pela faixa de valores simulados de tensão interfacial efetiva.

beta	Ca	Caso	Tensão Interfacial (N/m)		
			Imposta	Efetiva (t Inicial)	Efetiva (t dPmax)
0,7	0,0162	5	2,39E-06	2,15E-06 \pm 8,50E-07	1,68E-06 \pm 4,15E-07
1			2,39E-06	2,26E-06 \pm 8,70E-07	1,94E-06 \pm 7,85E-07

Tabela 9: Tensão interfacial imposta e efetiva mínima e máxima para tempos de simulação inicial e do pico de queda de pressão para dois valores de β , com número de capilaridade 0.0162, razão de viscosidade 10 e razão de geometria de gota 0,7 (Caso 5).

O cálculo da tensão interfacial de um dos casos é apresentado no Apêndice F.

Em sequência, foram realizadas simulações utilizando os parâmetros descritos na Tabela 2 da seção 4.2.3.1.

Como pode se observar na Figura 52, este estudo se mostrou capaz de reproduzir a dependência da razão da geometria R_{Geo} com a queda de pressão, apresentando menores fatores f quanto maior for a razão de geometria de gota R_{Geo} . Este resultado já havia sido demonstrado no estudo de casos com número de

capilaridade infinito.

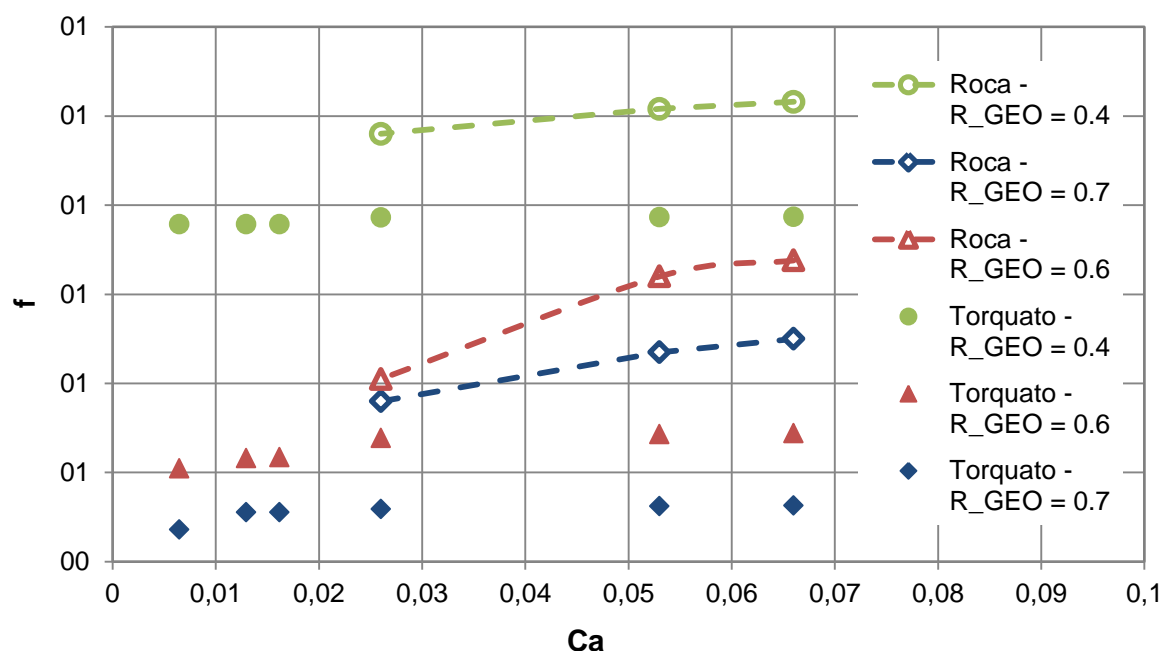


Figura 52: Fatores redutores da mobilidade f em função do número de capilaridade Ca obtidos nos estudos de Roca-Reyes (2011) e neste estudo, para diferentes razões de geometria de gota ($R_{Geo} = \{0,4, 0,6, 0,7\}$) e razão de viscosidade 10.

O método se mostrou pouco sensível à variação do número de capilaridade, sendo os fatores f apresentados na Figura 52 muito próximos aos fatores f apresentados nas simulações com número de capilaridade infinito. Este mesmo comportamento foi observado por Robles-Castillo (2011). Conforme verificado nas Tabelas 8 e 9, a tensão interfacial está sendo corretamente aplicada nestes casos com tensão interfacial não nula. Descarta-se, portanto, este fator como o responsável pelo comportamento observado.

Conforme se observa na Figura 53, a diferença entre o fator f obtido neste estudo e o apresentado por Roca-Reyes (2011) aumenta com o aumento da razão de geometria. Para o caso com razão de geometria 0,4, os desvios percentuais ficam entre 10,65% e 14,11%. Já para o caso com razão de geometria 0,7, os desvios percentuais ficam entre 20,85% e 28,78%.

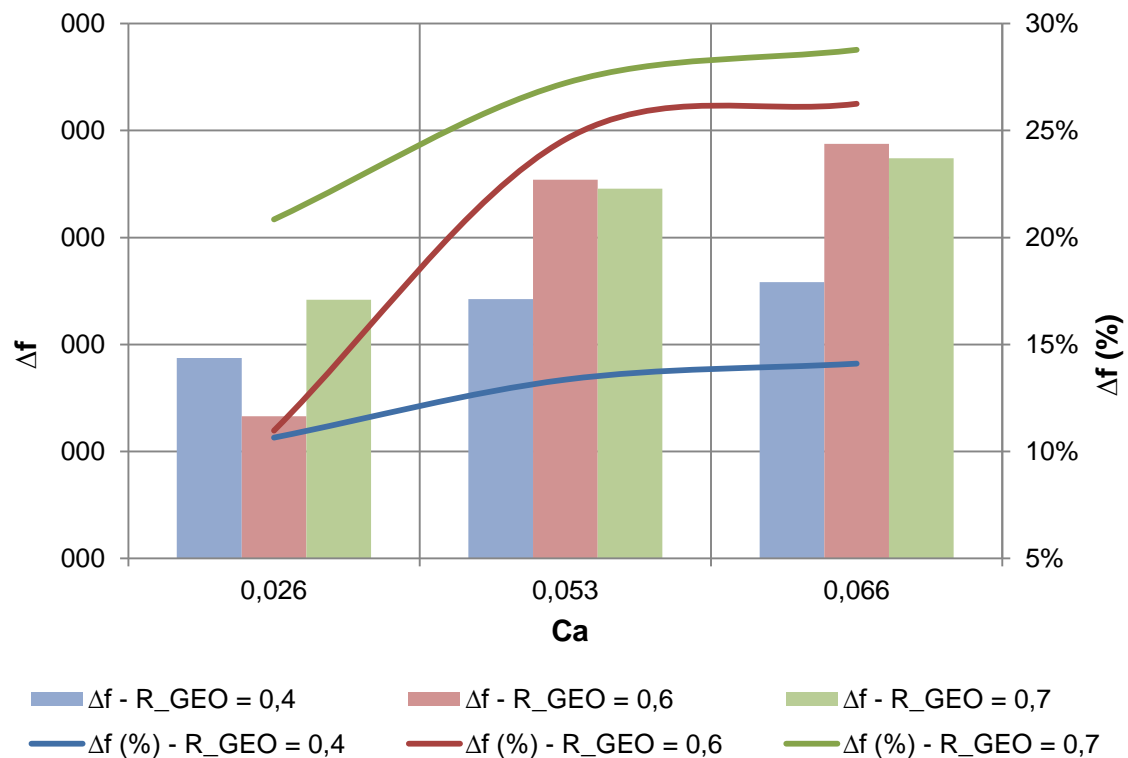


Figura 53: Diferença absoluta e percentual entre fator redutor de mobilidade f obtido em Roca-Reyes (2011) e neste trabalho, para diferentes números de capilaridade e razão de viscosidade 10.

Esta observação de aumento do desvio percentual no valor simulado de f já havia sido apresentada nos estudos com número de capilaridade infinita. As possíveis causas relacionadas a este comportamento são a menor deformação da gota, introduzida pela segregação de fluidos realizada pelo algoritmo de recoloração, assim como pelo maior contato das gotas de maior dimensão com uma geometria de parede de capilar discretizada em elementos de rede.

Outro fator que pode ser responsável por este resultado é a não conservação de massa nas simulações com o método de *level-set*. Apesar de Roca-Reyes (2011) julgar que a simulação está conservando a massa da gota de forma aceitável em um caso com número de capilaridade finito e capilar reto, este resultado é discutível, pois a gota perde o equivalente a 20% do seu volume no tempo de simulação. No escoamento através de capilar restrito, espera-se que este comportamento seja ainda mais realçado pelo aumento da difusão numérica do

campo escalar utilizado para identificar a interface, o que foi também observado por Roca-Reyes (2011).

Outro ponto evidenciado na Figura 53 é o incremento do desvio percentual no valor simulado de f quanto maior o número de capilaridade, o que está associado com a aplicação de uma tensão interfacial de menor magnitude.

Este fator pode também estar relacionado com o operador de recoloração, no qual se realiza a segregação das fases através do parâmetro β . Nestes casos, apesar de se reduzir a tensão interfacial, o que culminaria em uma maior deformação da gota, a gota permanece com deformação menos expressiva do que aquela apresentada por Roca-Reyes (2011) devido à atuação do operador recoloração.

Outra fonte de desvio, já identificada nas simulações com número de capilaridade infinito, é a introdução de erros numéricos pelo uso de uma razão de viscosidade muito elevada. Isto se mostrou responsável por desvios percentuais de até 34,7% nos estudos sem introdução de tensão interfacial.

Apesar de não haver parâmetros de comparação fornecidos por Roca-Reyes (2011), realizou-se simulações dos mesmos casos de número de Capilaridade apresentados na Tabela 2 utilizando razão de viscosidade 2.

Conforme exposto na Figura 54, ao se trabalhar com uma menor razão de viscosidade, observa-se uma maior sensibilidade do valor f ao número de capilaridade, conforme apresentado no estudo de referência. Outro ponto é que, neste estudo com razão de viscosidade 2, foram obtidos maiores fatores f do que os apresentados por Roca-Reyes (2011) utilizando razão de viscosidade 10.

Este fenômeno era esperado e está relacionado com a menor atuação do efeito viscoso. Neste caso com razão de viscosidade 2, o fluido da gota apresenta menor viscosidade ($\mu_{gota} = 2 \cdot \mu_{fase\ cont\acute{in}ua}$) do que a apresentada pela gota no caso com razão de viscosidade 10 ($\mu_{gota} = 10 \cdot \mu_{fase\ cont\acute{in}ua}$). Desta forma, quando o fluido da gota substitui o fluido da fase contínua na restrição, apesar de haver um incremento na perda de carga no escoamento, esta perda de carga é

menor no caso com razão de viscosidade 2 quando comparada à perda de carga no caso com razão de viscosidade 10.

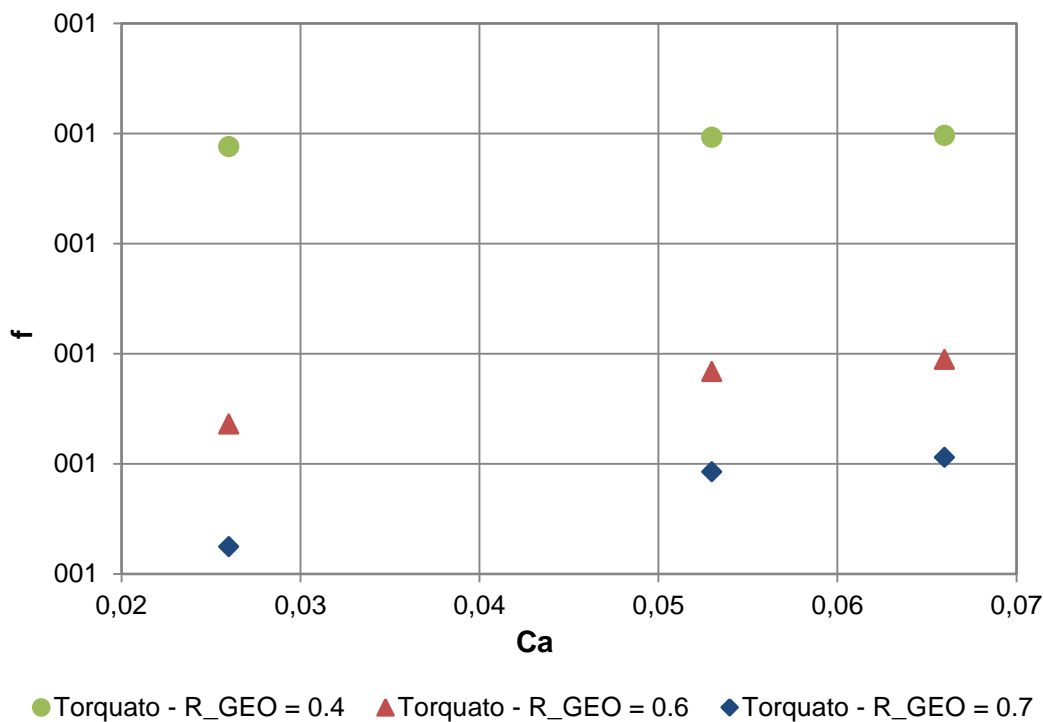


Figura 54: Fatores redutores da mobilidade f em função do número de capilaridade Ca para diferentes razões de geometria de gota ($R_{Geo} = \{0.4, 0.6, 0.7\}$) e razão de viscosidade 2.

Como pode se observar na Figura 55, o formato da queda de pressão experimentada no escoamento tem a mesma assinatura da queda de pressão observada em Roca-Reyes (2011).

Para uma mesma razão de geometria, a queda de pressão máxima experimentada pelo escoamento é sempre maior para os casos simulados com razão de viscosidade maior. Conforme já discorrido acima, isto está relacionado tanto com a maior influência do efeito viscoso, quanto com os significativos erros numéricos introduzidos com o uso de uma razão de viscosidade elevada.

Outro ponto interessante é o deslocamento do pico de pressão no tempo, conforme se aumenta a razão de geometria. Isto está relacionado com a energia

dispendida para deformar uma gota maior e com a menor velocidade da gota.

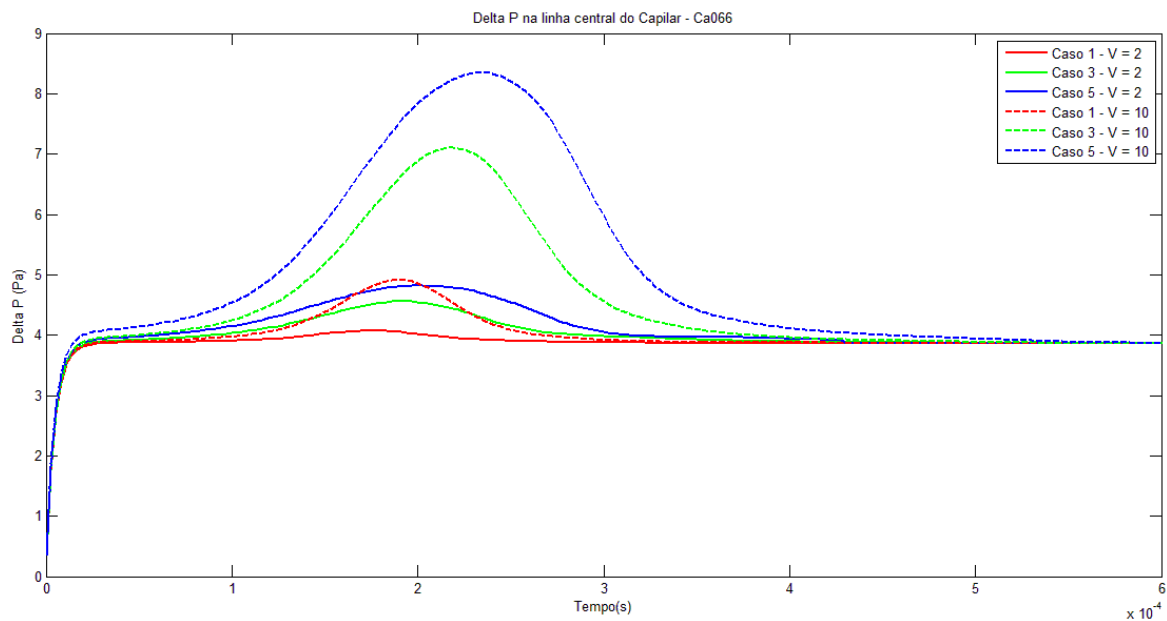


Figura 55: Queda de pressão na linha central do capilar em simulações com número de capilaridade 0,066, razão de viscosidade 2 e 10 e razão de geometria 0,4 (Caso 1), 0,6 (Caso 3) e 0,7 (Caso 5).

Os valores obtidos neste estudo do fator f para as razões de viscosidade 2 e 10 são apresentadas na Tabela 10.

Caso	Ca	f	
		V = 2	V = 10
1	0,026	0,9441	0,7863
	0,053	0,9482	0,7867
	0,066	0,9491	0,7868
3	0,026	0,8180	0,5386
	0,053	0,8419	0,5430
	0,066	0,8473	0,5443
5	0,026	0,7623	0,4591
	0,053	0,7963	0,4622
	0,066	0,8029	0,4630

Tabela 10: Fatores f obtidos em simulações com número de capilaridade finito.

As deformações experimentadas pela gota no escoamento com $Ca = 0,066$, em diferentes cenários de razão de geometria e razão de viscosidade, são apresentadas nas Figuras 56, 57 e 58.

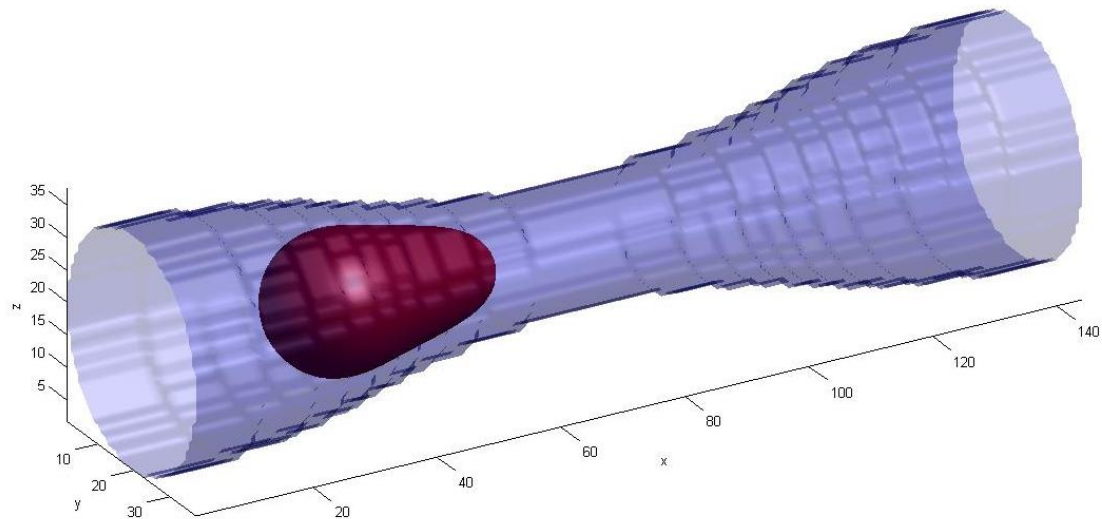


Figura 56: Superfície da parede do capilar e da interface entre fluidos na separação da gota, gerada utilizando o parâmetro massa específica normalizada, ρN , no tempo $21.000 Dt$ para razão de geometria 0,7 (Caso 5) e razão de viscosidade 10.

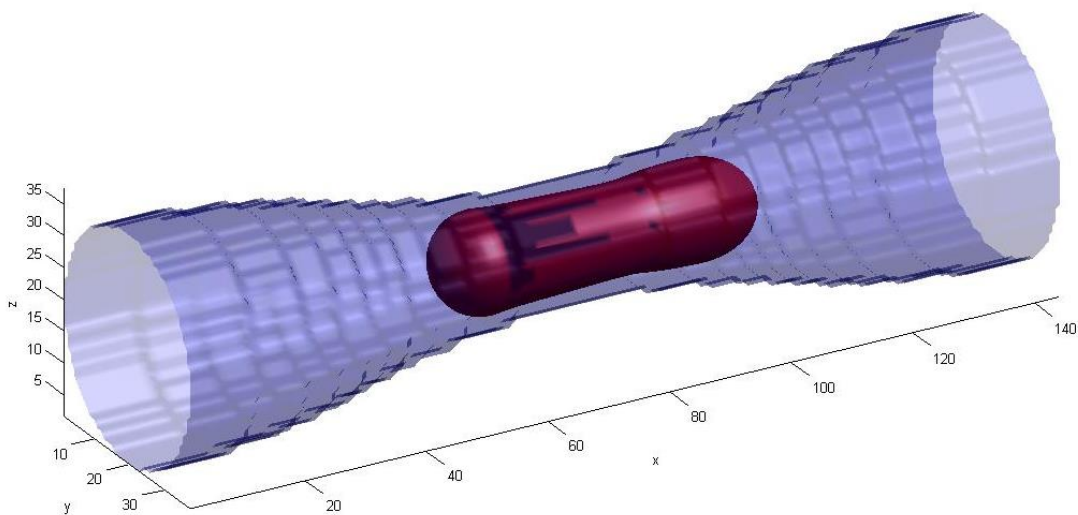
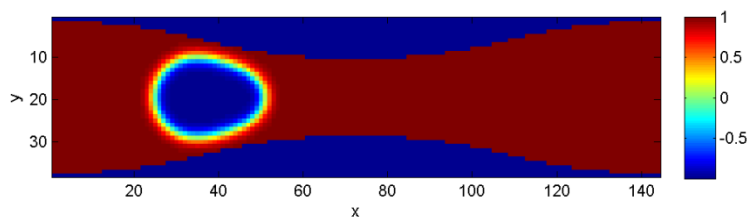
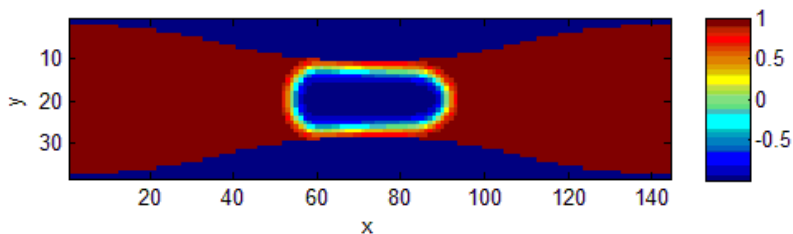


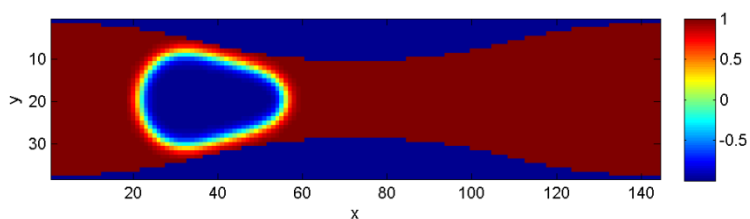
Figura 57: Superfície da parede do capilar e da interface entre fluidos na separação da gota, gerada utilizando o parâmetro massa específica normalizada, ρN , no tempo $42.000 Dt$ para razão de geometria 0,7 (Caso 5) e razão de viscosidade 10.



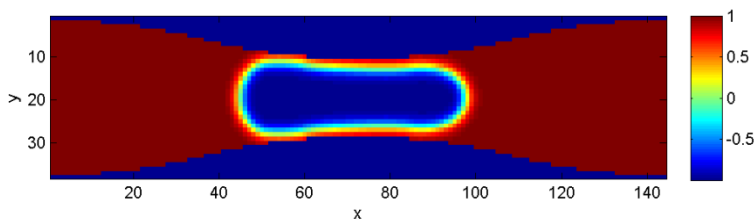
a. Caso 3 e $V = 2$ avaliado em $t = 17.000 \text{ Dt}$;



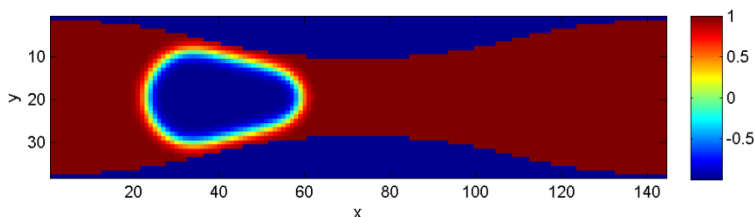
b. Caso 3 e $V = 2$ avaliado em $t = 34.500 \text{ Dt}$ (tempo do pico de pressão);



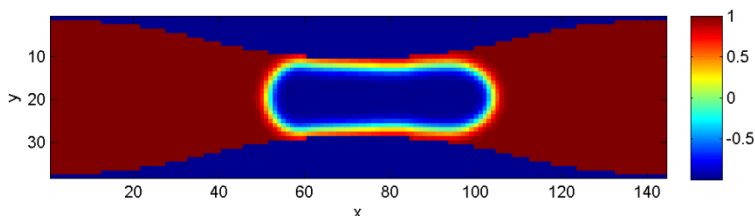
c. Caso 5 e $V = 2$ avaliado em $t = 18.000 \text{ Dt}$;



d. Caso 5 e $V = 2$ avaliado em $t = 36.000 \text{ Dt}$ (tempo do pico de pressão);



e. Caso 5 e $V = 10$ avaliado em $t = 21.000 \text{ Dt}$;



f. Caso 5 e $V = 10$ avaliado em $t = 42.000 \text{ Dt}$ (tempo do pico de pressão).

Figura 58: Deformação evidenciada pelo parâmetro massa específica normalizada, ρ/N , avaliada na seção $nz/2$ para $Ca = 0,066$ e diferentes razões de viscosidade e razões de geometria.

Por fim, os resultados obtidos neste estudo foram comparados com os dados experimentais obtidos em Robles-Castillo (2011), o qual utilizou um capilar com diâmetro de capilar de 100 μm , diâmetro de garganta de 50 μm e comprimento de 4500 μm . Além da igualdade da relação entre os diâmetros de capilar e de garganta utilizados em ambos os estudos, o experimento de Robles-Castillo (2011) foi realizado com mesmo range de vazão ($Q \in [0,02, 0,08] \text{ml/h}$) e com razão de viscosidade 10.

O estudo é dividido em três categorias de tamanho de gota: pequena (GP), média (GM) e grande (GG). No caso GP, a gota tem diâmetro menor do que o diâmetro da restrição do capilar. No caso GM, a gota tem diâmetro aproximadamente igual ao diâmetro da garganta. Já em GG, a gota tem diâmetro maior do que o diâmetro da garganta. Estes casos são comparáveis com as razões de geometria testadas nesse estudo de 0,4, 0,6 e 0,7 (Figura 59).

Pela análise da Figura 59, conclui-se que o estudo numérico realizado está representando de forma aceitável o comportamento médio apresentado pelos experimentos realizados por Robles-Castillo (2011). Este fato sugere que, neste caso particular em comparação, a simulação pelo método *level-set* esteja sendo mais afetada pela elevada razão de viscosidade do que o método de Lattice-Boltzmann.

Robles-Castillo (2011) justifica a pequena sensibilidade do fator f ao número de capilaridade, pelo fato de o efeito viscoso dominar para as condições de fluxo e de geometria de capilar utilizados. Em capilar com maior diâmetro de capilar, 200 μm , observou-se maior dependência entre f e Ca .

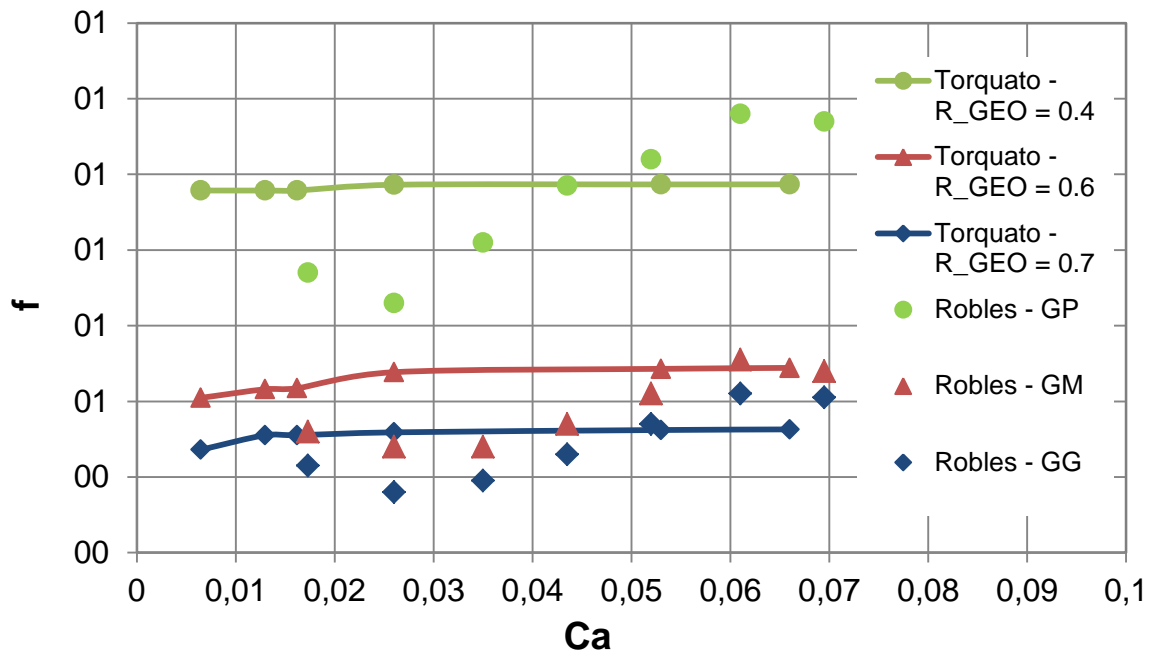


Figura 59: Fatores redutores da mobilidade f em função do número de capilaridade Ca obtidos neste estudo numérico e no estudo experimental de Robles-Castillo (2011), para diferentes razões de geometria de gota e razão de viscosidade 10.

5

Conclusões e Sugestões

Grande parte do esforço empregado neste estudo, traduzido pelo alto número de casos analisados, se concentrou na determinação da capacidade do método de Lattice-Boltzmann em representar fielmente um escoamento mono e bifásico com forças capilares importantes. As principais dúvidas dirimidas foram:

- Aplicação correta de condições de contorno e condições de contorno ideais para modelar o problema;
- Uso de discretização espacial e temporal adequadas no intervalo de número de Reynolds testado;
- Habilidade em reproduzir características do Fluxo de Poiseuille, que são gradiente de pressão na direção x com $p = p(x)$ somente e perfil parabólico de velocidades em toda seção x com $u_x = u_x(y)$ somente;
- Intervalo possível de velocidade, com erro aceitável em relação à solução analítica.

O método de Lattice-Boltzmann apresentou boa reprodutibilidade do resultado analítico no intervalo de número de Reynolds utilizado no estudo, $Re \leq 0,56$, tanto nas simulações monofásicas bidimensionais em geometria entre placas planas realizadas em MATLAB e C++, quanto nas simulações monofásicas

tridimensionais em geometria tubo realizadas em C++.

Considerando o domínio de $Re \leq 0,56$, independente da condição de contorno adotada, o erro ficou restrito a 1,41% na geometria entre placas planas e a 2,45% na geometria de tubo.

A condição de contorno de velocidade imposta na entrada e pressão imposta na saída apresentou menores erros, quando comparada à condição de contorno de velocidade imposta na entrada e na saída. Para $Re \leq 0,56$ e geometria tubo com $L = 1 \text{ mm}$, o erro ficou restrito a 1,77% nesta condição de contorno com amarração de pressão em um ponto do escoamento. O erro foi ainda menor, 0,82%, em simulações com geometria tubo com $L = 0,4 \text{ mm}$. Por este motivo, foi a condição de contorno adotada nos estudos avaliados.

Simulações divergem com velocidades impostas superiores a 0,03 m/s. Esta limitação nas velocidades máximas adotadas na simulação decorre da natureza de compressibilidade artificial do método de Lattice-Boltzmann, para o qual se orienta trabalhar com velocidades da ordem de até 0,1 m/s.

No intervalo de velocidades nos quais se observa convergência, as métricas de regime permanente aplicadas à pressão e à quantidade de movimento ficaram restritas a $1\text{E-}08$ nas simulações tridimensionais.

A qualidade do resultado em relação à discretização utilizada foi também investigada. Foi constatado não ser possível se afirmar automaticamente que a introdução de uma malha mais refinada é responsável por uma maior acurácia na simulação, uma vez que menores tamanhos característicos da rede estão relacionados com tempos de relaxação ligeiramente maiores. Conforme apresentado anteriormente, quanto maiores forem os tempos de relaxação, maiores os erros do método. Desta forma, apesar de ambas as discretizações testadas serem apropriadas, cada discretização se mostrou mais adequada a um determinado intervalo de Re .

Demonstrou-se que o método de Lattice-Boltzmann apresenta oscilações inerentes ao método, tanto no período transiente inicial, quanto no transiente de pequeníssima escala associado à propagação conjugada com a tendência dada pelo

gradiente de pressão imposto pela condição de contorno. A inserção da terceira dimensão e a amarração da pressão em um dos contornos são responsáveis pela suavização das oscilações observadas com maior intensidade no período transiente inicial das simulações bidimensionais.

O escoamento monofásico em geometria tridimensional de capilar restrito apresentou crescimento linear da queda de pressão com a vazão e maior perda de carga no escoamento, em comparação com escoamento em capilar reto. A validação da queda de pressão nesta geometria foi realizada comparando o resultado com a queda de pressão analítica calculada usando raio equivalente. O erro aumenta conforme Re cresce, ficando inferior a 4% e a 6% para $Re = 0,28$ e capilares de, respectivamente, $100\ \mu\text{m} \times 50\ \mu\text{m}$ e $200\ \mu\text{m} \times 50\ \mu\text{m}$.

Em tentativas de se trabalhar com maiores viscosidades e maiores tensões interfaciais, foram observadas instabilidades numéricas graves. No caso das viscosidades, este comportamento está associado à limitação no uso de tempos de relaxação superiores a 20.

Ainda quanto à viscosidade, grande restrição foi verificada na adoção de viscosidades elevadas no método de Lattice-Boltzmann. Isto se deve à relação entre viscosidade e tempo de relaxação e à forte correlação positiva entre tempo de relaxação e erro da simulação. Este fator é, portanto, responsável pela limitação imposta ao intervalo possível de tempos de relaxação a serem utilizados.

Pelo motivo citado acima, não foi possível, neste estudo, replicar exatamente o trabalho de Roca-Reyes (2011), com adoção de mesmas magnitudes em todas as variáveis, uma vez que, no estudo de referência, são utilizadas altas viscosidades na fase contínua e na fase dispersa.

A inserção da gota no escoamento bifásico através de um capilar reto ou restrito não afeta, significativamente, a queda de pressão no regime permanente em relação a caso monofásico.

Nas simulações com geometria restrita, confirma-se que os pontos característicos da assinatura de pressão, como o início do aumento da queda de pressão e o pico da queda de pressão, estão associados a posições específicas com

deformações da gota associadas.

Não são observadas deformações morfológicas com concavidade negativa da interface na metade posterior da gota, conforme observado no estudo de referência, o que se suspeita estar associado à aplicação do operador recoloração.

A depender do balanço testado entre forças interfaciais, viscosas e inerciais, foram observados comportamentos não físicos, como quedas de pressão negativas em escoamento com vazão imposta. Tal fenômeno foi observado em simulações bidimensionais com tensão interfacial de elevada magnitude.

As forças interfaciais se mostraram mais importantes do que as demais forças atuantes no sistema para a obtenção da mesma assinatura de queda de pressão. Para o intervalo de números de Reynolds testados ($Re < 0,1$) e para escoamento bifásico em contração e expansão, condições esperadas para o escoamento em meios porosos, a adequação do número de capilaridade se mostrou mais relevante do que a adequação do número de Reynolds.

Além de afetar fortemente o escoamento pela realização de forças associadas à deformação da gota, que ocorre no fluxo pela restrição, a tensão interfacial de alta magnitude aumenta a distorção do campo de pressão nas extremidades da gota.

Esta distorção, que é propagada nas direções principais da rede, é mais visível em testes com viscosidade e tensão interfaciais elevadas. É introduzida pelos operadores perturbação e recoloração, responsáveis, respectivamente, pela inserção da tensão interfacial e pela segregação das fases e nitidez da interface.

Com o objetivo de obter algoritmo com menor tempo de computação, observou-se ser melhor utilizar linguagem compilada do que linguagem interpretada, ao se verificar uma limitação na capacidade de otimização do código MATLAB.

Para se validar o resultado deste estudo com o estudo de referência, dada a impossibilidade de se trabalhar com a mesma viscosidade, optou-se por trabalhar com os mesmos números adimensionais, alterando os valores de velocidade e

tensão interfacial.

Provou-se difícil alterar outras variáveis, como a massa específica e a geometria do capilar, na tentativa de se adequar os números adimensionais. A alteração destas variáveis está diretamente relacionada com os tamanhos característicos da malha, que estão relacionados com o tempo de relaxação, ou culminaria na obtenção de malhas de pequenas dimensões, as quais são inapropriadas ao estudo. A necessidade de uso de velocidades muito baixas impactou fortemente o tempo de simulação.

Constatou-se que a tensão interfacial está sendo bem representada nos casos com número de capilaridade finito e infinito. Na avaliação da tensão interfacial efetivamente apresentada pela simulação, observou-se que:

- Há manutenção da tensão interfacial aplicada, não havendo variação substancial da tensão interfacial nos tempos inicial e de pico de queda de pressão;
- A faixa de tensão interfacial efetiva, calculada com base na diferença de pressão entre as fases, inclui ou tem seu limite superior muito próximo ao valor da tensão superficial imposta na simulação;
- A imposição do maior valor de β , igual a 1.0, melhora ligeiramente a representação da tensão interfacial imposta.

Nos casos com tensão interfacial nula e não nula, ao se estudar o escoamento bifásico em geometria tridimensional restrita, observou-se a dependência entre o fator redutor de mobilidade f e a razão de geometria R_{GEO} , conforme apresentado no estudo de referência. Quanto maior R_{GEO} , menor f .

Apesar de apresentar esta mesma tendência, este estudo apresentou fatores f de menor magnitude do que os apresentados no estudo numérico de referência, tanto em casos com Ca finito, quanto em casos com Ca infinito. Os desvios percentuais com relação aos fatores f apresentados por Roca-Reyes (2011) aumentam com o aumento da razão de geometria.

A menor deformação experimentada pela gota neste estudo, causada pela aplicação do operador recoloração, que atua na segregação dos fluidos, pode ser a responsável por este resultado. Outra hipótese aventada para explicar este fenômeno é o contato mais intenso das gotas de maior dimensão com uma geometria de parede de capilar discretizada em elementos de rede.

Na avaliação de casos com Ca infinito, concluiu-se que a simples introdução de uma razão de viscosidade muito elevada, o que introduz um relevante desgaste numérico, é responsável pela inserção de desvios significativos ao se comparar os dois métodos numéricos.

Vale ressaltar que esta comparação é qualitativa, visto que ambos os métodos apresentam limitações. Um dos principais problemas apresentados pelo método de *level-set* é a não garantia de conservação de massa.

Em casos com Ca finito, os resultados apresentados neste estudo representaram de forma aceitável o comportamento obtido na avaliação experimental de Robles-Castillo (2011), o que valida a implementação e qualidade do estudo realizado.

Uma das principais conclusões do estudo é que o método empregado se mostrou pouco sensível à variação do número de capilaridade, apresentando valores de f muito próximos, independente do número de capilaridade testado, nos casos com razão de viscosidade 10. Este mesmo comportamento foi observado experimentalmente em Robles-Castillo (2011).

Ao se trabalhar com uma menor razão de viscosidade, observou-se uma maior sensibilidade do valor f com o número de capilaridade, conforme esperado. Além de possivelmente estar influenciado por maiores erros numéricos, este resultado também pode ser causado pelo menor efeito viscoso, o que permite a melhor observação do efeito capilar agindo na queda de pressão do escoamento.

Ao se comparar simulações com razão de viscosidade 2 e 10, observou-se, corretamente, a efetividade da atuação do efeito viscoso na perda de carga experimentada pelo escoamento.

Observou-se que o desvio percentual no valor simulado de f cresce quanto maior for o número de capilaridade. Cogita-se que a segregação das fases, introduzida pelo operador recoloração, seja responsável por este fenômeno, pois a gota apresenta deformação menos expressiva mesmo quando se aplica uma tensão interfacial de menor magnitude.

Constatou-se, também, a grande influência do parâmetro β do operador recoloração no fator f obtido na simulação. O baixo valor do parâmetro β , necessário para representar o fator f obtido no estudo de referência, se mostrou inadequado por inserir uma interface muito espessa e um perfil de pressão não bem definido.

O método de Lattice-Boltzmann aplicado a este estudo se mostrou capaz de reproduzir a dependência entre o fator redutor da mobilidade f e as variáveis principais do sistema razão de viscosidade e razão de geometria. A principal fragilidade observada foi a pequena sensibilidade apresentada com relação a diferentes números de capilaridade testados, ao se trabalhar com razão de viscosidade elevada.

Embora este resultado não reproduza integralmente a relação apresentada nas respostas numéricas de Roca-Reyes (2011), efeitos semelhantes foram observados nos ensaios experimentais realizados por Robles-Castillo (2011). A justificativa para tal comportamento seria a grande importância das forças viscosas, as quais mascarariam os efeitos capilares no incremento da queda de pressão ocasionado pela passagem da gota pela restrição.

Este comportamento pode estar associado ao operador recoloração, ou à geometria simplificada da parede, ou a erros numéricos mais significativos introduzidos pela utilização de uma elevada razão de viscosidade. Este fator de desgaste numérico pode afetar tanto os resultados deste estudo, que utiliza o método de Lattice-Boltzmann, quanto os do estudo de Roca-Reyes (2011), que utiliza o método de *level-set*.

5.1.

Sugestões para trabalhos futuros

Sugere-se a realização dos seguintes trabalhos:

- Estudar mais profundamente o operador recoloração e o comportamento do parâmetro β , possivelmente sugerindo alterações no algoritmo sugerido por Latva-Kokko & Rothman (2005), as quais seriam adequadas ao caso estudado de escoamento bifásico em contração e expansão;
- Testar outras formulações do método de Lattice-Boltzmann em estudos semelhantes ao apresentado, como as apresentadas por Shan & Chen (1993) com o modelo de potencial interpartícula, por Swift et al. (1996) com o modelo de energia livre e por He et al. (1998) com o modelo de teoria de campo médio;
- Implementar condições de contorno com distância variável do centro do elemento de rede à parede, como uma tentativa de melhor representar a geometria suave do capilar restrito; e
- Desenvolver código paralelo, o que permitiria obter simulações com menor tempo computacional ao se beneficiar da natureza local do algoritmo LBM e, portanto, daria azo à realização de maior número de análises ou de estudos com tempos de simulação mais longos, nos quais se evidenciaria uma possível divergência.

Referências bibliográficas

AIDUN, C.K., CLAUSEN, J.R.. Lattice-Boltzmann Method for Complex Flows. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Vol.42, p.439-472, 2010.

BAKER, R.O., YARRANTON, H.W., JENSEN, J.. **Practical reservoir engineering and characterization**. 1. ed. Oxford: Gulf Professional Publishing, Elsevier, 2015. 534p.

CHEN, S., DOOLEN, G.D., EGGERT, K.G.. Lattice-Boltzmann Fluid Dynamics: A Versatile Tool for Multiphase and Other Complicated Flows. **Los Alamos Science**, n.22, p. 99-111, 1994.

COBOS, S., CARVALHO, M.S., ALVARADO, V.. Flow of oil-water emulsions through a constricted capillary. **International Journal of Multiphase Flow**, Vol. 35, p. 507-515, 2009.

DONALDSON, E.C., CHILINGARIAN, G.V., YEN, T.F.. **Enhanced Oil Recovery, I: Fundamentals and Analyses**. 1. ed. New York: Elsevier, 1985. 356p.

FARIAS, M.L.R.. **Recuperação avançada de óleos pesados por injeção de emulsões diluídas de óleo em água**. Rio de Janeiro, 2013. 219p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Mecânica, PUC-Rio.

FOX, R.W., McDONALD, A.T., PRITCHARD, P.J., **Introduction to Fluid Mechanics**. 6. ed. Danvers: Wiley, 2003. 800p.

GUSTENSEN, A.K., ROTHMAN, D.H., ZALESKI, S., ZANETTI, G.. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids, **Phys. Rev. A**, vol. 43, p. 4320-4327, 1991.

HE, X., CHEN, S., DOOLEN, G.D.. A novel thermal model for the lattice

Boltzmann method in incompressible limit. **J. Comput. Phys.**, Vol. 146, p. 282-300, 1998.

LANDAU, L.D., LIFSCHITZ, E.M.. **Fluid Mechanics (Volume 6 of Course of Theoretical Physics)**. Traduzido por: Sykes, J.B., Reid, W.H.. 2. ed. Inglês revisada. New York: Pergamon Press, 1987. 554p.

LATVA-KOKKO, M., ROTHMAN, D.H.. Diffusion properties of gradient-based lattice Boltzmann models of immiscible fluids. **Physical Review E**, Vol.71, 056702, 2005.

LIU, H., VALOCCHI, A.J., KANG, Q.. Three-dimensional lattice Boltzmann model for immiscible two-phase flow simulations. **Physical Review E**, Vol. 85, 046309, 2012.

MOHAMAD, A.A.. **Lattice-Boltzmann Method Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes**. 1. ed. London: Springer, 2011. 178p.

OLBRICHT, W.L., LEAL, L.G.. The creeping motion of immiscible drops through a converging/diverging tube. **Journal of Fluid Mechanics**, Vol. 134, p. 329-355, 1983.

PHILIPPI, P.C., MATTILA, K.K., SIEBERT, D.N., SANTOS, L.O.E., HEGELE JR., L.A., SURMAS, R., Lattice-Boltzmann equations for describing segregation in non-ideal mixtures. **Journal of Fluid Mechanics**, Vol. 713, p. 564-587, 2012.

PRITCHARD, P.J., LEYLEGIAN, J.C.. **Fox and McDonald's Introduction to Fluid Mechanics**. 8. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2011. 875p.

ROBLES-CASTILLO, O.A.F.. **Análise experimental do escoamento de emulsões óleo em água através de micro-capilares com garganta**. Rio de Janeiro, 2011. 105p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica, PUC-RIO.

ROCA-REYES, J.F.. **Análise numérica do escoamento de emulsões**

através de capilares retos e capilares com garganta. Rio de Janeiro, 2011. 72p. Dissertação de Mestrado – Departamento de Engenharia Mecânica, PUC-RIO.

ROCA, J.F., CARVALHO, M.S.. Flow of a drop through a constricted microcapillary. **Computers & Fluids**, Vol. 87, p. 50-56, 2013.

ROSA, A.J., CARVALHO, R.S., XAVIER, J.A.D.. **Engenharia de reservatórios de petróleo.** 1. ed. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2006. 808p.

SHAN, X., CHEN, H.. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. **Physical Review E**, Vol. 47, p. 1815-1819, 1993.

SWIFT, M.R., ORLANDINI, S.E., OSBORN, W.R., YEOMANS, J.M.. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. **Physical Review E**, Vol. 54, p. 5041-5052, 1996.

TOLKE, J., KRAFCZYK, M., SCHULZ, M., RANK, E.. Lattice Boltzmann simulations of binary fluid flow through porous media. **Philosophical Transactions of The Royal Society A**, Vol. 360, p. 535-545, 2002.

VELLOSO, R.Q.. **Simulação numérica de problemas de acoplamento fluidomecânico em meios porosos utilizando o Método de Elementos Discretos.** Rio de Janeiro, 2010. 94p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Civil, PUC-RIO.

WHITE, F.M., **Fluid Mechanics.** 7. ed. New York: Mc-Graw Hill, 2009. 862p.

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

Apêndice A: Apresentação da rede D3Q19 utilizada neste trabalho

A rede utilizada neste trabalho é a rede D3Q19 apresentada na Figura 60.

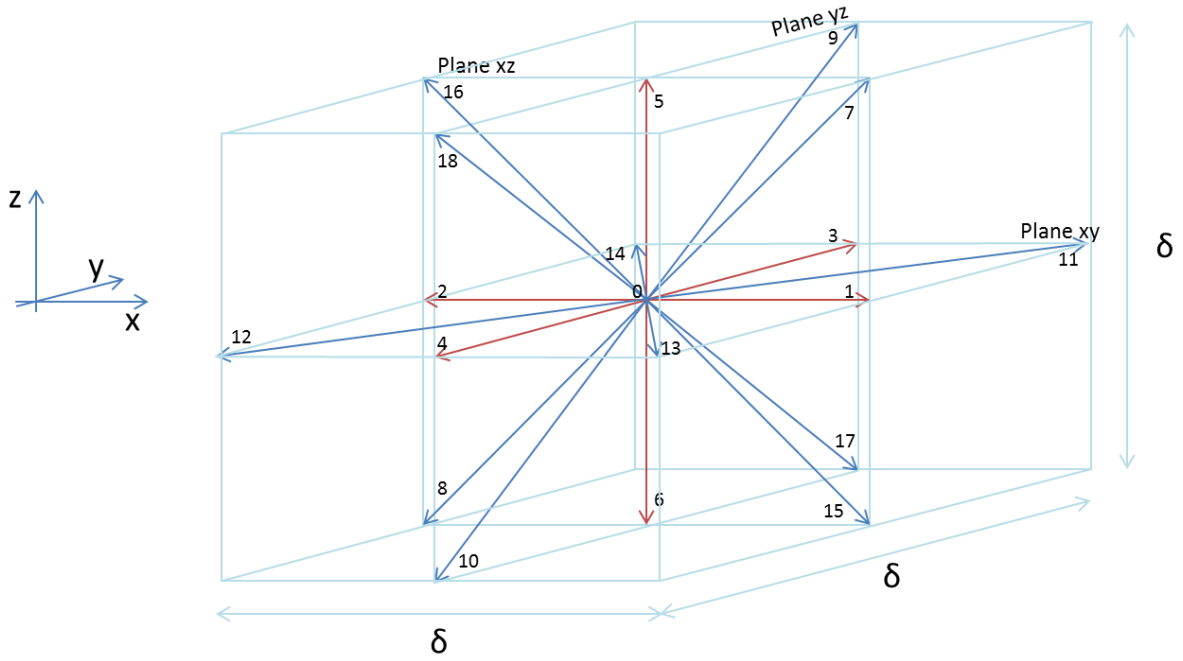


Figura 60: Diagrama de um elemento de rede utilizado neste estudo com 19 velocidades de rede \vec{e}_i .

As velocidades da rede são: $e_0 = (0,0,0)$; $e_1 = (1,0,0)$; $e_2 = (-1,0,0)$; $e_3 = (0,1,0)$; $e_4 = (0,-1,0)$; $e_5 = (0,0,1)$; $e_6 = (0,0,-1)$; $e_7 = (1,0,1)$; $e_8 = (-1,0,-1)$; $e_9 = (0,1,1)$; $e_{10} = (0,-1,-1)$; $e_{11} = (1,1,0)$; $e_{12} = (-1,-1,0)$; $e_{13} = (1,-1,0)$; $e_{14} = (-1,1,0)$; $e_{15} = (1,0,-1)$; $e_{16} = (-1,0,1)$; $e_{17} = (0,1,-1)$; $e_{18} = (0,-1,1)$.

Os coeficientes de pesos escalares w_i são $w_0 = 1/3$, $w_i = 1/18$ para $i = 1, 2, \dots, 6$, $w_i = 1/36$ para $i = 7, 8, \dots, 18$.

Apêndice B: Derivação das condições de contorno para rede D3Q19

As derivações das condições de contorno mais frequentemente usadas neste trabalho – velocidade imposta na entrada (Figura 61) e pressão imposta na saída (Figura 62) – são apresentadas a seguir.



Figura 61: Esquema de domínio com perfil parabolico de velocidade u_x imposto na entrada.



Figura 62: Esquema de domínio com pressão constante imposta na saída.

- Velocidade $u = (u_x, 0, 0)$ imposta na entrada

Após a propagação, as distribuições $f_0, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_8, f_9, f_{10}, f_{12}, f_{14}, f_{16}, f_{17}, f_{18}$ são conhecidas na seção de entrada. Deseja-se calcular ρ e as

distribuições não definidas f_1 , f_7 , f_{11} , f_{13} e f_{15} . Utilizando as equações de conservação de massa, $\sum_{i=0}^{18} f_i = \rho$, e de quantidade de movimento em x , $\sum_{i=0}^{18} f_i e_i|_x = \rho \cdot u_x$, são obtidas, respectivamente, as igualdades descritas nas eqs. (26) e (27).

$$\begin{aligned} f_1 + f_7 + f_{11} + f_{13} + f_{15} \\ = \rho - (f_0 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_8 + f_9 \\ + f_{10} + f_{12} + f_{14} + f_{16} + f_{17} + f_{18}) \end{aligned} \quad (26)$$

$$\rho \cdot u_x = f_1 - f_2 + f_7 - f_8 + f_{11} - f_{12} + f_{13} - f_{14} + f_{15} - f_{16} \quad (27)$$

Rearranjando a eq. (27), obtém-se a equação (28).

$$f_1 + f_7 + f_{11} + f_{13} + f_{15} = \rho \cdot u_x + (f_2 + f_8 + f_{12} + f_{14} + f_{16}) \quad (28)$$

Somando as equações (26) e (28), obtém-se a eq. (29), através da qual a massa específica ρ é definida com base nas distribuições conhecidas e na velocidade u_x .

$$\rho = \frac{1}{1 - u_x} [f_0 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_9 + f_{10} + f_{17} + f_{18} + 2 \cdot (f_2 + f_8 + f_{12} + f_{14} + f_{16})] \quad (29)$$

As distribuições desconhecidas são determinadas se impondo *bounceback* das distribuições de não equilíbrio (eq. (30)), conforme proposto por Zou & He (1997).

$$\begin{aligned} f_1^{neq} &= f_1 - f_1^{eq} = f_2^{neq} = f_2 - f_2^{eq} \\ \therefore f_1 &= f_2 + (f_1^{eq} - f_2^{eq}) \end{aligned} \quad (30)$$

Substituindo a distribuição de equilíbrio na eq. (30) e sabendo que $w_1 = w_2 = 1/18$, obtém-se a eq. (31), na qual f_1 é definida em função de u_x , a distribuição conhecida f_2 , a recém-calculada ρ e a velocidade da rede c .

$$\begin{aligned} f_1 &= f_2 + \rho \left\{ w_1 \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_1 \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_1 \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u^2 - \frac{3}{c^2} e_2 \cdot u \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{9}{2c^4} (e_2 \cdot u)^2 + \frac{3}{2c^2} u^2 \right] \right\} \\ &= f_2 + \rho \left\{ w_1 \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_1 \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_1 \cdot u)^2 - \frac{3}{c^2} e_2 \cdot u - \frac{9}{2c^4} (e_2 \cdot u)^2 \right] \right\} \\ &= f_2 + \rho \left\{ w_1 \cdot \left[\frac{3}{c^2} u_x + \frac{9}{2c^4} u_x^2 - \frac{3}{c^2} \cdot (-u_x) - \frac{9}{2c^4} (-u_x)^2 \right] \right\} \\ &= f_2 + \rho \left\{ \frac{1}{18} \cdot \left[\frac{6}{c^2} u_x \right] \right\} = f_2 + \frac{\rho}{3c^2} \cdot u_x \end{aligned} \quad (31)$$

Analogamente aplicando o *bounceback* das distribuições de não equilíbrio para a distribuição f_7 , sabendo que $w_7 = w_8 = 1/36$, obtém-se a eq. (32).

$$\begin{aligned} f_7 &= f_8 + (f_7^{eq} - f_8^{eq}) \\ &= f_8 + \rho \left\{ w_7 \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_7 \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_7 \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u^2 - \frac{3}{c^2} e_8 \cdot u \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{9}{2c^4} (e_8 \cdot u)^2 + \frac{3}{2c^2} u^2 \right] \right\} \\ &= f_8 + \rho \left\{ w_7 \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_7 \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_7 \cdot u)^2 - \frac{3}{c^2} e_8 \cdot u - \frac{9}{2c^4} (e_8 \cdot u)^2 \right] \right\} \\ &= f_8 + \rho \left\{ w_7 \cdot \left[\frac{3}{c^2} u_x + \frac{9}{2c^4} u_x^2 - \frac{3}{c^2} \cdot (-u_x) - \frac{9}{2c^4} (-u_x)^2 \right] \right\} \\ &= f_8 + \rho \left\{ \frac{1}{36} \cdot \left[\frac{6}{c^2} u_x \right] \right\} = f_8 + \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x \end{aligned} \quad (32)$$

Para que as distribuições f_i , $i \in \{7, 8, \dots, 18\}$, recuperem corretamente o momento em y e z no caso tridimensional, Maier et al. (1996), apud Zou & He (1997) sugerem a adição do termo $\frac{1}{4} e_{iy} \delta_y + \frac{1}{4} e_{iz} \delta_z$ à distribuição obtida f_i , sendo

e_{iy} a componente y de e_i , ou seja, $e_{iy} = e_i \cdot (0,1,0)$, $\delta_y = f_3 - f_4$ e $\delta_z = f_5 - f_6$.
Desta forma, a distribuição f_7 correta é a descrita na eq. (33).

$$\begin{aligned} f_7 &= f_8 + \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x - \frac{1}{4} e_{7y} \delta_y - \frac{1}{4} e_{7z} \delta_z \\ &= f_8 + \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x - \frac{1}{4} \cdot 0 \cdot (f_3 - f_4) - \frac{1}{4} \cdot 1 \cdot (f_5 - f_6) \\ &= f_8 + \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x - \frac{1}{4} (f_5 - f_6) \end{aligned} \quad (33)$$

Analogamente aplicando o *bounceback* das distribuições de não equilíbrio para a distribuição f_{11} , sabendo que $w_{11} = w_{12} = 1/36$ e adicionando δ_y e δ_z , obtém-se a eq. (34).

$$\begin{aligned} f_{11} &= f_{12} + \rho \left\{ w_{11} \right. \\ &\quad \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_{11} \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_{11} \cdot u)^2 - \frac{3}{c^2} e_{12} \cdot u \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{9}{2c^4} (e_{12} \cdot u)^2 \right] \right\} - \frac{1}{4} e_{11y} \delta_y - \frac{1}{4} e_{11z} \delta_z \\ &= f_{12} + \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x - \frac{1}{4} (f_3 - f_4) \end{aligned} \quad (34)$$

Analogamente aplicando o *bounceback* das distribuições de não equilíbrio para a distribuição f_{13} , sabendo que $w_{13} = w_{14} = 1/36$ e adicionando δ_y e δ_z , obtém-se a eq. (35).

$$\begin{aligned} f_{13} &= f_{14} + \rho \left\{ w_{13} \right. \\ &\quad \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_{13} \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_{13} \cdot u)^2 - \frac{3}{c^2} e_{14} \cdot u \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{9}{2c^4} (e_{14} \cdot u)^2 \right] \right\} - \frac{1}{4} e_{13y} \delta_y - \frac{1}{4} e_{13z} \delta_z \\ &= f_{14} + \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x + \frac{1}{4} (f_3 - f_4) \end{aligned} \quad (35)$$

Analogamente aplicando o *bounceback* das distribuições de não equilíbrio para a distribuição f_{15} , sabendo que $w_{15} = w_{16} = 1/36$ e adicionando δ_y e δ_z , obtém-se a eq. (36).

$$\begin{aligned}
 f_{15} = f_{16} + \rho \Big\{ & w_{15} \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_{15} \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_{15} \cdot u)^2 - \frac{3}{c^2} e_{16} \cdot u \right. \\
 & \left. - \frac{9}{2c^4} (e_{16} \cdot u)^2 \right] \Big\} - \frac{1}{4} e_{15y} \delta_y - \frac{1}{4} e_{15z} \delta_z \\
 & = f_{16} + \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x + \frac{1}{4} (f_5 - f_6)
 \end{aligned} \tag{36}$$

Desta forma, todas as distribuições desconhecidas estão definidas a partir das distribuições conhecidas, da velocidade u_x , da velocidade da rede c e da recém-calculada massa específica ρ .

b. Pressão imposta na saída

A imposição de uma pressão constante, p_{sai} , na seção de saída está relacionada com a imposição da massa específica ρ nos elementos de rede que compõem esta seção, conforme exposto na eq. (23).

Adicionalmente, impõe-se que as componentes em y e em z da velocidade na entrada, u_y e u_z , sejam nulas.

Após a propagação, são conhecidas as distribuições $f_0, f_1, f_3, f_4, f_5, f_6, f_7, f_9, f_{10}, f_{11}, f_{13}, f_{15}, f_{17}, f_{18}$. Deseja-se calcular a componente em x da velocidade, u_x , e as distribuições não definidas f_2, f_8, f_{12}, f_{14} e f_{16} .

Utilizando as equações de conservação de massa e de quantidade de

movimento em x , são obtidas, respectivamente, as igualdades descritas nas eqs. (37) e (38).

$$\begin{aligned} f_2 + f_8 + f_{12} + f_{14} + f_{16} \\ = \rho - (f_0 + f_1 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_9 \\ + f_{10} + f_{11} + f_{13} + f_{15} + f_{17} + f_{18}) \end{aligned} \quad (37)$$

$$\rho \cdot u_x = f_1 - f_2 + f_7 - f_8 + f_{11} - f_{12} + f_{13} - f_{14} + f_{15} - f_{16} \quad (38)$$

As equações (37) e (38) são rearranjadas de forma a se determinar u_x a partir das distribuições conhecidas e de ρ , conforme exposto na eq. (39).

$$\begin{aligned} u_x = \\ = -1 + \frac{1}{\rho} [f_0 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_9 + f_{10} + f_{17} + f_{18} + 2 \\ \cdot (f_1 + f_7 + f_{11} + f_{13} + f_{15})] \end{aligned} \quad (39)$$

As distribuições desconhecidas são calculadas utilizando a mesma lógica exposta nas eqs. (30), (31), (32), (33), (34), (35) e (36) do item anterior.

$$\begin{aligned} f_2 = f_1 + \rho \left\{ \phi_2 + w_2 \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_2 \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_2 \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u^2 \right] - \phi_1 - w_1 \right. \\ \left. \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_1 \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_1 \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u^2 \right] \right\} \\ = f_1 + \rho \left\{ w_2 \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_2 \cdot u - \frac{3}{c^2} e_1 \cdot u \right] \right\} \\ = f_1 + \rho \left\{ \frac{1}{18} \cdot \frac{3}{c^2} \cdot [-u_x - (u_x)] \right\} = f_1 - \frac{\rho}{3c^2} \cdot u_x \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} f_8 = f_7 + \rho \left\{ w_7 \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_8 \cdot u - \frac{3}{c^2} e_7 \cdot u \right] - \frac{1}{4} \cdot (0) \cdot \delta_y - \frac{1}{4} \cdot (-1) \cdot \delta_z \right. \\ = f_7 + \rho \left\{ \frac{1}{36} \cdot \left[\frac{3}{c^2} \cdot (-2u_x) \right] \right\} + \frac{1}{4} (f_5 - f_6) \\ = f_7 - \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x + \frac{1}{4} (f_5 - f_6) \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned}
 f_{12} &= f_{11} + \rho \left\{ w_{11} \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_{12} \cdot u - \frac{3}{c^2} e_{11} \cdot u \right] \right\} - \frac{1}{4} e_{12y} \delta_y - \frac{1}{4} e_{12z} \delta_z \\
 &= f_{11} - \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x + \frac{1}{4} (f_3 - f_4)
 \end{aligned} \tag{42}$$

$$\begin{aligned}
 f_{14} &= f_{13} + \rho \left\{ w_{14} \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_{14} \cdot u - \frac{3}{c^2} e_{13} \cdot u \right] \right\} - \frac{1}{4} (f_3 - f_4) \\
 &= f_{13} - \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x - \frac{1}{4} (f_3 - f_4)
 \end{aligned} \tag{43}$$

$$\begin{aligned}
 f_{16} &= f_{15} + \rho \left\{ w_{16} \cdot \left[\frac{3}{c^2} e_{16} \cdot u - \frac{3}{c^2} e_{15} \cdot u \right] \right\} - \frac{1}{4} (f_5 - f_6) \\
 &= f_{15} - \frac{\rho}{6c^2} \cdot u_x - \frac{1}{4} (f_5 - f_6)
 \end{aligned} \tag{44}$$

Apêndice C: Memória de cálculo da conversão de unidades e obtenção de números adimensionais utilizados nas simulações bidimensionais

As constantes de conversão entre sistemas de unidade SI e LBM são:

$$\begin{cases} Dm = 2,14335e^{-14}kg \\ Dx = 2,77778e^{-6}m \\ Dt = 2,77778e^{-6}s \end{cases} \quad (45)$$

A título de exemplo, exibe-se a memória de cálculo para conversão da viscosidade dinâmica do sistema de unidades SI para o sistema de unidades LBM. A lógica exposta na conversão deste parâmetro é utilizada na conversão de todos os parâmetros.

$$\begin{aligned} \mu_w|_{LBM} &= \mu_w|_{SI} \left[Pa.s = \frac{kg}{m.s} \right] * \frac{Dx.Dt}{Dm} \\ &= 0,001004 \frac{kg}{m.s} * \frac{2,77778e^{-6}m * 2,77778e^{-6}s}{2,14335e^{-14}kg} \\ &= 0,36144 \end{aligned} \quad (46)$$

A Tabela 11 sumariza os valores dos parâmetros utilizados em ambos os sistemas de unidade.

Dado que a rede escolhida tem velocidade $c = Dx/Dt$ unitária, o tempo de relaxação τ_w é obtido utilizando a eq. (13), conforme exposto na eq. (47).

$$\begin{aligned}
\tau_w &= \left(\frac{v_w}{\delta_t} \cdot \frac{3}{c^2} + \frac{1}{2} \right) \Big|_{LBM} = 3 \cdot v_w|_{LBM} + \frac{1}{2} \\
&= 3 \cdot v_{SI}[m^2/s] \cdot \frac{Dt[s]}{(Dx[m])^2} + 0,5 \\
&= 3 \cdot \frac{\mu_{SI}}{\rho_{SI} \cdot Dx[m]} + 0,5 = 1,58432
\end{aligned} \tag{47}$$

Sistema de Unidades	SI	LBM
ρ	1000 kg/m ³	1
$V_{média}$	0,003773 m/s	0,003773
μ_w	0,001004 Pa.s	0,36144
$\phi_{capilar}$	0,1 mm	36
σ_w	0,978 mN/m	0,352071

Tabela 11: Parâmetros utilizados nas simulações tridimensionais bifásicas iniciais.

Desta forma, os números adimensionais são calculados conforme exposto nas eqs. (48), (49), (50) e (51), utilizando parâmetros nos sistemas de unidades SI e LBM.

$$Re_{LBM} = \frac{\rho V_{média} \phi_{capilar}}{\mu_w} = \frac{1 \cdot 0,003773 \cdot 36}{0,36144} = 3,76 \cdot 10^{-1} \tag{48}$$

$$\begin{aligned}
Re_{SI} &= \frac{\rho V_{média} \phi_{capilar}}{\mu_w} = \\
&= \frac{1000 \text{ kg/m}^3 \cdot 0,003773 \text{ m/s} \cdot 0,1 \cdot 10^{-3} \text{ m}}{0,001004 \text{ Pa.s}} \\
&= 3,76 \cdot 10^{-1}
\end{aligned} \tag{49}$$

$$Ca_{LBM} = \frac{\mu_w V_{média}}{\sigma_w} = \frac{0,36144 \cdot 0,003773}{0,352071} = 3,873 \cdot 10^{-3} \tag{50}$$

$$\begin{aligned}
Ca_{SI} &= \frac{\mu_w V_{média}}{\sigma_w} = \frac{0,001004 \text{ Pa.s} \cdot 0,003773 \text{ m/s}}{0,978 \cdot 10^{-3}} \\
&= 3,873 \cdot 10^{-3}
\end{aligned} \tag{51}$$

Apêndice D: Métricas de regime permanente de pressão e quantidade de movimento

- Pressão

$$SS_P = \frac{|\Delta P^{Simulado}(t + \delta t) - \Delta P^{Simulado}(t)|}{|\Delta P^{Simulado}(t)|} \quad (52)$$

Onde $\Delta P^{Simulado}(t)$ é a queda de pressão simulada no escoamento entre as faces de entrada e de saída medida na linha de simetria do capilar no tempo t .

- Quantidade de Movimento

$$SS_{QM} = \frac{\sum_i \sum_j \sum_k \left(\begin{array}{l} |P_x(i, j, k, t + \delta t) - P_x(i, j, k, t)| + \\ |P_y(i, j, k, t + \delta t) - P_y(i, j, k, t)| + \\ |P_z(i, j, k, t + \delta t) - P_z(i, j, k, t)| \end{array} \right)}{\sum_i \sum_j \sum_k \left(\begin{array}{l} |P_x(i, j, k, t)| + \\ |P_y(i, j, k, t)| + \\ |P_z(i, j, k, t)| \end{array} \right)} \quad (53)$$

Onde $P_t(i, j, k, t + \delta t) = \rho(i, j, k, t + \delta t) \cdot u_t(i, j, k, t + \delta t)$, em qualquer direção $t = \{x, y, z\}$.

Apêndice E: Extrapolações logarítmica e polinomial do fator f em função de Ca construídas a partir de resultados de Roca-Reyes (2011)

Foram utilizadas equações de tendência logarítmica e polinomial para correlacionar o número de capilaridade Ca com os resultados f de Roca-Reyes (2011), conforme exposto nas Figuras 63 e 64.

As equações de tendência logarítmica e polinomial estão apresentadas, respectivamente, nas eqs. (54) e (55).

$$\begin{cases} f = 0,0388 \ln(Ca) + 1,0217, & \text{para } R_{GEO} = 0,4 \\ f = 0,0757 \ln(Ca) + 0,8563, & \text{para } R_{GEO} = 0,7 \end{cases} \quad (54)$$

$$\begin{cases} f = -10,541x^2 + 1,8698x + 0,8385, & \text{para } R_{GEO} = 0,4 \\ f = -22,080x^2 + 3,7813x + 0,4966, & \text{para } R_{GEO} = 0,7 \end{cases} \quad (55)$$

A Tabela 12 mostra que a extrapolação logarítmica fornece menores estimativas de $f(Ca = 0,016)$. Este tipo de extrapolação foi utilizado para fornecer o limite inferior utilizado na análise realizada.

Caso	R_{GEO}	Equação	$f (Ca = 0,016)$
1	0,4	Polinomial	0,8660
		Logarítmica	0,8617
5	0,7	Polinomial	0,5521
		Logarítmica	0,5442

Tabela 12: Estimativa de $f(Ca = 0,016)$ utilizando extrapolações polinomial e logarítmica.

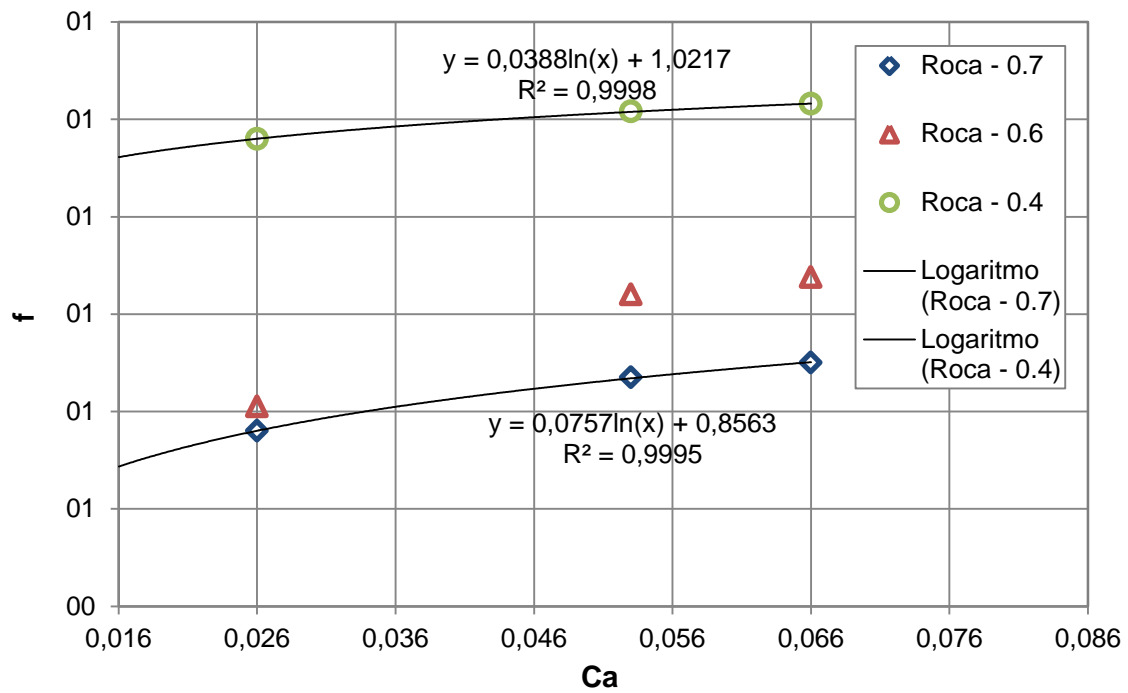


Figura 63: Extrapolação logarítmica de f como função de Ca para R_{GEO} igual a 0,4 e 0,7.

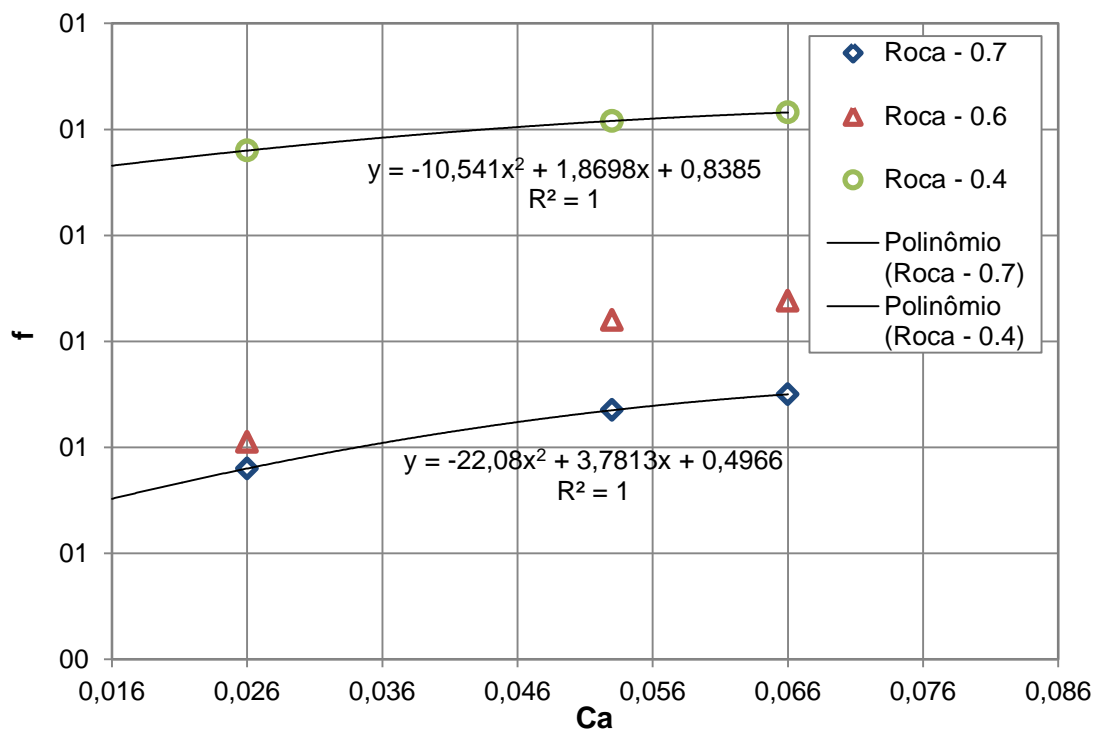


Figura 64: Extrapolação polinomial de f como função de Ca para R_{GEO} igual a 0,4 e 0,7.

Apêndice F: Cálculo da Tensão Interfacial σ da simulação com $Ca = 0,0162$, $\beta = 0,7$ e Caso 5 ($R_{GEO} = 0,7$)

Foram analisados os tempos relativos aos pontos identificados por um círculo vermelho na Figura 65, a qual expõe o diferencial de pressão na linha central do capilar. Estes tempos foram escolhidos por serem representativos do período inicial do escoamento pós transiente inicial e do pico de pressão, instante no qual a gota está em sua taxa máxima de deformação.

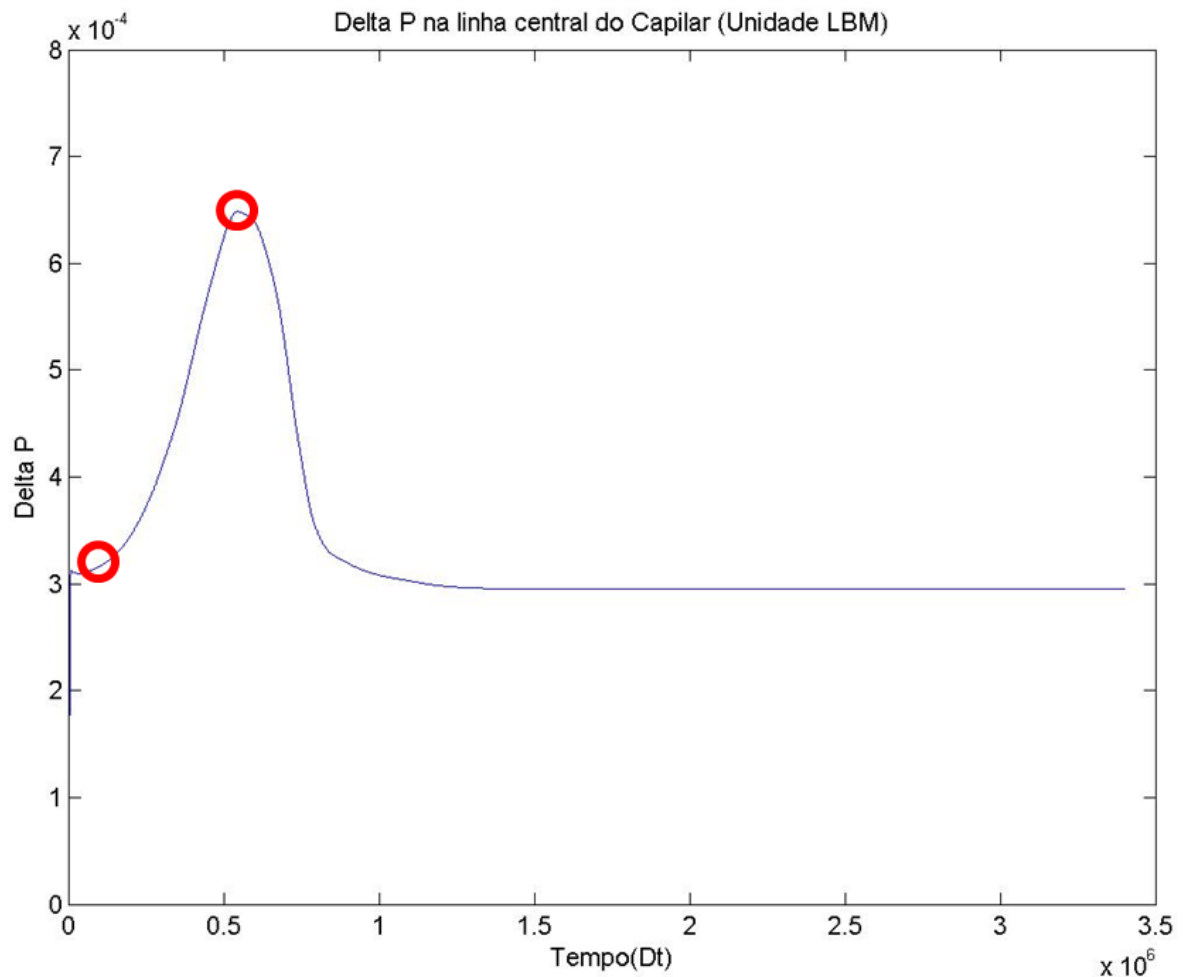


Figura 65: Diferencial de pressão no escoamento na linha central do capilar.

No primeiro instante de tempo, $19.000Dt$, o escoamento da gota ainda não está afetado pelo fluxo através da restrição, conforme exposto nas Figuras 66, 67 e 68.

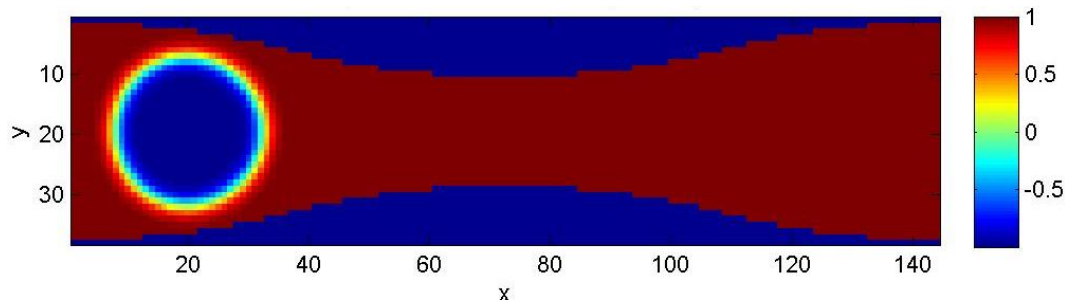


Figura 66: Parâmetro massa específica normalizada ρN avaliado na seção $nz/2$ no tempo $19.000Dt$.

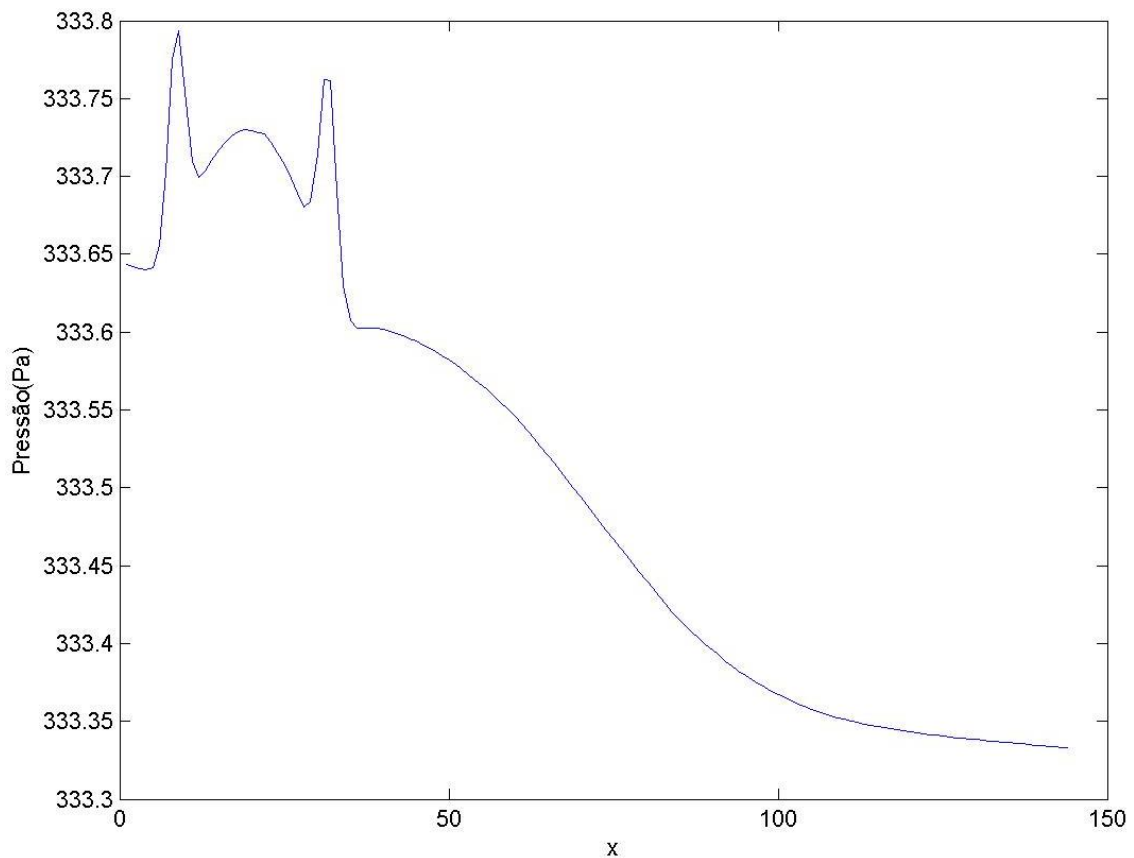


Figura 67: Pressão na linha central do capilar avaliada no instante $19.000 Dt$.

Já no segundo instante de tempo avaliado, 543.000 Dt, o escoamento da gota está totalmente afetado pelo fluxo através da restrição, conforme exposto nas Figuras 69, 70 e 71.

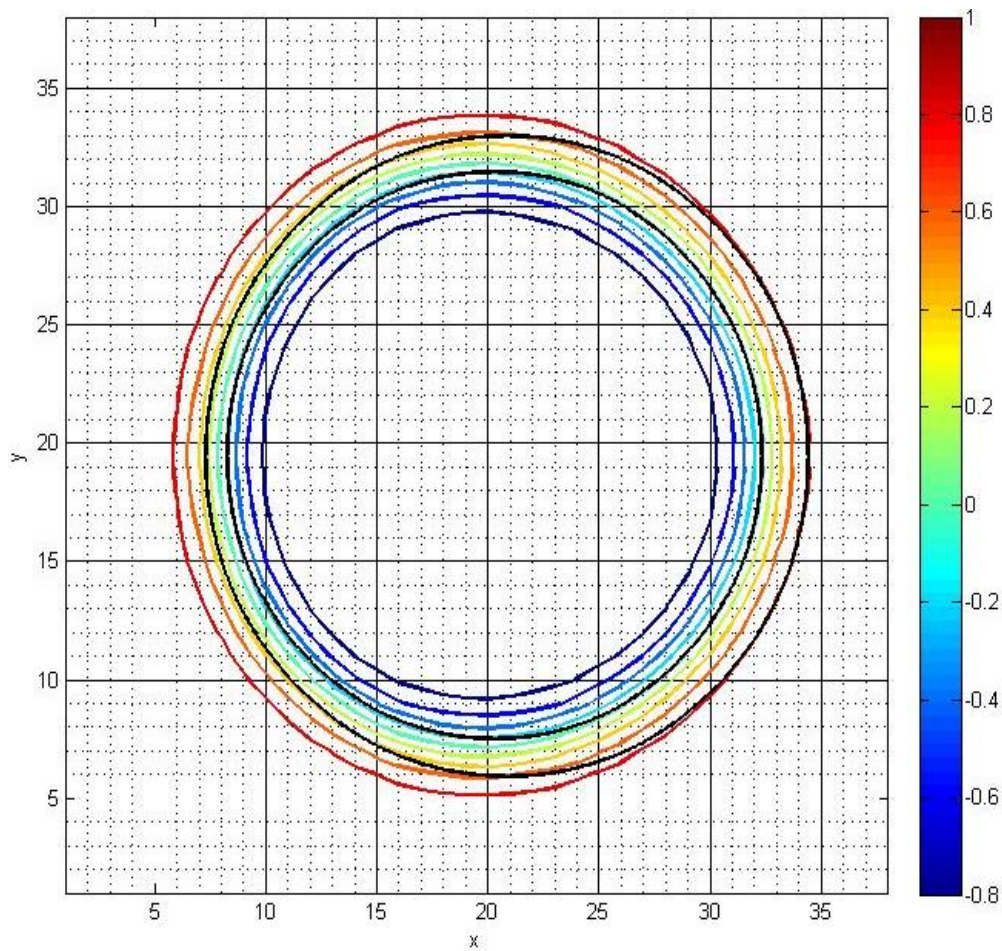


Figura 68: Curvas de nível do parâmetro massa específica normalizada ρN no instante 19.000 Dt com arcos de circunferências em preto utilizados para inferir a curvatura mínima e máxima.

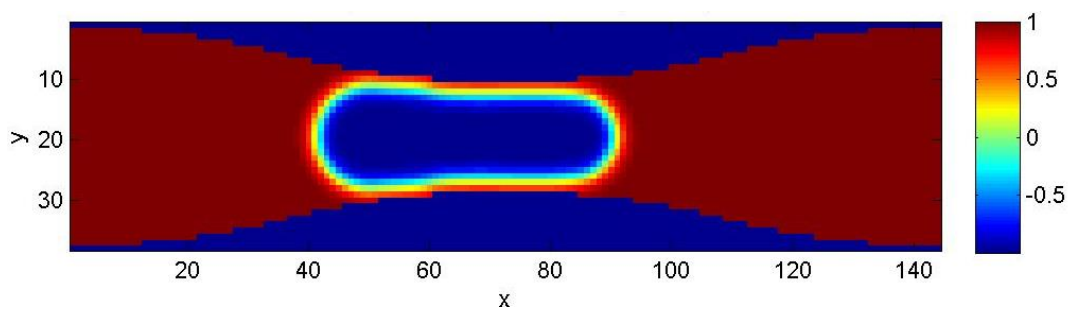


Figura 69: Parâmetro massa específica normalizada ρN avaliado na seção $nz/2$ no tempo 543.000Dt.

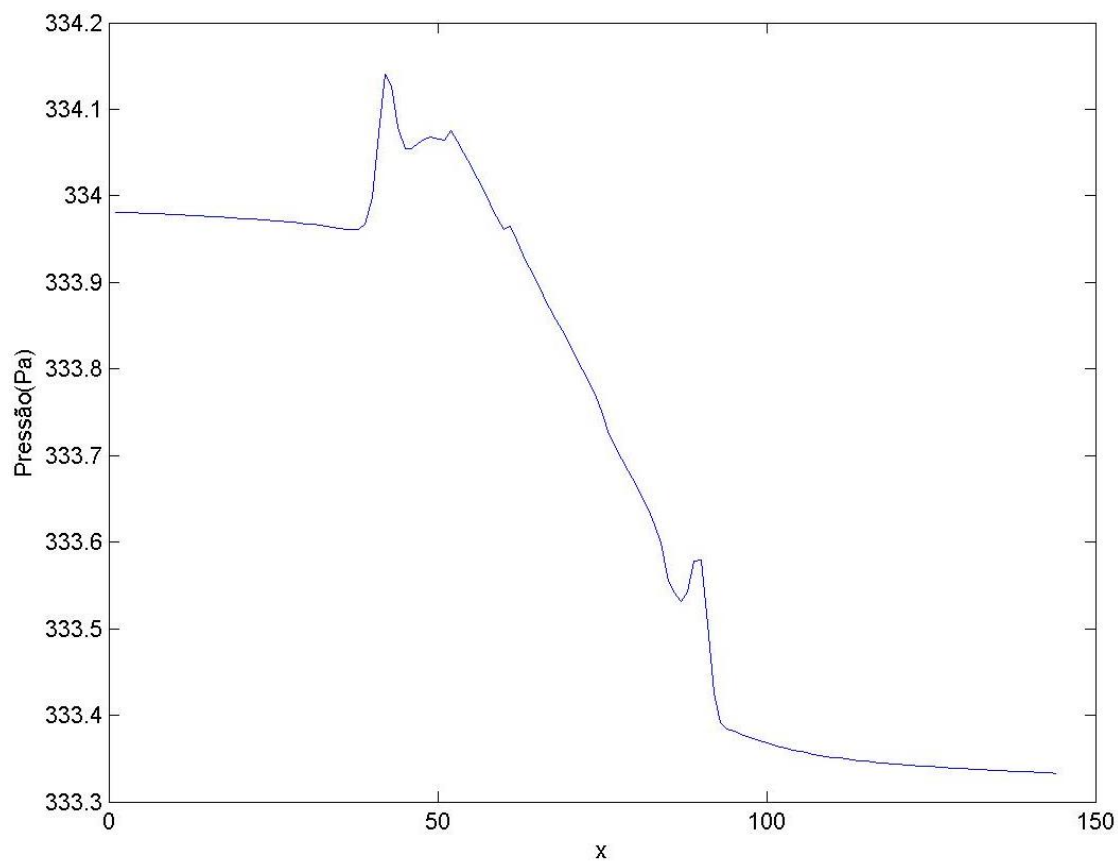


Figura 70: Pressão na linha central do capilar avaliada no instante 543.000 Dt.

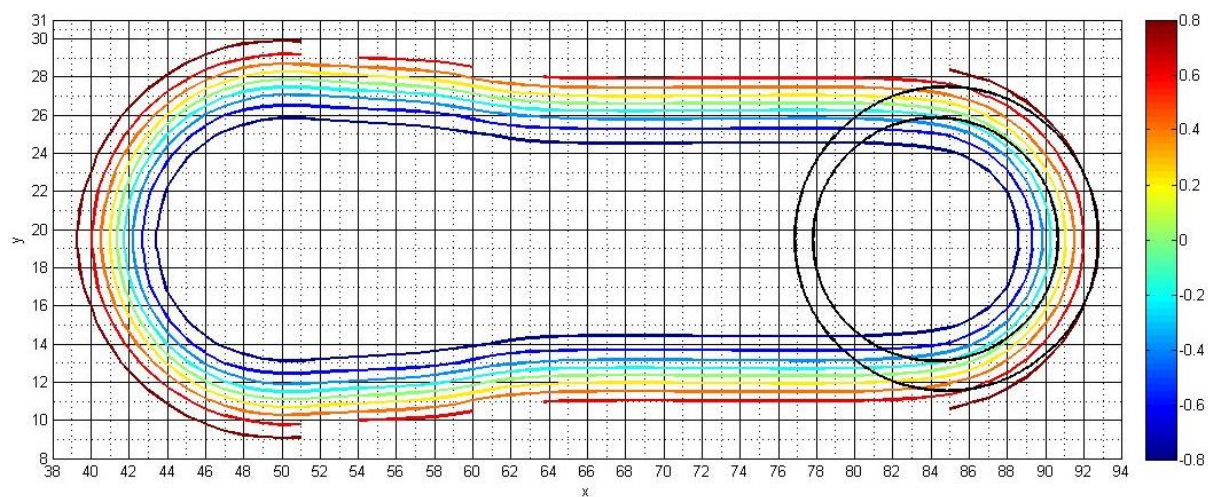


Figura 71: Curvas de nível do parâmetro massa específica normalizada ρN no instante 543.000 Dt com arcos de circunferências em preto utilizados para inferir a curvatura mínima e máxima.

As estimativas mínima e máxima das pressões capilares p_c e dos raios de curvatura R_{curv} nos dois intervalos de tempo estão descritas na Tabela 13, assim como a tensão interfacial efetiva, $\sigma^{efetiva}$, calculada com base nos parâmetros acima de acordo com a equação $\sigma^{efetiva} = p_c \cdot R_{curv}/2$.

Intervalo de tempo		19.000 Dt	543.000 Dt
Pressão Capilar p_c (Pa)	Mínimo	0,0779	0,1398
	Máximo	0,1598	0,1883
Raio de Curvatura R_{curv} (m)	Mínimo	3,33E-05	1,81E-05
	Máximo	3,75E-05	2,22E-05
Tensão Interfacial Efetiva $\sigma^{efetiva}$ (N/m)	Mínima	1,30E-06	1,26E-06
	Máxima	3,00E-06	2,09E-06

Tabela 13: Estimativas dos parâmetros pressão capilar, p_c , raio de curvatura, R_{curv} , e tensão interfacial efetiva, $\sigma^{efetiva}$, nos instantes de tempo 19.000 Dt e 543.000 Dt.

Anexo A: Lei de Poiseuille aplicada a escoamento entre placas planas e escoamento em tubo

Para a geometria tridimensional de escoamento em tubo circular, o perfil parabólico de velocidade $u_x(r)$, tal que $u_x(r) = u_{x,max} \cdot \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)$, tem usualmente sua velocidade máxima $u_{x,max}$ associada à vazão Q^{tubo} da forma $u_{x,max} = \frac{2Q^{tubo}}{\pi R^2}$, sendo R o raio do tubo. Esta relação pode ser derivada de acordo com as Equações (56) e (57).

$$\begin{aligned} u_{x,media}^{tubo} &= \frac{1}{\pi R^2} \cdot \int_0^R u_x(r) \cdot 2\pi r \, dr \\ &= \frac{u_{x,max}}{\pi R^2} \cdot \int_0^R \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \cdot 2\pi r \, dr \\ &= \frac{u_{x,max}}{\pi R^2} \cdot \left[\pi r^2 - \frac{2\pi}{R^2} \cdot \frac{r^4}{4} \right]_0^R = \frac{1}{2} \cdot u_{x,max} \end{aligned} \quad (56)$$

$$Q^{tubo} = u_{x,media}^{tubo} \cdot \pi R^2 = \frac{\pi R^2}{2} \cdot u_{x,max} \quad (57)$$

Entretanto, para a geometria bidimensional, o volume simulado não é o de um tubo, mas sim o de uma placa plana com abertura $H = 2R$ e espessura D_z , onde D_z é o tamanho característico do elemento de rede ($D_z = \delta_x$). Sendo o perfil parabólico de velocidade $u_x(y)$ da forma $u_x(y) = 4 \cdot u_{x,max} \cdot \left[\frac{y}{H} - \left(\frac{y}{H}\right)^2 \right] = u_{x,max} \cdot \frac{2yR - y^2}{R^2}$, a vazão Q^{placa} do escoamento nesta geometria é dada pela Equação (58).

$$\begin{aligned}
Q^{placa} &= u_{x,media}^{placa} \cdot 2R \cdot Dz = Dz \int_0^{2R} u_x(y) dy \\
&= Dz \int_0^{2R} u_{x,max} \cdot \frac{2yR - y^2}{R^2} dy \\
&= \frac{Dz \cdot u_{x,max}}{R^2} \cdot \left[Ry^2 - \frac{y^3}{3} \right]_0^{2R} = \frac{Dz \cdot u_{x,max}}{R^2} \cdot \frac{4R^3}{3} \\
&= \frac{4R \cdot Dz \cdot u_{x,max}}{3}
\end{aligned} \tag{58}$$

Dado que R e Dz são constantes, ao se adotar a mesma velocidade máxima $u_{x,max}$ em ambas as geometrias, a vazão no escoamento bidimensional, Q_{placa} , será inferior à vazão no escoamento tridimensional, Q_{tubo} . Para $R = 5e - 5m$ e $Dz = 2,78e - 6m$, $Q_{placa} = 3,70e^{-6} R u_{x,max} < Q_{tubo} = 7,85e^{-5} R u_{x,max}$.

Sendo μ a viscosidade dinâmica do fluido e L o comprimento do tubo, o diferencial de pressão ΔP para escoamento de Poiseuille em tubo é dado pela Equação (59) (Landau & Lifshitz, 1987).

$$\Delta P^{tubo} = \frac{-8\mu L Q}{\pi R^4} = \frac{-8\mu L u_{x,max} \pi R^2}{2\pi R^4} = \frac{-4\mu L u_{x,max}}{R^2} \tag{59}$$

O diferencial de pressão ΔP para escoamento de Poiseuille entre placas planas é dado pela Equação (60).

$$\Delta P^{placa} = \mu \cdot u_{x,max} \cdot \left(-\frac{2L}{R^2} \right) = \frac{-2\mu L u_{x,max}}{R^2} \tag{60}$$

Desta forma, $\Delta P^{placa} = 0,5 \cdot \Delta P^{tubo}$.

Anexo B: Definição de números adimensionais utilizados neste estudo

Sejam μ_w a viscosidade dinâmica, $\sigma_{Interface}$ a tensão interfacial na interface calculada pelas eqs. (14) e (17), ρ_w a massa específica da água, $\phi_{capilar}$ o diâmetro do capilar, c_s a velocidade do som na rede, c a velocidade da rede e $u_{x,média}$ e $u_{x,máximo}$ as velocidades média e máxima do perfil parabólico de velocidade. Os números adimensionais utilizados neste estudo foram:

- a. Número de capilaridade, Ca (Roca-Reyes, 2011):

$$Ca = \frac{\mu_w u_{x,média}}{\sigma_{Interface}} \quad (61)$$

$$Ca_{Max} = \frac{\mu_w u_{x,máximo}}{\sigma_{Interface}} \quad (62)$$

- b. Número de Reynolds, Re (Roca-Reyes, 2011):

$$Re = \frac{\rho_w u_{x,média} \phi_{capilar}}{\mu_w} \quad (63)$$

$$Re_{Max} = \frac{\rho_w u_{x,máximo} \phi_{capilar}}{\mu_w} \quad (64)$$

- c. Número de Mach, Ma (Mohamad, 2011):

$$Ma = \frac{u_{x,máximo}}{c_s} = \frac{u_{x,máximo}}{c/\sqrt{3}} \quad (65)$$