



João Pedro Sampaio de Abreu Pimenta

**Deslocamentos miscíveis tridimensionais em
células de Hele-Shaw para perfis de
viscosidade não-monotônicos**

Projeto de Graduação

Projeto de Graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio.

Orientador : Rafael M. Oliveira

Co-Orientador: Mônica F. Naccache

Rio de Janeiro
Junho de 2018

Agradecimentos

Primeiramente, dedico esse projeto à toda a minha família, que com muito carinho e apoio, não mediram esforços para que eu chegasse até essa etapa da minha vida. Gostaria de agradecer especialmente aos meus pais, que sempre me proporcionaram oportunidades de ensino de qualidade, essenciais na minha construção pessoal e profissional.

Agradeço também ao professor Rafael M. Oliveira pela paciência na orientação e incentivo que tornaram possível a conclusão desta monografia.

À professora Mônica Naccache, minha co-orientadora, e à todos os professores do departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio, que foram extremamente importantes na minha vida acadêmica e no desenvolvimento desse projeto de graduação.

Resumo

Deslocamentos miscíveis tridimensionais em células de Hele-Shaw para perfis de viscosidade não-monotônicos

Caso um fluido menos viscoso seja utilizado para deslocar outro mais viscoso, o gradiente desfavorável de mobilidade desencadeia o desenvolvimento de instabilidades na interface viscosa entre eles, conhecidas como instabilidades de Saffman-Taylor.

O estudo das instabilidades dessa interface viscosa em escoamentos tem sido ponto focal de diversas pesquisas ao longo das últimas décadas, principalmente devido ao aparecimento do fenômeno, também conhecido como “viscous fingering instability”, em diversos processos industriais, no qual se destaca a recuperação avançada de petróleo.

Historicamente, investigações acerca desse tema tem empregado a Lei de Darcy na modelagem do fenômeno físico. No entanto, a utilização dessa simplificação das equações de Navier-Stokes, envolve certos procedimentos de média que prejudicam a assertividade dos resultado caso a simulação seja realizada para escoamentos em células de Hele-Shaw.

Por isso, os estudos aqui realizados tiveram seus resultados calculados através da resolução numérica das equações completas de Navier-Stokes, acopladas às equações convectivas e difusivas, através do método DNS, a fim de estudar o comportamento linear e não-linear da interface entre pares de fluidos com perfil de viscosidade não-monotônico.

Além da validação primária dos métodos de discretização e resolução numérica, uma ênfase particular é colocada na identificação da influência da viscosidade relativa e do número de Péclet na mudança do comportamento do escoamento. Em segundo plano, foi realizado um estudo de otimização da resolução da malha a fim de reduzir o custo computacional de investigações futuras.

Através das simulações bidimensionais observamos o aparecimento de escoamentos com desenvolvimento referencialmente quasi-estacionários para a interface viscosa em caso de números de Péclet e viscosidade relativa suficientemente altas.

Estudos adicionais são necessários para o estudo da propagação dos dedos viscosos na presença de perturbações, assim como o estudo de cenários de caráter não-linear, a fim de futuramente desenvolver parametrizações da dinâmica do escoamento.

Palavras-chave

Instabilidades de Saffman-Taylor; viscous fingering; células de Hele-Shaw; perfil não-monotônico; DNS.

Abstract

Three-dimensional miscible displacements of nonmonotonic viscosity profile fluids in Hele-Shaw cells

Supposing the usage of a less viscous fluid to displace another more viscous, the unfavorable resulting mobility gradient triggers the development of viscous instabilities in the interface between both fluids, known as Saffman-Taylor Instabilities.

This particular viscous instability has been the case study of several thesis and investigations throughout the last decades, especially because of the several applications of such phenomenon, casually known as viscous fingering, in industrial processes, most notably the second and third recovery of oil extraction.

Historically, these investigations have been applying the Darcy's Law as the mathematical model for the flow dynamics. However, despite the fundamentally sound theory behind it, the averaging procedures of its development may hinder the assertiveness of the results of the simulation applied to flows in Hele-Shaw cells.

Therefore, the investigations here conducted had their results based in the solving of the direct numerical simulations, or DNS, of the complete three dimensional Navier-Stokes equations coupled with equations of convection and diffuseness. Our objective is to study the linear and non-linear behavior of the viscous interface between fluids pairs that present non-monotonic behaviors.

Besides the primary discrete modeling and numerical simulation, a particular emphasis is placed on the identification of influencing patterns of two governing parameters, the relative viscosity and Péclet number, on the change of behavior of the fluid flow. Simultaneously, optimization studies were conducted to identify the necessary resolution of the mesh discretization, in order to reduce the computational costs of further investigations. Through bi-dimensional simulations we were able to observe the development of quasi-steady state viscous interfaces in flows which featured sufficiently high viscosity ratios and Péclet numbers.

Further investigations will be needed to study the propagation of the viscous fingers in the presence of flow disturbances, as also to distinguish particularities of non-linear flows, in order to subsequently develop parametric solutions for the flow dynamics.

Keywords

Saffman-Taylor instabilities; viscous fingering; Hele-Shaw cells; non-monotonic profiles; DNS.

Sumário

1	Introdução	8
1.1	Motivação	11
2	Modelagem do problema	14
3	Metodologia numérica	18
3.1	Discretização	18
3.2	Condições de Contorno	20
3.3	Malha e a relevância da resolução	21
3.4	Validação	23
4	Resultados	25
4.1	Simulações DNS e o desenvolvimento do estado de escoamento unidirecional da espessura da interface	25
4.2	Influência do número de Pe e da viscosidade relativa	27
5	Próximos passos e considerações finais	29

Lista de figuras

1.1	Experimento em célula de Hele-Shaw realizado pela Universidade da Califórnia - Alberta	8
1.2	Instabilidade de Saffman-Taylor - Holmsy (1987) [12]	8
1.3	Demanda de petróleo por setor - Worldwide (2016)	11
1.4	WAG oil recovery	13
2.1	Desenho esquemático da geometria	14
2.2	Simulação de um escoamento de fluidos miscíveis em células de Hele-Shaw	14
2.3	Comparação dos resultados empíricos e numéricos referenciados por Schafroth para o perfil de viscosidade do par água-etanol [18]	16
2.4	Comparação dos perfis de viscosidade	17
3.1	Esquema explicativo de discretização de malhas intercaladas	21
3.2	Comparação entre as resoluções da malha para $Pe = 2000$	22
3.3	Decaimento do erro médio com o refinamento da malha	23
3.4	Erro percentual local para $Pe = 2000$	23
3.5	Definição do parâmetro d_0 como a distância entre os campos de concentração $c=0.1$ e $c=0.9$ no ponto de $z=y=0$	24
3.6	Erro percentual associado aos parâmetros d_0 e v_{tip} para variações de Pe e M	24
4.1	Corte 2-D da evolução temporal dos campos de viscosidade adimensional para uma simulação de $Pe = 2000$, $M=3$, $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$. Tempos de 0.5, 1.5 e 2.5 s respectivamente	25
4.2	Comparação do perfil de espessura da interface associados ao número de Péclet para $M=3$, $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$	26
4.3	Comparação do perfil temporal da velocidade da ponta da interface associados ao número de Péclet para $M=3$, $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$	26
4.4	Velocidade da ponta da interface viscosa como função do número de Pe para diferentes viscosidades relativas.	27
4.5	Velocidade da ponta da interface viscosa como função do número de Pe para diferentes viscosidades relativas, em que $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$	27
5.1	Simulações realizadas para o escoamento caracterizado por $Pe=2000$, $M=3$, $\mu_m = 1.5$ e $\lambda = 0$, mas com caráter tridimensional e sob efeito distintos de perturbações	29

1

Introdução

A célula de Hele-Shaw (Figura 1) foi desenvolvida por Henry Shelby Hele-Shaw em 1898 para estudar o escoamento de água a baixos números de Reynolds em torno de objetos.

Posteriormente, a geometria começou a ser utilizada no estudo de escoamentos em meios porosos, de modo que a magnitude da fenda entre as placas é muito inferior a largura deles, e por isso, podemos considerar somente as velocidades bidimensionais para caracterizar o desenvolvimento do escoamento. Abaixo podemos ver uma aplicação recente dessa geometria.

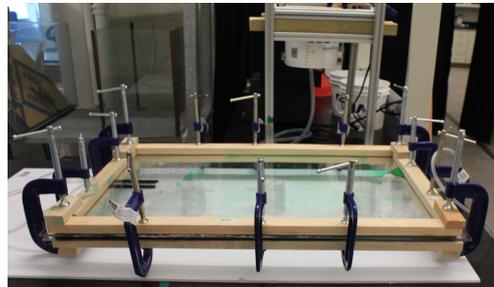


Figura 1.1: Experimento em célula de Hele-Shaw realizado pela Universidade da Califórnia - Alberta

Em geral, em um cenário no qual um fluido de baixa viscosidade é injetado em um meio poroso saturado de fluido de alta viscosidade, ao longo do tempo o desenvolvimento do escoamento faz com que a interface dos dois fluidos se torne instável e o fluido injetado permeie o fluido mais viscoso, apresentando padrões semelhantes a dedos no fluido de maior viscosidade. Isso reduz a eficiência no processo de deslocamento deste último.

Tal fenômeno é conhecido como instabilidade de Saffman-Taylor ou ainda como “viscous fingering”.

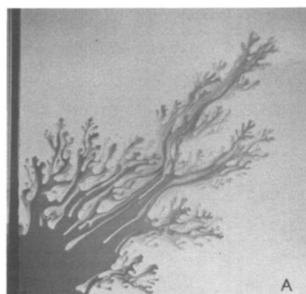


Figura 1.2: Instabilidade de Saffman-Taylor - Holmsy (1987) [12]

A instabilidade de Saffman-Taylor é a formação de padrões em uma interface morfologicamente instável entre dois fluidos em um meio poroso ou em uma célula de Hele-Shaw.

Esse tipo de instabilidade tem atraído muita atenção devido ao seu papel em uma ampla variedade de sistemas naturais e processos industriais, tais como hidrologia, filtração e, mais importante, processos de recuperação secundária e terciária de petróleo em meios porosos.

Inicialmente, as principais análises acerca do tema foram obtidas utilizando fluidos em que a variação espacial da mobilidade, definida como a taxa de permeabilidade do meio à viscosidade, é monótona. Para tais perfis, está bem estabelecido que um contraste de mobilidade desfavorável, medido pelas mobilidades dos pontos extremos de concentração, leva a instabilidades no escoamento.

O estudo dessas instabilidades teve início em 1952, quando Hill[5] realizou alguns experimentos para examinar o acoplamento entre instabilidades orientadas por gravidade e por viscosidade. Ao longo das décadas seguintes, os estudos neste campo foram continuados por muitos pesquisadores.

Nota-se ainda que um aspecto importante na maioria das referências é o uso de fluidos miscíveis, isto é, quando existe mistura, em quaisquer proporções, entre os fluidos em contato ocasionando o aparecimento, mesmo que local, de uma solução homogênea.

Em 1958, Saffman e Taylor realizaram um experimento usando a célula de Hele-Shaw para representar o fluxo superficial livre em um meio poroso. Eles foram capazes de mostrar que a instabilidade de uma interface se movendo em direção ao fluido mais viscoso pode produzir o crescimento de um único dedo longo ou múltiplos dedos viscosos, e conseqüentemente tiveram seus nomes associados ao fenômeno.

Em 1988, pela primeira vez, um método espectral de Fourier foi usado para estudar o comportamento não-linear dos dedos viscosos por Tan e Homsy [6]. Em suas simulações, o mecanismo de divisão de pontas foi apresentado pela primeira vez. Seus resultados também mostram uma boa concordância com sua análise anterior de estabilidade linear. Antes deste estudo, as simulações de caracterização do comportamento não-linear desse fenômeno apresentavam soluções pouco precisas.

A seguir, Zimmerman e Homsy [7] também simularam instabilidades de Saffman-Taylor multidimensionais por uma extensão dos métodos espectrais de Hartley a três dimensões. Seus resultados mostram que simulações bidimensionais são suficientes para capturar características essenciais do comportamento viscoso não-linear.

Sendo assim, vários aspectos importantes dessa instabilidade hidrodinâmica foram descritas corretamente com base nas abordagens bidimensionais médias da espessura do escoamento proposta pela Lei de Darcy, como interação não linear dos dedos viscosos, sua fusão e divisão de pontas.

No entanto, artigos recentes verificaram algumas discrepâncias entre previsões da Lei de Darcy e as equações tridimensionais de Navier-Stokes, como discutido por R. M. Oliveira e E. Meiburg [20].

Eles sugerem que outros fenômenos relevantes do escoamento não podem ser previstos através dessa abordagem bidimensional, e baseados em suas próprias investigações e no estudo de diversos autores, têm verificado a importância dos efeitos tridimensionais em deslocamentos de Hele-Shaw, tanto no regime linear quanto não-linear.

Os experimentos clássicos de Wooding [21] de quase meio século atrás exibem uma "divisão interna" que não poderia ser explicada com base nos conceitos bidimensionais.

Para deslocamentos gravitacionalmente instáveis e miscíveis na direção vertical em células Hele-Shaw, a análise de estabilidade linear realizada por Graf, Meiburg e Härtel [22], utilizando o modelo tridimensional das equações de Stokes calcularam taxas de crescimento que concordam com as observações experimentais de Fernandez et al. [23] em 5 ordens de grandeza, enquanto uma análise média da Lei de Darcy encontra concordância razoável apenas para Números Rayleigh moderados.

Por causa disso, optamos por resolver os problemas dessa investigação através da resolução das equações tridimensionais de Navier-Stokes.

As equações governantes da mecânica dos fluidos são baseadas em princípios clássicos de grandezas dinâmicas, ou seja, conservação de massa, momento e energia. Com base nesses princípios, Claude-Louis Navier e George Gabriel Stokes derivaram a equação governante para fluidos viscosos aplicando a segunda lei de Newton ao fluido em movimento, baseado na suposição de que as tensões manifestadas nos fluidos são devidas à difusão de efeitos viscosos e ao gradiente de pressão. Essas equações governantes são conhecidas como Equação de Navier-Stokes (NSE).

Como o escoamento em células de Hele-Shaw sempre apresenta perfis laminares, podemos aplicar o método de DNS (Direct Numeric Simulation) nas Leis de Stokes para avaliar o comportamento do fenômeno.

Nossas investigações tem como ênfase o estudo do deslocamento de fluidos newtonianos miscíveis, isto é, o estudo do comportamento da interface de pares de fluidos que apresentam variação de concentração do fluido deslocado.

Inicialmente, foram muito aplicadas correlações exponenciais para mo-

delar o gradiente de viscosidade dado a concentração do fluido deslocado em uma determinada posição do escoamento, como Paula A. Sesini, Denis A. F. de Souza e Alvaro L. G. A. Coutinho [19] em 2010, no qual foram observados comportamentos não-lineares complexos para o escoamento.

Apesar disso, mais recentemente foram identificados pares de fluidos miscíveis que apresentam perfis de viscosidade associados à correlações não-monotônicas.

Homsy e Manickam [8] investigaram a estabilidade de escoamentos miscíveis em meios porosos que apresentavam perfis de viscosidade não-monotônicos.

Posteriormente, Coutinho e Alves [9] investigaram os efeitos de uma viscosidade não-monotônica associada a dispersão anisotrópica nas instabilidades por meio de técnicas de elementos finitos. Seus resultados mostram os fenômenos de reversão da formação dos dedos viscosos quando uma lei de viscosidade não monotônica foi considerada.

Como o comportamento apresentado por esses perfis apresenta possíveis aplicações interessantes em diversos processos industriais, ele foi escolhido para as investigações realizadas nesse artigo.

1.1 Motivação

Atualmente, o petróleo corresponde a mais de 60% da energia primária consumida no mundo, além de ser matéria-prima para diversos produtos como combustíveis, lubrificantes, insumos para a petroquímica, asfalto, plásticos e derivados e até mesmo alimentos.

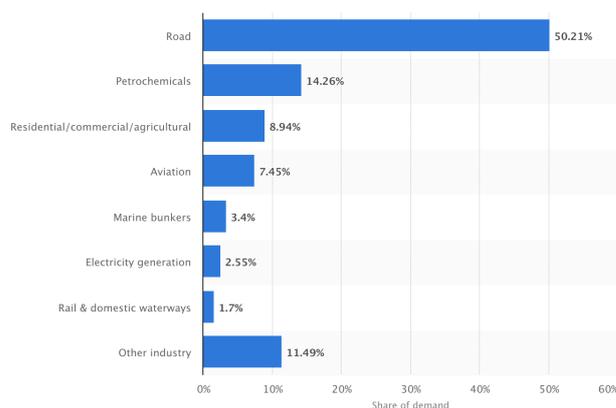


Figura 1.3: Demanda de petróleo por setor - Worldwide (2016)

Materia prima não-renovável, é um combustível fóssil de origem orgânica gerado a partir da decomposição lenta e complexa. Para que o combustível

se forme, é preciso que a matéria orgânica fique em uma temperatura de aproximadamente 65-75°C, sendo comprimida por camadas de sedimentos. A pressão imprimida sobre a matéria orgânica faz com ela lentamente se transforme em conglomerados ricos em carbono e hidrogênio, conhecidos como hidrocarbonetos e após o surgimento do crude, o petróleo segue um caminho entre rochas porosas e não porosas.

Para que ele chegue até a superfície é preciso que seja feita a perfuração da rocha que impede o caminho de escape natural do fluido. Portanto, faz-se necessário o uso de técnicas e equipamentos elaborados para a sua extração.

Empresas envolvidas na extração e refino do petróleo estão hoje entre as maiores corporações do mundo. Entre as dez maiores empresas do mundo com base em receita, seis estão na indústria do petróleo. Em 2016, empresas como a gigante anglo-holandesa Royal Dutch Shell e a americana Exxon Mobil anunciaram receitas próximas a quase 234 bilhões de dólares e 219 bilhões de dólares em 2016, respectivamente.

Devido as características do processo de formação do petróleo, a renovação das suas reservas naturais se torna um processo impossível, e por isso, a perspectiva futura de redução na oferta dessa matéria prima aumenta significativamente a necessidade de otimizar os processos atuais de extração.

Em poços surgentes, a produção de petróleo no primeiro estágio de recuperação é obtida por causa da pressão natural do reservatório. A quantidade de óleo produzida pela pressão interna do reservatório é conhecida como recuperação primária. A eficiência da recuperação de óleo nesse primeiro estágio depende da natureza do reservatório e é limitada a baixos níveis percentuais (cerca de 30%), conferindo ainda mais relevância ao desenvolvimento de técnicas secundárias de recuperação, em que as principais dificuldades costumam estar relacionados ao escoamento de fluidos com viscosidades diferentes em meios porosos.

A fim de retirar o resto de petróleo do reservatório, a injeção de um fluido de bombeamento para deslocar o óleo remanescente no reservatório é uma técnica eficiente que caracteriza o estágio secundário de recuperação de óleo. Geralmente água ou gás é usado como fluido de deslocamento. Abaixo podemos ver uma esquemática simplificada de uma operação de recuperação de petróleo.

Como a viscosidade desses fluidos de deslocamento é menor do que a do petróleo, a instabilidade viscosa ocorre na interface e a eficiência na varredura desse processo de deslocamento cai significativamente.

Por isso, com o objetivo de identificar padrões comportamentais de escoamento com aplicações industriais, serão conduzidas simulações numéricas de

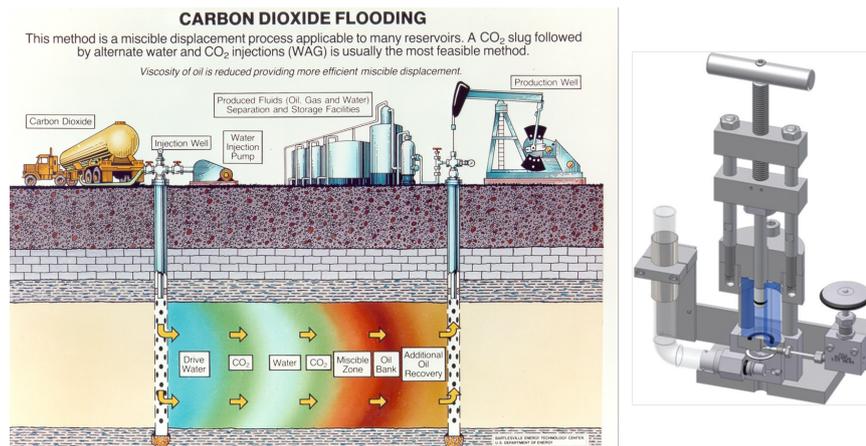


Figura 1.4: WAG oil recovery

escoamentos de pares de fluidos com comportamentos não-monotônicos a fim de identificar parâmetros estabilizadores no desenvolvimento das instabilidades de Saffman-Taylor, também conhecido como viscous fingering.

Desse modo, poderemos futuramente validar empiricamente as possíveis aplicações dos resultados em processos reais da indústria.

2

Modelagem do problema

A dinâmica consiste na interação entre os dois fluidos miscíveis de viscosidades distintas causada pelo deslocamento dos mesmos entre duas placas paralelas mantidas a uma distância fixada.

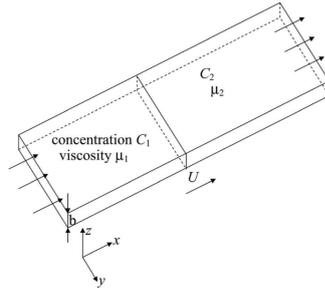


Figura 2.1: Desenho esquemático da geometria

O fenômeno a ser estudado ocorre quando o fluido de viscosidade menos viscoso, à esquerda, desloca o fluido mais viscoso para direita, desenvolvendo instabilidades na interface entre os fluidos, os “viscous fingers” ou dedos viscosos. Abaixo podemos observar o padrão da interface de três simulações caracteristicamente distintas, realizadas por R.M Oliveira e E. Meinhart.

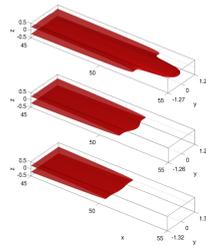


Figura 2.2: Simulação de um escoamento de fluidos miscíveis em células de Hele-Shaw

Analisaremos o aparecimento e desenvolvimento dessas instabilidades através das simulações numéricas diretas (DNS) das equações tridimensionais incompressíveis de Navier-Stokes, acopladas a equação de difusão e convecção para o perfil de concentração.

Para descrever a dinâmica de escoamentos em geral, emprega-se as equações de Navier-Stokes. No entanto, as equações governantes tiveram alguns de seus parâmetros ajustados para que fosse possível conferir uma parametrização adimensional as resoluções, introduzindo um comprimento (L^*), velocidade

(U^*), tempo (T^*), pressão (p^*) e viscosidade (μ^*) característicos, através do uso da espessura do escoamento (b), da velocidade (U) e da viscosidade do fluido menos viscoso (μ_1) na adimensionalização dos componentes, como apresentado abaixo:

$$L^* = b \quad (2-1)$$

$$U^* = U \quad (2-2)$$

$$T^* = \frac{b}{U} \quad (2-3)$$

$$P^* = \frac{\mu_1 U}{b} \quad (2-4)$$

$$\mu^* = \mu_1 \quad (2-5)$$

Além disso, para geometrias em que a proximidade entre as placas é grande, as velocidades do escoamento se tornam muito pequenas, resultando em números de Reynolds baixos. Como as placas se encontram na horizontal, a distância entre as placas é muito pequena e os fluidos apresentam densidades extremamente similares, efeitos gravitacionais podem ser considerados desprezíveis.

Historicamente, perfis exponenciais foram aplicados para caracterizar o comportamento da viscosidade na interface de interação dos fluidos, descritos pela seguinte equação.

$$\mu = \mu_1 e^{Mc} \quad (2-6)$$

Desse modo, chegamos a seguinte simplificação das equações tridimensionais de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial}{\partial x_k} \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial p}{\partial x_i} \right] \quad (2-7)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_k \frac{\partial c}{\partial x_k} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial c}{\partial x_k} \quad (2-8)$$

Existem três principais parâmetros adimensionais que governam a dinâmica da interface entre os fluidos: o número de Reynolds (Re), que define a relação entre as forças viscosas e as forças inerciais, o número de Peclet (Pe), que caracteriza a razão entre os efeitos convectivos e os efeitos difusivos, ambos definidos abaixo:

$$Re = \frac{\rho U b}{\mu_1} \quad (2-9)$$

$$Pe = \frac{U b}{D} \quad (2-10)$$

Por fim, a viscosidade relativa (M), que consiste na relação de grandeza entre as viscosidades apresentadas pelo par de fluidos aplicados na dinâmica do deslocamento, pode ser definida como

$$M = \log \left(\frac{\mu_2}{\mu_1} \right) \quad (2-11)$$

Mais recentemente, foram descobertos pares de fluidos específicos em que a interface desenvolvida ao longo do deslocamento apresenta um comportamento completamente diferente, aos quais nos referimos de perfis de viscosidade não-monotônicos. Um par que exemplifica esse comportamento é o etanol e a água, como demonstra a figura abaixo do estudo de Schafroth e Goyal de 2006 [2].

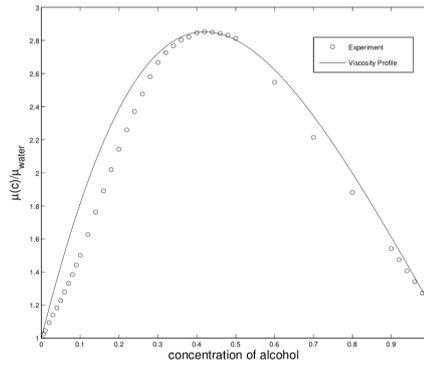


Figura 2.3: Comparação dos resultados empíricos e numéricos referenciados por Schafroth para o perfil de viscosidade do par água-etanol [18]

Para esses pares de fluidos, podemos caracterizar o perfil de viscosidade dado a sua concentração $\mu(c)$ através da introdução de uma modelagem senoidal, como apresentadas abaixo.

$$\mu(c) = \mu_1 \mu_m \sin(\zeta) \quad (2-12)$$

$$\zeta = \zeta_0(1 - \eta) + \zeta_1 \eta \quad (2-13)$$

$$\eta = \frac{(1 + a)c}{1 + ac} \quad (2-14)$$

$$\zeta_0 = \sin^{-1} \left(\frac{\alpha}{\mu_m} \right) \quad (2-15)$$

$$\alpha = \mu_2 / \mu_1 \quad (2-16)$$

$$\zeta_1 = \pi - \sin^{-1} \left(\frac{1}{\mu_m} \right) \quad (2-17)$$

$$a = \frac{(1 - c_m) - \eta}{(1 - c_m)(\eta_m - 1)} \quad (2-18)$$

$$\eta_m = \frac{\pi/2 - \zeta_0}{\zeta_1 - \zeta_0} \quad (2-19)$$

O perfil consiste em uma função de seno modificada através de algumas transformações para que as condições de extremo $\mu(0)=1$, $\mu(1)=\alpha$ sejam satisfeitas e a viscosidade máxima seja encontrada no ponto médio de concentração.

Introduzimos também o parâmetro Lambda (Λ), que caracteriza a relação entre os valores da viscosidade em concentração nula ($c=0$) e concentração absoluta ($c=1$), descrita abaixo.

$$\Lambda = \frac{\frac{\partial \mu(c=0)}{\partial c} + \frac{\partial \mu(c=1)}{\partial c}}{\alpha + 1} \quad (2-20)$$

Para perfis de comportamento monotônico, esse parâmetro sempre se encontra positivo, enquanto que em casos não-monotônicos seu valor dependerá da magnitude do gradiente, de modo que se o gradiente do ponto $c=1$ for maior que o gradiente observado no ponto de $c=0$, então o valor do parâmetro será negativo. Caso contrário, o parâmetro será positivo.

Abaixo podemos observar a diferença entre as duas classificações de perfis monotônicos e não-monotônicos, modelados numericamente pelas premissas de perfil exponencial e senoidal, respectivamente.

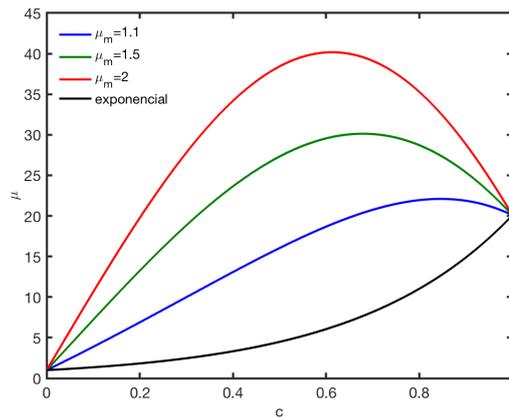


Figura 2.4: Comparação dos perfis de viscosidade

As simulações a seguir tem como foco principal regimes de números de Reynold baixo e portanto, será utilizado o valor de $Re=1$ a fim de analisar as influências dos parâmetros M e Pe no desenvolvimento das instabilidades conhecidas como viscous fingering.

3 Metodologia numérica

3.1 Discretização

Para que fosse possível a resolução do sistema de equações diferenciais citado anteriormente, o Método de Diferenças Finitas foi utilizado, através do desenvolvimento de uma discretização híbrida de três passos entre o método de Runge-Kutta explícito, utilizado para os termos convectivos, e o método implícito de Crank-Nicolson, para a resolução dos termos viscosos. Esses métodos foram escolhidos dado aos bons resultados obtidos por Rai e Moin (1991).

Tal discretização obtém soluções de segunda ordem de precisão para os termos viscosos e de terceira ordem para os termos convectivos, o que em suma garante uma precisão geral de segunda ordem.

O esquema RK de três etapas para avançar as equações de momento do passo de tempo n para o passo $n + 1$ é

Passo 1

$$u_i^a = u_i^n + \Delta t \left[-\frac{2\alpha_1}{Re} \frac{\partial p^n}{\partial x_i} + \gamma_1 H_i^n + \frac{\alpha_1}{Re} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \mu (1 + \delta_{ik}) \frac{\partial}{\partial x_k} \right) (u_i^n + u_i^a) \right] \quad (3-1)$$

$$\frac{u_i - u_i^a}{\Delta t} = -\frac{2\alpha_1}{Re} G(\tilde{\phi}) \quad (3-2)$$

$$D(\tilde{u}_i) = 0, \quad (3-3)$$

Passo 2

$$u_i^b = \tilde{u}_i + \Delta t \left[-\frac{2\alpha_2}{Re} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \gamma_2 \tilde{H}_i + \rho_2 H_i^n + \frac{\alpha_2}{Re} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \mu (1 + \delta_{ik}) \frac{\partial}{\partial x_k} \right) (\tilde{u}_i + u_i^b) \right] \quad (3-4)$$

$$\frac{\tilde{u}_i - u_i^b}{\Delta t} = -\frac{2\alpha_2}{Re} G(\tilde{\phi}) \quad (3-5)$$

$$D(\tilde{u}_i) = 0, \quad (3-6)$$

Passo 3

$$u_i^c = \tilde{u}_i + \Delta t \left[-\frac{2\alpha_3}{Re} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial x_i} + \gamma_3 \tilde{H}_i + \rho_3 \tilde{H}_i + \frac{\alpha_3}{Re} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \mu (1 + \delta_{ik}) \frac{\partial}{\partial x_k} \right) (\tilde{u}_i + u_i^c) \right] \quad (3-7)$$

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^c}{\Delta t} = -\frac{2\alpha_3}{Re} G(\phi^{n+1}) \quad (3-8)$$

$$D(u_i^{n+1}) = 0, \quad (3-9)$$

onde

$$\begin{aligned} \alpha_1 = 4/15, \gamma_1 = 8/15, & \quad \rho_1 = 0, \\ \alpha_2 = 1/15, \gamma_2 = 5/12, & \quad \rho_2 = -17/60, \\ \alpha_3 = 1/6, \gamma_3 = 3/4, & \quad \rho_3 = -5/12, \end{aligned}$$

para $j = 1, 2, 3$. $\frac{\delta}{\delta x_i}$ representa a discretização do operador de diferenças finitas, enquanto G e D representam o gradiente de segunda ordem discretizado e os operadores de divergente, respectivamente. A notação $\tilde{\cdot}$, simples e dupla, indica as variáveis intermediárias dos passos do Runge-Kutta e os índices a, b e c representam os passos intermediários do método de passo fracionário.

A função escalar ϕ está relacionada diretamente com a pressão através da seguinte relação

$$p = \phi - \frac{\Delta t \alpha}{Re} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\mu \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \right), \quad (3-10)$$

enquanto H contém os termos explícitos, que incluem tanto os termos convectivos quanto os termos difusivos provenientes dos componentes não-diagonais do tensor de viscosidade. Para a componente x das equações de momento, H tem a seguinte formulação

$$H(u) = - \left[u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \right] + \frac{1}{Re} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] \quad (3-11)$$

Em seguida, foi utilizado o método de aproximação por fatoração nos termos difusivos implícitos das equações de cada um dos três passos do Runge-Kutta. A aplicação desse método permite resolver três sistemas tridiagonais ao invés de depender da inversão de uma matriz esparsa grande, além de manter a precisão de segunda ordem geral do método e reduzir o custo computacional de memória.

A discretização mencionada utiliza diferenças centrais de segunda ordem em uma malha intercalada uniforme para o cálculo dos termos viscosos, dos divergentes de velocidade, os gradientes de pressão e a função ϕ . Para as derivadas dos termos convectivos, foi utilizado o método de quinta ordem Hamilton-Jacobi de peso ponderado essencialmente não oscilatório de Jiang e Peng (2000) [15], como descrito por Osher e Fedkiw.

Foi aplicado o método de passo fracionário na discretização para tirar vantagem do método de projeção, ou seja, do uso de valores antigos do gradiente de pressão nas equações de Momento para resolver o termo corretor em cada passo do método de Runge-Kutta.

Outro ponto positivo do método empregado consiste na resolução indireta da condição de divergente livre, de modo que ela é associada ao passo de correção a fim de obter uma equação de Poisson para ϕ , um escalar relacionado a pressão.

A equação de Poisson foi resolvida através do método de transformadas, como sugerido por Kim e Moin (1985), utilizando a transformada do cosseno de ϕ nas direções perpendiculares ao escoamento, seguida da aplicação das propriedades de ortogonalidade dos cossenos, possibilitando a discretização da equação diferencial de segunda ordem da variável transformada através do uso de diferenças centrais, computadas numericamente através do método de eliminação gaussiana. Em seguida, a solução de ϕ é obtida calculando a inversa da transformada.

Por fim, a última operação no passo fracionário se resume ao uso do resultado de ϕ para corrigir os valores do perfil de velocidade. Em seguida, a cada iteração do método de Runge-Kutta, o gradiente de pressão é atualizado através dos valores do gradiente de pressão do passo anterior e os valores de ϕ .

Para a componente x no primeiro passo

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial x} = \frac{\partial p^n}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} - \frac{\Delta t \alpha_1}{Re} \left[2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} \quad (3-12)$$

3.2

Condições de Contorno

Para as condições de contorno, utiliza-se premissas de no-slip condition, ou condição de não escorregamento para fluidos viscosos, em que o fluido terá velocidade zero em relação ao limite do domínio do escoamento e derivada normal nula da concentração.

A condição inicial especifica um perfil de velocidade u parabólico na borda esquerda do domínio, enquanto o perfil de concentração inicial é descrito

por uma função de erro centrada em torno da localização frontal inicial x_0 .

$$c_0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_0}{\delta} \right) \quad (3-13)$$

Como demonstrado por Goyal e Meiburg [10], o desenvolvimento do estado de crescimento referencialmente uniforme da interface viscosa do escoamento bidimensional independe da espessura inicial, e por isso, utilizamos $\delta = 0.1$. Utiliza-se como condição de contorno laterais a condição de fluxo de saída convectivo dado pela seguinte equação

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + U_{max} \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \quad (3-14)$$

3.3 Malha e a relevância da resolução

Para a realização das simulações foram utilizadas malhas intercaladas, em que as células possuíam uma razão equidistante entre seus dimensionamentos espaciais, garantindo uma simetria na resolução tanto ao decorrer do escoamento, como também em seus eixos perpendiculares.

Para o comprimento da malha no eixo do escoamento, foi escolhido um comprimento de $L_x^* = 10$ que possibilitava a visualização completa do desenvolvimento das interface viscosa no escoamento, e para a largura do escoamento no eixo y , foram utilizados um comprimento de aproximadamente $L_y^* = 1$.

No entanto, devido ao perfil observado para esse tipo de comportamento, no qual existe um desenvolvimento simétrico do fenômeno ao redor do gap central, as simulações foram realizadas para somente metade do domínio em relação ao eixo y .

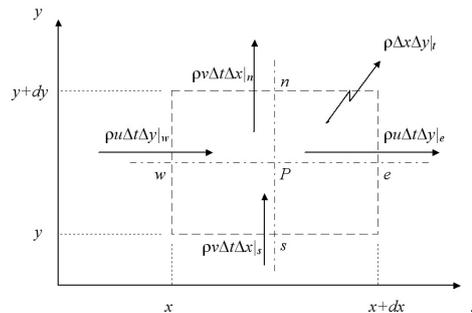


Figura 3.1: Esquema explicativo de discretização de malhas intercaladas

Foram realizadas diversas simulações para enfim atingir soluções convergentes. Foram realizadas simulações para três grupos de parâmetros de escoamento com resoluções variando com multiplicadores de 1, 2, 3 e 4 a resolução (δ) inicial de 40 células por unidade de comprimento, isto é, para cada unidade adimensional existem 40 pontos espaciais discretizados.

Um dos parâmetros de verificação mais relevante para o escoamento de fluidos miscíveis é a distância entre as linhas do gradiente de viscosidade do eixo central da interface viscosa. Isto é, são avaliadas as posições em que verifica-se dois valores específicos de concentração, $c = 0.1$ e $c = 0.9$, ambos no eixo em que $z=y=0$, e a partir dessas posições são estabelecidos valores para a espessura da interface viscosa difusa, ou d_0 .

A partir dos valores desse parâmetro, foi possível verificar a convergência das simulações pois o refino gradual da malha apresentou variações progressivamente menores, atingindo discrepâncias desprezíveis nas duas últimas iterações, enfim validando as simulações.

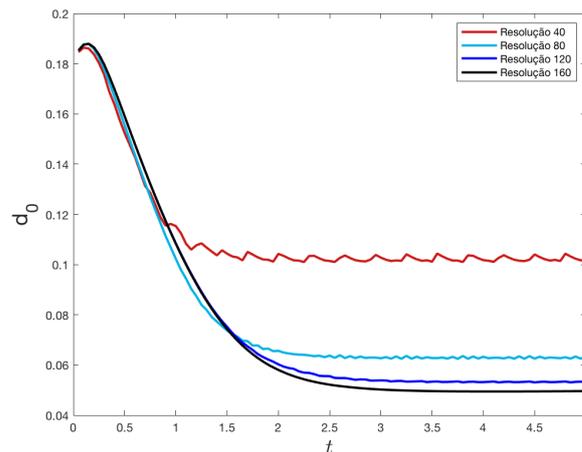


Figura 3.2: Comparação entre as resoluções da malha para $Pe = 2000$

Como apresentado no gráfico acima, podemos observar que o erro relativo decai exponencialmente com o refino da malha, o que mostrou-se consistente, indiferentemente dos grupos de parâmetros utilizados.

Além disso, confirmou-se a expectativa de que escoamentos com parâmetros mais agudos, como razões de viscosidade altas e números de Péclet altos conferem a dinâmica gradientes mais exacerbados, que acabam exigindo uma resolução maior da malha para a convergência dos resultados.

A partir dos resultados obtidos para a espessura da interface difusa do fluido injetado, conseguimos observar o comportamento de queda do erro em relação a simulação mais refinada.

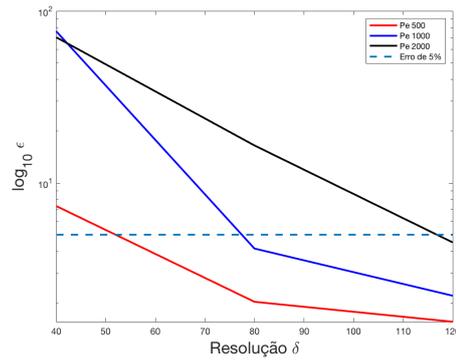


Figura 3.3: Decaimento do erro médio com o refinamento da malha

Por fim, observando a progressão do erro local ao longo do escoamento, podemos observar que os principais picos de magnitude dos erros ocorre justamente nas áreas de maior interesse e sensibilidade. Isso faz com que a escolha da resolução escolhida tenha ainda mais relevância, especialmente se consideramos o custo computacional envolvido.

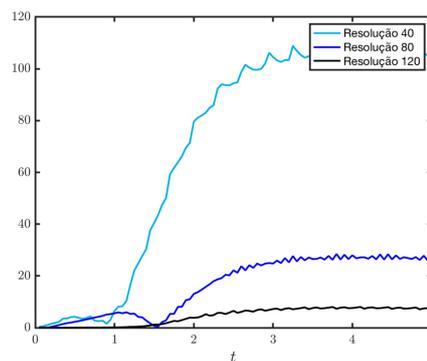


Figura 3.4: Erro percentual local para $Pe = 2000$

3.4 Validação

A partir das condições de contorno especificadas, o escoamento se manteve efetivamente bidimensional no plano xz . Por causa disso, podemos comparar nossos resultados com os obtidos por Goyal e Meiburg em 2006 [10] para a evolução da interface difusa.

Apesar da utilização da forma simplificada das equações de Stokes por parte do estudo deles, a número de Reynolds que caracteriza nosso escoamento simulado ($Re = 1$) deve apresentar soluções numéricas bem próximas às observadas.

Para o estudo de validação do código, e conseqüentemente, da discretização aplicada, são monitorados dois parâmetros da interface do escoamento

frequentemente discutidos em teses associadas as instabilidades de Saffman-Taylor, a espessura média da interface difusa (d_0), que consiste na distância entre o campo de concentração $c(\mu)=1$ e $c(\mu) = 0.9$ em que $z=y=0$, e a velocidade do ponto mais avançado da interface.

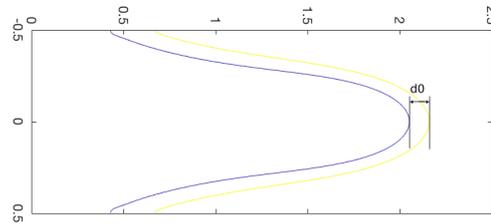


Figura 3.5: Definição do parâmetro d_0 como a distância entre os campos de concentração $c=0.1$ e $c=0.9$ no ponto de $z=y=0$

Comparando os resultados das simulações realizadas com os valores obtidos em trabalhos anteriores, como Schafroth (2006) [2], conferimos similaridades consistentes, de modo que nenhuma das escolhas de M ou Pe fez com que os resultados atuais para a espessura da interface divergissem por mais de 15%, que apesar de alto reflete as incertezas no método de extração dos dados da referência e a magnitude dos pontos mais sensíveis a incertezas de medida. Já os resultados da v_{tip} não chegaram a desvios maiores que 4%, apresentando evidências ainda mais assertivas da validade do código.

Nota-se ainda que os resultados mostraram similaridades marcantes apesar dos diferentes números de Reynolds característicos a cada simulação ($Re=1$ e $Re=0$). Isso infere que o número de Reynolds escolhido para nossas simulações é baixo o suficiente para que exista uma dominância viscosa no comportamento da dinâmica do escoamento.

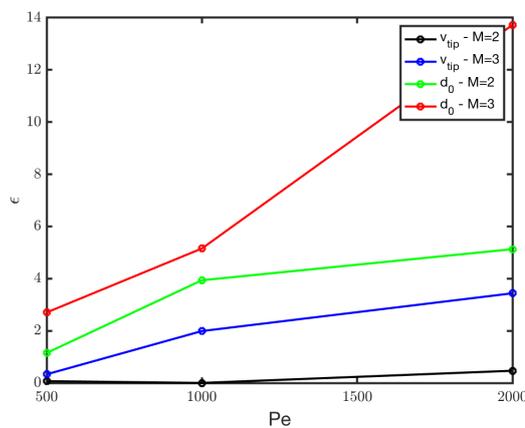


Figura 3.6: Erro percentual associado aos parâmetros d_0 e v_{tip} para variações de Pe e M

4 Resultados

4.1 Simulações DNS e o desenvolvimento do estado de escoamento uniforme da espessura da interface

No início do escoamento, podemos observar o efeito do gradiente de velocidade imediatamente na deformação da distribuição de concentração no interior da célula, enquanto a concentração na parede muda apenas devido à difusão. Por sua vez, esta mudança na distribuição de concentração modifica a interface do campo de viscosidade, levando assim à formação bem definida de uma instabilidade de Saffman-Taylor no escoamento.

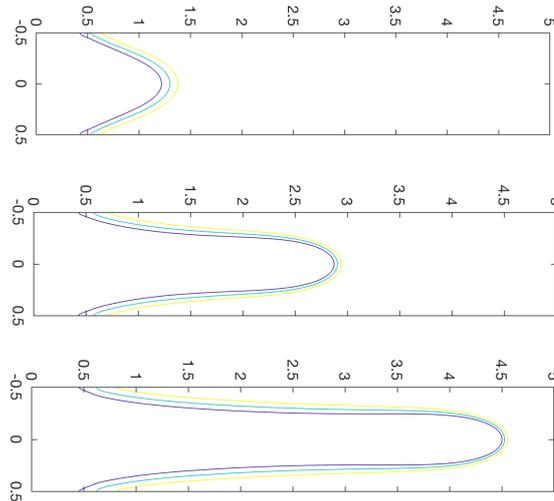


Figura 4.1: Corte 2-D da evolução temporal dos campos de viscosidade adimensional para uma simulação de $Pe = 2000$, $M=3$, $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$. Tempos de 0.5, 1.5 e 2.5 s respectivamente

Além disso, podemos observar como o gradiente de concentração se intensifica nas proximidades da ponta do deslocamento do fluido, e se suaviza a medida que nos aproximamos das paredes do domínio. Com o passar do tempo, a distância entre os campos de concentração se estabilizam, caracterizando um estado quase estacionário.

Isso acontece para números de Peclet (Pe) e contrastes de viscosidade (M) suficientemente altos, e assim, a ponta do dedo e o campo de concentração associado atingirão um estado quase estacionário em relação ao referencial, ou seja, movendo-se com a ponta do dedo. Nos casos em que Pe ou M não apresentam valores mais baixos, os efeitos difusivos fortes impedem a evolução

de um estado quase estacionários. Tais efeitos podem ser observados tanto através da evolução temporal da espessura da interface quanto da velocidade da ponta da mesma.

Nas figuras a seguir, podemos observar os diferentes tipos de comportamento descritos acima, associados às variações dos principais parâmetros que governam a dinâmica tanto na espessura da interface quanto na velocidade da sua ponta.

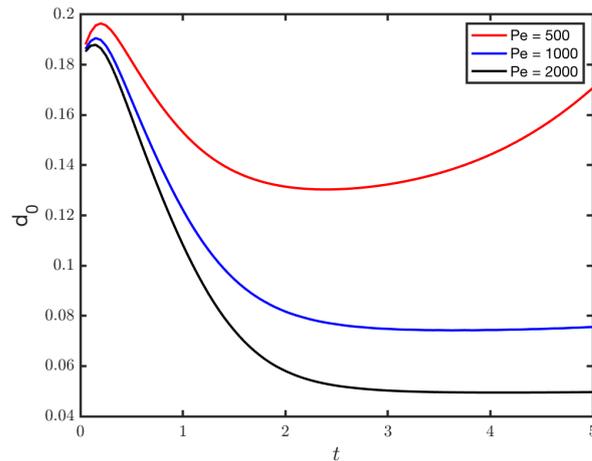


Figura 4.2: Comparação do perfil de espessura da interface associados ao número de Péclet para $M=3$, $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$

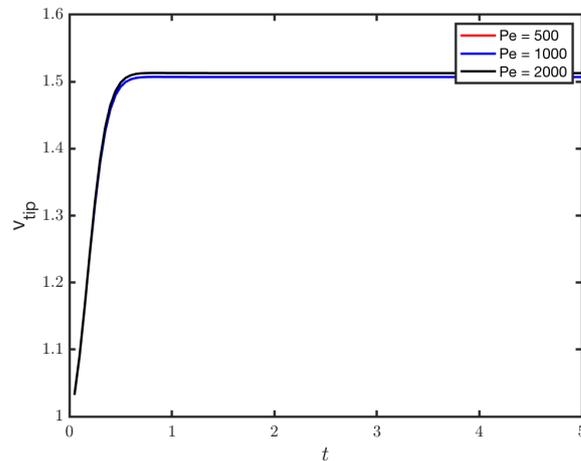


Figura 4.3: Comparação do perfil temporal da velocidade da ponta da interface associados ao número de Péclet para $M=3$, $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$

Considerando especificamente a simulação realizada considerando $Pe=2000$ e $M=3$, podemos visualizar tanto na evolução da espessura da interface viscosa como na velocidade da ponta da instabilidade que a dinâmica caminha para um movimento referencialmente constante.

4.2

Influência do número de Pe e da viscosidade relativa

Através dos resultados para a espessura da interface difusa (d_0) de cada número de Péclet, nota-se que enquanto os perfis associados a números de Peclet mais altos (1000 e 2000) apresentam uma estabilização referencialmente estacionária da espessura da interface no desenvolvimento do escoamento, o escoamento com $Pe = 500$ demonstra apenas um fenômeno momentaneamente similar, mas que em seguida volta a demonstrar um crescimento da espessura da interface.

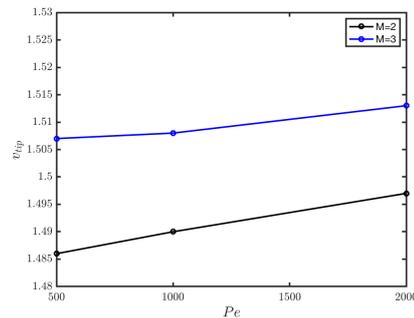


Figura 4.4: Velocidade da ponta da interface viscosa como função do número de Pe para diferentes viscosidades relativas.

Uma análise da velocidade da ponta da interface, em função de Pe para diferentes valores de viscosidade relativa, reafirma essa tendência de escoamentos caracterizados por Pe e M baixos não atingirem de fato uma estabilização contínua da espessura da interface, apenas momentânea.

Além disso, como era de se esperar, escoamentos com Pe mais elevados apresentam v_{tip} maiores, devido ao aumento da razão das forças convectivas em relação as forças difusivas, desse modo, um aumento no gradiente viscoso entre os dois fluidos conduz um acréscimo na velocidade da ponta da interface.

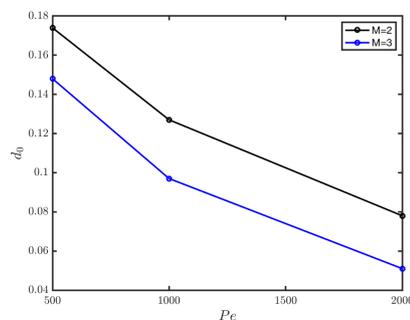


Figura 4.5: Velocidade da ponta da interface viscosa como função do número de Pe para diferentes viscosidades relativas, em que $\mu_m = 1.1$ e $\Lambda = 0$

No entanto, a evolução da espessura da interface apresenta comportamento oposto, de modo que o aumento da dominância das forças convectivas na dinâmica do escoamento fazem com que a espessura da interface se torne menor.

Essas características reforçam as conclusões de Chen e Meiburg [11] , que através de um balanço unidimensional direto dos efeitos de deformação e difusão no campo de concentração quase estacionários próximo a ponta do escoamento, descrito na eq. (35) a espessura frontal d_0 deveria ser inversamente proporcional à raiz quadrada de Pe.

$$v \frac{\partial c}{\partial y} = D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (4-1)$$

5

Próximos passos e considerações finais

Através do estudo realizado, foi possível compreender a estrutura básica da dinâmica que rege o fenômeno de instabilidade de Saffman-Taylor, identificar as condições base ideais para que simulações tridimensionais posteriores possam ser conduzidas a fim investigar o comportamento das instabilidades viscosas em deslocamentos miscíveis e os principais ganhos na aplicação de pares de fluidos que apresentam comportamentos não monotônicos para a estabilização na espessura da interface viscosa.

Esse controle apresenta aplicações de extrema relevância em diversos processos industriais, acrescentando informações que poderão posteriormente pautar o desenvolvimento de novas técnicas e processos que aumentem a eficiência de processos industriais.

Além disso, o estudo permitiu a inferência de uma faixa ótima de resoluções para a malha em cada um dos grupos de parâmetros, possibilitando a otimização de estudos futuros através da redução do custo computacional.

Assim, os conceitos validados através dessa investigação, assim como a validação dos métodos de resolução e discretização numéricos aplicados nesse projeto de graduação, poderão ser utilizadas para o desenvolvimento de investigações futuras mais complexas.

Os próximos passos consistiriam em conduzir uma última etapa de validação reproduzindo resultados de análises de estabilidade linear, compreender e interpretar os efeitos resultantes da inserção de perturbações na evolução dos dedos viscosos simultaneamente a análise de estabilidade linear. Tais efeitos podem ser observados nos figuras a seguir.

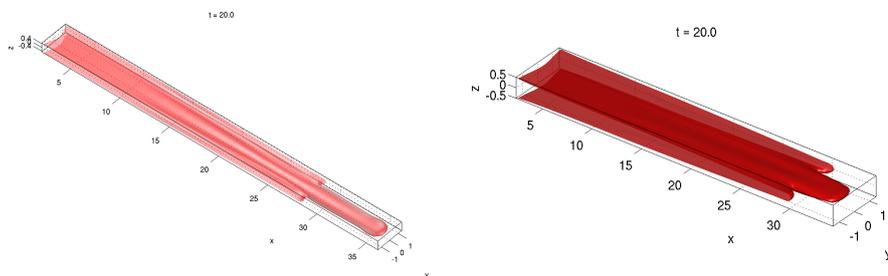


Figura 5.1: Simulações realizadas para o escoamento caracterizado por $Pe=2000$, $M=3$, $\mu_m = 1.5$ e $\lambda = 0$, mas com caráter tridimensional e sob efeito distintos de perturbações

Por fim, as principais motivações seriam a reprodução das mais diversas simulações com a finalidade de realizar estudos paramétricos assertivos em cima de cenários de escoamentos não-lineares, identificando a influência dos parâmetros de controle no comportamento tridimensional da interface. Assim, num futuro próximo, as conclusões tomadas poderiam ser postas em prática em processos inovadores ao redor da indústria.

Referências Bibliográficas

- [1] R. M. Oliveira, E. Meiburg, *"Miscible displacements in Hele-Shaw cells three-dimensional Navier-Stokes simulations"*, 2011.
- [2] Dario Schafroth, N. Goyal, E. Meiburg, L. Kleiser, *"Influence of non monotonic viscosity profiles on the stability of miscible displacement flows in a Hele-Shaw cell"*, 2006
- [3] H.Shokri, M.H.Kayhani, M.Norouzi *"Saffman–Taylor instability of viscoelastic fluids in anisotropic porous media"*, 2017
- [4] M.A. Nilsson, R. Kulkarni, L. Gerberich, R. Hammond, R. Singh, E. Baumhoff, et al., *"Effect of fluid rheology on enhanced oil recovery in a microfluidic sandstone device"*, 2013
- [5] S.Hill *"Channeling in packed columns"*, 1952
- [6] Tan C., G. Homsy *"Simulation of nonlinear viscous fingering in miscible displacement"*, 1958-1988
- [7] W. Zimmerman, G. Homsy *"Nonlinear viscous fingering in miscible displacement with anisotropic dispersion"*, 1991
- [8] O. Manickam, G. Homsy *"Stability of miscible displacement in porous media with nonmonotonic viscosity profiles"*, 1993
- [9] A.L. Coutinho, J.L Alves *"Finite element simulation of nonlinear viscous fingering in miscible displacements with anisotropic dispersion and nonmonotonic viscosity profiles"*, 1999
- [10] Goyal N., Meiburg E. *"Miscible displacement in Hele-Shaw cells: Two-dimensional base states and their linear stability"*, 2006
- [11] Chen C., Meiburg E. *"Miscible displacements in capillary tubes. Part 2. Numerical simulations"*, J. Fluid Mech., 326, pp. 57-90, 1996
- [12] G. Holmsy *"Viscous fingering in porous media"*, 1987
- [13] Kim, Choi *"The stability of miscible displacement in porous media, nonmonotonic viscosity profiles"*, 2011
- [14] Manickam, Homsy *"Simulation of viscous fingering in miscible displacements with nonmonotonic viscosity profiles"*, 1994

- [15] Jiang, Peng, *"Weighted ENO Schemes for Hamilton–Jacobi Equations"*, 2000
- [16] Osher S., Fedkiw R., *"Level Set Methods: An Overview and Some Recent Results"*, 2000
- [17] J. Kim, P. Moin, *"Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations"*, 1985
- [18] Weast R. C., *"Handbook of Chemistry and Physics"*, CRC, Cleveland, 1990
- [19] Paula A. Sesini, Denis A. F. de Souza, Alvaro L. G. A. Coutinho *"Finite element simulation of viscous fingering in miscible displacements at high mobility-ratios"*, 2010
- [20] R. M. Oliveira, E. Meiburg *"Saffman-Taylor Instability and the Inner Splitting Mechanism"*, Physical Review Letters, 2017
- [21] R. A. Wooding *"Growth of fingers at an unstable diffusing interface in a porous medium or Hele-Shaw cell"*, J. Fluid Mech. 39, 477, 1969
- [22] F. Graf, E. Meiburg, and C. Härtel *"Unstable density stratification of miscible fluids in a vertical Hele-Shaw cell: influence of variable viscosity on the linear stability"*, J. Fluid Mech. 451, 261, 2002
- [23] J. Fernandez, P. Kurowski, P. Petitjeans, and E. Meiburg, J. *"Unstable density stratification of miscible fluids in a vertical Hele-Shaw cell: influence of variable viscosity on the linear stability"*, Fluid Mech. 451, 239, 2004