

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

**SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE DESLOCAMENTO
IMISCÍVEL UTILIZANDO MODELOS DE GÁS EM REDE COM
MEDIADORES DE CAMPO**

Dissertação submetida à

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

para a obtenção do grau de

MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA

FABIANO GILBERTO WOLF

Florianópolis, março de 2002

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO DE PROCESSOS DE DESLOCAMENTO
IMISCÍVEL UTILIZANDO MODELOS DE GÁS EM REDE COM
MEDIADORES DE CAMPO

FABIANO GILBERTO WOLF

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de
MESTRE EM ENGENHARIA

ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA
sendo aprovada em sua forma final.

Paulo César Philippi, Dr. Ing. - Orientador

Júlio César Passos, Dr. - Coordenador do Curso

BANCA EXAMINADORA

Amir Antônio M. de Oliveira Júnior, Ph.D - Presidente

Pavel Grigorievich Bedrikovetsky, Dr.

João Borges Laurindo, D. Sc.

Luís Orlando Emerich dos Santos, Dr. Eng.

Aos meus pais

AGRADECIMENTOS

A orientação do prof. Paulo César Phillipi.

Aos membros da banca pela leitura e avaliação do presente trabalho.

Aos colegas do laboratório LMPT pelos momentos de descontração e alegria, especialmente ao Luís Orlando Emerich dos Santos, Paulo César Facin e André Bueno pelas valiosas discussões e sugestões.

Ao prof. Paulo César Facin por apresentar-me ao LMPT.

Ao prof. Celso Fernandes pelo apoio e atenção.

Ao apoio financeiro da Agência Nacional do Petróleo - ANP e da Financiadora de Estudos e Projetos - FINEP, através do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás Natural - PRH09-ANP/MME/MCT.

E claro, a Deus.

SÚMARIO

LISTA DE FIGURAS	viii
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvi
1. INTRODUÇÃO	1
2. PROCESSOS DE DESLOCAMENTO IMISCÍVEL	5
2.1. Escoamento Bifásico e Processos de Deslocamento Imiscível	5
2.2. Molhabilidade	6
2.3. Pressão Capilar	7
2.3.1. Ascensão Capilar	10
2.3.2. Resistência Capilar Encontrada na Junção Construção-Poro	13
2.4. Processos de Deslocamento Imiscível.....	16
2.4.1. Embebição Espontânea	17
2.4.2. Embebição Quasi-Estática	18
2.4.3. Invasão com Vazão de Fluido Deslocante Constante	18
2.5. Equações para Escoamentos Imiscíveis	19
2.5.1. Equações do Contínuo	19
2.5.2. Equações Macroscópicas para Escoamento Bifásico	20

3. MODELOS DE GÁS EM REDE	22
3.1. Dinâmica Microscópica	23
3.1.1. Modelo HPP	23
3.1.2. Modelo FHP	25
3.1.3. Modelo FCHC	26
3.2. Equações Microscópicas	28
3.3. Equações Macroscópicas	31
3.3.1. Distribuições de Equilíbrio	32
3.3.2. Equilíbrio para Baixas Velocidades	34
3.3.3. Equação da Continuidade	36
3.3.4. Equação de Euler	38
3.3.5. Equação de Navier-Stokes	40
3.4. Condições de Contorno	41
3.5. Obtenção dos Campos Macroscópicos	43
4. MODELOS DE GÁS EM REDE PARA ESCOAMENTOS IMISCÍVEIS	44
4.1. Modelo de Rothman & Keller (1988)	44
4.2. Modelo de Chen et al. (1991)	48
4.3. Modelo Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) de Santos (2000)	52
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	60
5.1. Verificação da Lei de Young-Laplace	61
5.2. Dinâmica de Molhamento	63
5.3. Curva de Viscosidade para Densidade Constante	68
5.4. Ascensão Capilar Influenciada pela Gravidade	71
5.5. Invasão em Constrições	75

5.6. Resistência Capilar Encontrada na Junção Construção-Poro	77
5.7. Invasão em Configurações Geométricas Representativas	81
5.8. Efeito da Molhabilidade em Processos de Deslocamento Imiscível	88
5.9. Curvas de Pressão Capilar	94
6. CONCLUSÃO	103
7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	104
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	105
APÊNDICE A – Expansão de Chapman-Enskog	111

LISTA DE FIGURAS

- Figura 2.2.1 – Formação do ângulo de contato entre uma superfície sólida e um líquido 7
(Anderson, 1986).
- Figura 2.3.1 – Ângulo de contato θ formado em um tubo cilíndrico de raio R. 8
- Figura 2.3.2 – Curva de pressão capilar típica. Note a diferença entre as curvas de 9
drenagem e embebição caracterizando os efeitos de histerese (Bear, 1972).
- Figura 2.3.3 – Ângulo de contato θ estático em um capilar; ângulo θ_1 formado quando 10
uma fase molhante desloca uma fase não-molhante; e ângulo θ_2 formado quando uma
fase não-molhante desloca uma fase molhante (Bear, 1972).
- Figura 2.3.4 – Representação esquemática da expansão da interface entre dois fluidos na 15
passagem de uma constrição estreita para um poro esférico. (Tsakiroglou & Payatakes,
1988).
- Figura 3.1.1 – Representação de uma rede quadrada na etapa de colisão. Para um dado 24
estado de entrada existem dois prováveis estados de saída que são determinados pelas
regras de colisão do modelo.
- Figura 3.1.2 – Etapa de colisão de três partículas em uma rede hexagonal. Na figura são 25
mostrados os estados do sítio anterior e posterior à colisão.
- Figura 3.1.3 – Etapa de propagação de três partículas em uma rede hexagonal. Na figura 26
são mostrados os estados do sítio anterior e posterior à propagação.

- Figura 3.1.4 – Representação de uma célula unitária FCHC projetada no espaço 3D. Na 28
figura são mostrados 18 vetores, sendo que 6 desses vetores (em verde) possuem
componentes quadridimensionais, ou seja, representam 2 vetores na mesma direção.
- Figura 3.4.1 – Representação esquemática das condições de contorno periódicas em uma 42
rede FHP. Em (a) e (b) são mostradas as situações anterior e posterior a propagação,
respectivamente. (Santos, 2000).
- Figura 3.4.2 – Condição de contorno “bounce-back” em uma rede FHP. (a) e (b) 42
representam os estados anterior e posterior a imposição da condição de contorno, dada na
etapa de propagação.
- Figura 4.1 – Separação de fases simulada com o modelo proposto por Rothman & Keller. 47
Em (a), (b), (c), (d), (e) e (f) são mostradas etapas da simulação do modelo,
correspondendo a 500, 1000, 2000, 4000, 10000 e 50000 passos de tempo,
respectivamente (Rothman & Keller, 1988).
- Figura 4.2 – Verificação da lei de Young-Laplace para o modelo de Rothman & Keller 48
(Rothman & Keller, 1988).
- Figura 4.2.1 – Separação de fases simulada com o modelo proposto por Chen et al. Em 51
(a), (b) e (c) são mostradas etapas da simulação do modelo, correspondendo a 200, 3300
e 45000 passos de tempo, respectivamente (Chen et al., 1991).
- Figura 4.2.2 – Verificação da lei de Young-Laplace para o modelo de Chen et al. (Chen 52
et al., 1991).
- Figura 4.3.1 – Processo de colisão entre partículas distintas no modelo MLGA. Em (a) é 54
mostrado o estado do sítio anterior à colisão e em (b) o estado do sítio posterior a colisão.
Note que é conservado o número de partículas de cada cor e a quantidade de movimento
total.

- Figura 4.3.2 – Processo de interferência entre os mediadores e as partículas no modelo MLGA. Os mediadores são representados como setas pontilhadas. Em (a), é mostrado o estado do sítio anterior à interferência dos mediadores e em (b), o estado do sítio posterior à interferência dos mediadores. Note que, o sentido da velocidade da partícula na direção i só é invertido, se não existir nenhuma partícula da mesma cor na direção $-i$. 55
- Figura 4.3.3 – Verificação da lei de Young-Laplace para o modelo MLGA (Santos, 2000). 57
- Figura 4.3.4 – Separação de fases obtida utilizando o modelo MLGA. Em (a), (b), (c), (d), (e) e (f) são mostradas etapas da simulação, correspondendo a 800, 1200, 2000, 8000, 20000 e 40000 passos de tempo, respectivamente (Santos, 2000). 58
- Figura 5.1.1 – Curva $\Delta P \times 1/R$ obtida através do modelo MLGA. Os círculos representam os pontos obtidos nas simulações com média temporal de 30000 passos. A linha contínua é a curva de ajuste. A tensão interfacial σ estimada é de ~ 3.5 (unidades de rede), visto que o ângulo de contato medido é $\sim 30^\circ$. 62
- Figura 5.2.1 - Simulação de diferentes configurações de molhabilidade utilizando o modelo MLGA em uma rede 50x300. Em (a), a fase azul é molhante, em (b), a parede não tem preferência por nenhuma das fases e em (c), a fase azul é não-molhante. Cada campo de densidades foi obtido com média temporal de 500 passos. O molhamento se dá apenas pela condição de emissão dos mediadores pelas paredes do capilar. 64
- Figura 5.2.2 – Condição inicial para a uma gota líquida molhante sobre uma superfície sólida plana. 65
- Figura 5.2.3 – Evolução dinâmica do molhamento simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 950x200. As imagens (a), (b), (c) e (d) correspondem a 500, 6000, 28000 e 93000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 500 passos. O tempo total de simulação foi ~ 60 horas. 66
- Figura 5.2.4 – Resultados obtidos para o deslocamento $X(T)$ da camada de fluido 66

molhante mais próxima à superfície sólida. Em (a) é mostrado o comportamento de $X(T)$ em um gráfico log-log e a correspondente curva de ajuste. Em (b) tem-se o deslocamento $X(T)$ simulado e sua curva de ajuste na forma $X(T) \sim T^{0.13}$.

Figura 5.3.1 – Diferentes viscosidades simuladas para a mesma densidade média de 10 70 partículas. Cada ponto é obtido com média temporal de 150000 passos com a utilização de uma força aplicada $\sim 5 \times 10^{-4}$ (unidades de rede).

Figura 4.3.2 – Fator multiplicativo da viscosidade em função da probabilidade de 70 evolução P_e para um estado de saída diferente. Note que, modificando as regras de colisão do modelo, pode-se simular viscosidades até 50 vezes maiores.

Figura 5.4.1 – Seqüência da simulação da invasão de um capilar 2D com dimensão de 73 325x30 influenciada pela gravidade utilizando o modelo MLGA. As imagens de (a) a (t) correspondem aos passos de tempo de 1000 a 360000, respectivamente, e foram obtidas com média temporal de 200 passos. Note que a medida que as forças capilares se equilibram com as forças gravitacionais a interface tendem a situação de equilíbrio.

Figura 5.4.2 – Curva de ascensão capilar $X(T)$ obtida a partir do modelo MLGA. Os 74 círculos correspondem aos pontos obtidos na simulação, enquanto a linha contínua corresponde a curva teórica obtida usando o modelo descrito na seção 2.3.1, considerando que as duas fases presentes são água e ar. A altura h de equilíbrio é ~ 237 unidades de rede. O tempo total de simulação foi ~ 80 horas.

Figura 5.5.1 – Seqüência da simulação da formação de bolhas de um fluido não-molhante 76 em um fluido molhante para uma rede com a dimensão 200x350. Todas as imagens foram obtidas com média temporal de 500 passos, sendo que (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 500, 6500, 11500, 15000, 21000 e 30000 passos de tempo, respectivamente. O tempo total de simulação foi ~ 2 horas.

Figura 5.6.1 – Seqüência da simulação de um processo de drenagem em uma junção 78 capilar-cavidade esférica em uma rede de 192x493. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 28000, 80000, 148000, 156000, 166000 e 204000 passos de tempo,

respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 2000 passos. A configuração de equilíbrio da interface é obtida em (b), sendo necessário aumentar a pressão aplicada na fase não-molhante para o sistema evoluir para as outras situações mostradas. O tempo total de simulação foi ~ 14 horas.

Figura 5.6.2 – Seqüência da simulação de um processo de drenagem em uma junção capilar-cavidade quadrada para uma rede de 192x493. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 36000, 116000, 270000, 286000, 296000 e 332000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 2000 passos. A configuração de equilíbrio da interface é obtida em (b), sendo necessário aumentar a pressão aplicada na fase não-molhante para o sistema evoluir para as outras situações mostradas. O tempo total de simulação foi ~ 14 horas. 79

Figura 5.6.3 – Curva de pressão capilar medida em função do tempo para um processo de drenagem em uma junção capilar-cavidade esférica. Nessa situação, o equilíbrio é atingido na junção, sendo necessário uma variação de pressão de ~ 0.05 para que a cavidade seja invadida. Os símbolos representam os pontos obtidos na simulação e a curva contínua é a curva de tendência, obtida pela média dos vizinhos adjacentes. 80

Figura 5.7.1 – Seqüência de um processo de drenagem entre água e óleo obtido experimentalmente (Chatzis & Dullien, 1983). As imagens (a) e (d) correspondem aos estágios inicial e final, respectivamente. 82

Figura 5.7.2 – Seqüência de um processo de embebição entre água e óleo obtido experimentalmente (Chatzis & Dullien, 1983). As imagens (a) e (f) correspondem aos estágios inicial e final, respectivamente. 82

Figura 5.7.3 – Seqüência de um processo de drenagem simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 151x487. As imagens de (a) a (f) correspondem a 12000, 22000, 29000, 42000, 48000 e 57000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 3.3 horas. 83

Figura 5.7.4 – Seqüência de um processo de embebição simulado utilizando o modelo 84

MLGA em uma rede 181x487. As imagens de (a) a (f) correspondem a 1400, 114000, 123000, 134000, 175000 e 190000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 10.5 horas.

Figura 5.7.5 – Seqüência de um processo de drenagem simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 181x541. As imagens de (a) a (f) correspondem a 7000, 21000, 28000, 46000, 61000 e 71000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 5 horas. 85

Figura 5.7.6 – Seqüência de um processo de embebição simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 181x541. As imagens de (a) a (f) correspondem a 1000, 47000, 65000, 85000, 97000 e 130000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 9.5 horas. 86

Figura 5.8.1 – Seqüência da simulação de um processo de invasão em uma geometria porosa idealizada com dimensão de 290x390 unidades de rede. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 6000, 12000, 18000, 24000, 30000 e 34000 passos de tempo, respectivamente. O ângulo de contato da fase invasora é ~ 180°. O tempo total de simulação foi ~ 3.7 horas. 90

Figura 5.8.2 – Seqüência da simulação de um processo de invasão em uma geometria porosa idealizada com dimensão de 290x390 unidades de rede. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 4500, 9000, 13500, 18000, 22500 e 27500 passos de tempo, respectivamente. O ângulo de contato da fase invasora é ~ 90°. O tempo total de simulação foi ~ 3.0 horas. 91

Figura 5.8.3 – Seqüência da simulação de um processo de invasão em uma geometria porosa idealizada com dimensão de 290x390 unidades de rede. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 2750, 8500, 13500, 18000, 22000 e 26000 passos de tempo, respectivamente. O ângulo de contato da fase invasora é ~ 0°. O tempo total de simulação foi ~ 2.8 horas. 92

Figura 5.8.4 – Saturação da fase deslocada em função do tempo de simulação para o escoamento em uma geometria porosa formada de círculos de mesmo raio aleatoriamente arranjados. Note que a saturação residual é menor para menores ângulos de contato, de acordo com os resultados experimentais de Mungan (1966). 93

Figura 5.9.1 – Esquematização do domínio de escoamento simulado. Na figura são mostradas as câmaras superior e inferior, onde ficam localizadas as fase não-molhante e molhante, respectivamente. 95

Figura 5.9.2 – Seqüência de um processo de drenagem ($\theta_c \sim 180^\circ$) em um meio poroso 2D idealizado com dimensão de 500x500 unidades de rede sob diferentes pressões externas aplicadas. As imagens de (a) a (l) correspondem a 50000, 100000, 150000, 175000, 200000, 225000, 250000, 300000, 350000, 400000, 450000 e 550000 passos de tempo, respectivamente. As imagens foram obtidas com média temporal de 500 passos. O tempo total de simulação foi ~ 145 horas. 97

Figura 5.9.3 – Seqüência de um processo de embebição ($\theta_c \sim 0^\circ$) em um meio poroso 2D idealizado com dimensão de 500x500 unidades de rede sob diferentes pressões externas aplicadas. As imagens de (a) a (l) correspondem a 16000, 150000, 200000, 235000, 256000, 300000, 403000, 425000, 475000, 506000, 535000 e 600000 passos de tempo, respectivamente, tendo como ponto de partida o último passo de tempo do processo de drenagem. As imagens foram obtidas com média temporal de 500 passos. O tempo total de simulação foi ~ 160 horas. 99

Figura 5.9.4 – Curvas de pressão capilar obtidas utilizando o modelo MLGA. Em (a) e (b), são mostradas as curvas de drenagem e embebição para a saturação da fase molhante e para saturação da fase não-molhante, respectivamente. 101

RESUMO

Visto como um problema dinâmico, o deslocamento imiscível em meios porosos é complicado, devido à existência de instabilidades dinâmicas na interface, provenientes da competição entre forças inerciais, de superfície e viscosas. O objetivo principal desse trabalho é a validação do Modelo de Gás em Rede Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) desenvolvido por Santos (Santos, L. O., 2000, *Desenvolvimento de Modelos de Gás em Rede para escoamentos Monofásicos e Bifásicos*, Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina) para a análise da dinâmica de deslocamentos imiscíveis bifásicos em geometrias porosas simplificadas bidimensionais, onde resultados experimentais e/ou teóricos estão disponíveis na literatura. O coeficiente de viscosidade em modelos booleanos depende da tabela de colisão específica usada na simulação. Dessa forma, regras de colisão adequadas foram desenvolvidas para a simulação de escoamentos bifásicos de fluidos com diferentes coeficientes de viscosidade, permitindo controlar a razão de mobilidade. A equação de Young-Laplace foi verificada a partir da configuração das fases em capilares após a configuração de equilíbrio mecânico ser alcançada. A dinâmica do processo de molhamento é analisada considerando o espalhamento de uma gota líquida em contato com uma superfície sólida plana. A ascensão capilar com influência da gravidade é simulada em um capilar bidimensional e comparada com um modelo teórico simplificado. A simulação da drenagem em uma junção entre uma constricção e um poro confirma resultados teóricos anteriores, que estabelecem que a invasão de um fluido não-molhante em um poro é também controlada pela resistência hidráulica de entrada. Configurações geométricas simplificadas são usadas para estudar problemas de aprisionamento em mecanismos de embebição e drenagem, e comparados com resultados experimentais. Finalmente, um meio poroso bidimensional idealizado é utilizado para estudar a influência da molhabilidade na eficiência do deslocamento e analisar a dinâmica de invasão em curvas de pressão capilar. Os resultados obtidos, aparentemente, confirmam a viabilidade do modelo MLGA na análise dinâmica de processos de deslocamento imiscível.

ABSTRACT

Conceived as a *dynamical* problem, two-phase immiscible displacement inside a porous structure is complicated, because the interface is the site of dynamical instability sources, considering the competition among inertial, surface and viscous forces. The main objective of the present work is the validation of the Field Mediators Boolean Model (MLGA) developed by Santos (Santos, L. O., 2000, *Desenvolvimento de Modelos de Gás em rede para Escoamentos Monofásicos e Bifásicos*, Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina) for the dynamical analysis of two-phase immiscible displacement inside porous structure, where experimental and/or theoretical results are available. The viscosity coefficient in Boolean models is related to the particular collision table used in the simulation. In this way, suitable collision rules were developed for the two-phase simulation of fluids with very different viscosity coefficients, enabling to control the mobility ratio. The Young-Laplace equation is verified from the phase-configuration inside capillary channels, when mechanical equilibrium was reached. The dynamics of the wetting process is analyzed by considering the spreading of a liquid drop in contact with a flat solid surface. Capillary rise under the action of gravity is simulated inside a two-dimensional channels and compared with a simplified theoretical model. Simulation of drainage in the junction between a constriction and a cavity confirms previous theoretical results, asserting that non-wetting fluid invasion into the cavity is controlled by an entry hydraulic resistance. Simplified two-dimensional geometrical configurations are used for studying imbibition and drainage and the role of trapping in invasion processes and compared with experimental results. Finally, idealized two-dimensional porous media are used for studying the influence of wetting properties in defining the displacement efficiency and to analyze the influence of the invasion dynamics on imbibition-drainage capillary curves. Overall results, apparently, confirm the suitability of MLGA model in the dynamical analysis of immiscible displacement.

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

O escoamento multifásico de fluidos imiscíveis em estruturas porosas tem sido um problema intensamente estudado por vários pesquisadores (Lenormand & Touboul, 1988; Chatzis & Dullien, 1983). Esse interesse origina-se da importância que tal processo desempenha, considerando-se tanto sua área do conhecimento quanto o seu papel ambiental e econômico. Do ponto de vista econômico, o escoamento de diferentes fluidos simultaneamente em meios porosos têm grande importância na indústria de recuperação de petróleo, onde se tem uma mistura de óleo/água/gás impregnada em um meio poroso formado por rochas sedimentares. Como a principal meta da indústria de recuperação de petróleo é otimizar o processo de extração, torna-se de fundamental importância o melhor entendimento dos fenômenos relacionados ao escoamento de tal mistura, para que uma maior taxa de recuperação seja alcançada. Nesse sentido, o conhecimento científico se impõe como elemento essencial no processo como um todo, pois para aumentar a quantidade de petróleo e gás natural recuperada, mantendo-se em um patamar economicamente viável, é necessário compreender os fenômenos físicos, químicos e biológicos envolvidos. Além disso, o escoamento de fluidos em meios porosos tem sido visto com enorme importância no cenário ambiental atual. Esse fato é devido ao sério problema de derramamento de contaminantes agrícolas, combustíveis e lubrificantes, resíduos de processos químicos e metais pesados de forma inadequada no solo, o que provoca a contaminação de lençóis freáticos que abastecem regiões urbanas e de irrigação.

Embora o escoamento multifásico em estruturas porosas tenha sido muito estudado experimentalmente (Olson et al., 1997), simulações numéricas de tais processos podem fornecer informações importantes que muitas vezes não são acessíveis a partir de experimentos. Além disso, geralmente existe um maior controle sobre as simulações, o que possibilita a análise do escoamento em uma faixa de parâmetros difícil e muitas vezes demorada de se realizar experimentalmente. Esse procedimento, muitas vezes, pode fazer com que as simulações computacionais resultem, no mínimo, em novas percepções do fenômeno observado de modo a ressaltar relações físicas não aparentes, ou inexistentes em modelos disponíveis, que eventualmente podem ser testadas utilizando experimentos mais elaborados.

Modelos de gás em rede (Frisch et al., 1986) são compostos basicamente de um conjunto de partículas de mesma massa e velocidade que podem ocupar somente determinadas posições em uma rede discreta. Cada passo da evolução do modelo é dividida em duas etapas: colisão e propagação. A característica comum entre tais modelos é a conservação do número de partículas e da quantidade de movimento em cada sítio. Essas partículas idealizadas, distribuídas em uma rede discreta, podem então ser forçadas a escoar através de um meio qualquer, de modo que possam ser medidas as propriedades macroscópicas do escoamento.

No caso de interesse, busca-se simular o comportamento de fluidos, nos quais as equações da continuidade e Navier-Stokes são válidas. Devido às equações de Navier-Stokes apresentarem grandes dificuldades de solução – pois possuem termos não lineares – especialmente em geometrias complexas, os modelos de gás em rede surgem como um outro enfoque para simulação de escoamentos monofásicos e multifásicos. Mesmo com toda a simplicidade do modelo brevemente descrito acima, o mesmo, quando executado em uma escala suficientemente grande, se comporta de acordo com as equações de Navier-Stokes. Dessa forma, evidencia-se que o comportamento macroscópico de fluidos reais independem

diretamente da dinâmica microscópica complexa e detalhada encontrada nestes sistemas (Wolfram, 1986).

No caso de modelos de gás em rede monofásicos, já existe uma extensa literatura para validação desses modelos (Olson et al., 1997). Mas para o caso bifásico, muito pouco sobre o assunto pode ser encontrado na literatura. Entre os modelos mais citados e utilizados estão o modelo de Rothman & Keller (1988) e o modelo de Chen et al. (1991) (originado do modelo de Somers & Rem (1991)) que serão brevemente descritos posteriormente. Esses modelos apresentam boa aceitação pela comunidade científica, mas apresentam algumas desvantagens, como etapas não locais e tempos de computação elevados.

Recentemente, um novo modelo de gás em rede para escoamento multifásico foi introduzido por Santos (2000); Santos & Philippi (2002). Este modelo utiliza o conceito de *mediadores de campo*, como sendo “partículas” responsáveis pelo transporte das informações de campo relacionadas à distribuição de fases distintas na rede. De acordo com os resultados mostrados em Santos (2000), o Modelo de Gás em Rede Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) tem se mostrado promissor para simulação de escoamentos multifásicos, mas sendo um modelo novo, há a necessidade de validações que comparem resultados experimentais com resultados simulados.

O objetivo principal desse trabalho é comparar os resultados experimentais e teóricos presentes na literatura relacionados com processos de deslocamento imiscíveis em estruturas porosas com os resultados simulados obtidos utilizando o modelo MLGA. Dessa forma, o presente trabalho está organizado como se segue. Inicialmente, são mostrados brevemente alguns aspectos sobre processos de deslocamento imiscível em geometrias porosas, onde introduzimos terminologias comuns na literatura, relacionadas com esses tópicos. Feito isso, apresentamos os modelos de gás em rede monofásicos, tanto em nível microscópico quanto em nível macroscópico, onde são obtidas equações macroscópicas do escoamento

semelhantes às equações da continuidade e de Navier-Stokes. Então, são revistos os principais modelos de gás em rede para escoamento bifásico presentes na literatura e juntamente o modelo MLGA (Santos, 2000; Santos & Philippi, 2002), utilizado nesse trabalho. Finalmente, são mostrados os resultados obtidos nas simulações utilizando o modelo MLGA e algumas comparações com resultados extraídos da literatura existente.

CAPÍTULO 2

2. PROCESSOS DE DESLOCAMENTO IMISCÍVEL

Nessa seção, serão descritos alguns dos fatores que podem influenciar o processo de deslocamento imiscível entre dois fluidos. O objetivo principal dessa seção é apresentar uma revisão dos fenômenos predominantes em deslocamentos imiscíveis, visando desenvolver uma descrição fenomenológica para tais processos.

2.1. Escoamento Bifásico e Processos de Deslocamento Imiscível

Um grande número de fatores pode afetar o escoamento bifásico de fluidos em meios porosos, entre os quais estão a capilaridade, a viscosidade, os efeitos gravitacionais, a tensão interfacial entre os dois fluidos, a molhabilidade dos fluidos, as propriedades físicas e químicas da superfície dos poros, i.e., se há ou não agentes ativos na superfície, ou se a superfície é fractal em termos da morfologia do espaço poroso. Obviamente, o deslocamento de um fluido por outro em um meio poroso envolve um conjunto de fenômenos complexos, e atualmente não existe na literatura modelos físicos desenvolvidos capazes de levar em conta todos esses fatores (Sahimi, 1993).

2.2. Molhabilidade

Num sentido mais amplo, a interação sólido-fluido é chamada de molhabilidade. Tal interação tem um papel muito importante no escoamento de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso, principalmente no âmbito dos processos avançados de recuperação de petróleo, assim como para muitos outros fenômenos.

Considere, como exemplo, uma situação na qual uma gota de água é colocada em uma superfície imersa em óleo. O ângulo de contato formado pode variar de 0° a 180° . Uma situação típica é mostrada na figura 2.2.1, onde são mostradas as três diferentes tensões interfaciais existentes que estão relacionadas pela equação de Young-Dupré

$$\sigma_{ow} \cos \theta = \sigma_{os} - \sigma_{ws} \quad (2.1)$$

onde σ_{ow} , σ_{os} e σ_{ws} são as tensões interfaciais entre o óleo e a água, o óleo e a superfície sólida e a água e a superfície sólida, respectivamente. Normalmente, o ângulo de contato θ é medido na fase água. Estritamente falando, se $\theta < 90^\circ$, a superfície é preferencialmente água-molhante. Entretanto, na prática, para $\theta < 65^\circ$ a superfície é água-molhante, enquanto para $105^\circ < \theta < 180^\circ$ a superfície é dita óleo-molhante. Se $65^\circ < \theta < 105^\circ$, a superfície não tem nenhuma preferência por qualquer uma das fases.

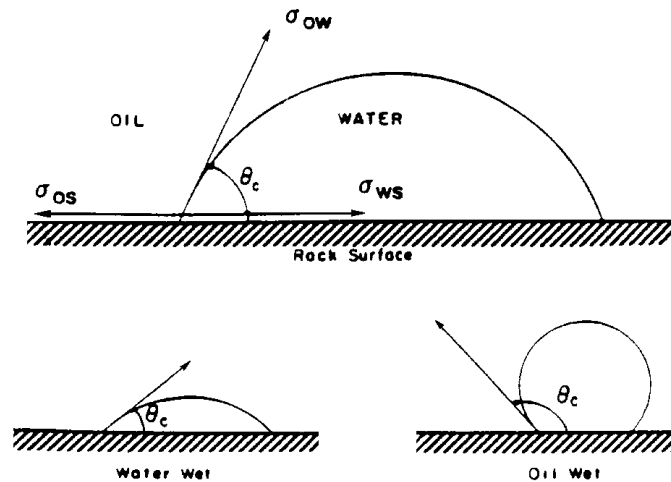


Figura 2.2.1 – Formação do ângulo de contato entre uma superfície sólida e um líquido (Anderson, 1986).

2.3. Pressão Capilar

Quando dois fluidos estão em contato e contidos em uma estrutura porosa, uma descontinuidade na pressão existe através da interface que separa ambos os fluidos. A magnitude dessa diferença depende da curvatura da interface em determinado ponto (região do espaço poroso). Essa diferença de pressão através da interface é conhecida como pressão capilar P_c , e é definida como

$$P_c = P_{nw} - P_w \quad (2.2)$$

onde P_{nw} é a pressão na fase não-molhante e P_w é a pressão na fase molhante.

Considerando-se as condições de equilíbrio em uma área elementar em torno de um ponto na interface, sendo essa interface curva, têm-se dois raios principais de curvatura R_1 e R_2 perpendiculares entre si, relacionados pela equação de Young-Laplace, dada por

$$P_{nw} - P_w = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right). \quad (2.3)$$

Observando a equação acima para pressão capilar P_c , podemos interpretá-la como uma medida da tendência de um meio poroso absorver um fluido molhante ou repelir um fluido não-molhante. Dessa forma, a equação de Young-Laplace torna possível a descrição de fenômenos capilares encontrados em meios porosos.

Para o caso de um tubo cilíndrico de raio r , temos $R_1 = R_2 = r$, logo a pressão capilar é dada por

$$P_c = \frac{2\sigma \cos \theta}{R} \quad (2.4)$$

onde θ é o ângulo de contato, como pode ser observado na figura 2.3.1.

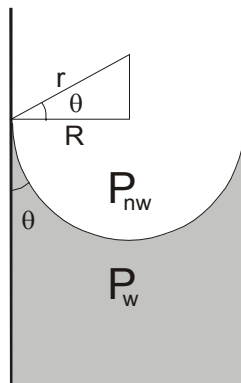


Figura 2.3.1 – Ângulo de contato θ formado em um tubo cilíndrico de raio R .

Muitas vezes, quando se deseja obter informações da geometria porosa de determinado meio poroso, como a porosidade e a distribuição do tamanho dos poros, costuma-se injetar um

fluido na fase porosa (geralmente, mercúrio), variando-se as pressões externas aplicadas. Esse processo fornece as curvas de pressão capilar, que permitem a obtenção de relações entre a pressão capilar aplicada P_c e a saturação de uma das fases S (em geral, a fase molhante) (ver figura 2.3.2). A partir das curvas de pressão capilar é possível obter, além da porosidade e da distribuição do tamanho dos poros, as saturações irreduzíveis da fase deslocada (a partir de uma curva de drenagem) e a saturação residual da fase deslocante (a partir de uma curva de embebição). Essas informações podem ser úteis em processos de deslocamento imiscível em meios porosos, pois podem fornecer as quantidades das fases que são bloqueadas durante o deslocamento. Assim, se pode fazer uma estimativa da quantidade de determinado fluido que pode ser extraído de um determinado meio poroso.

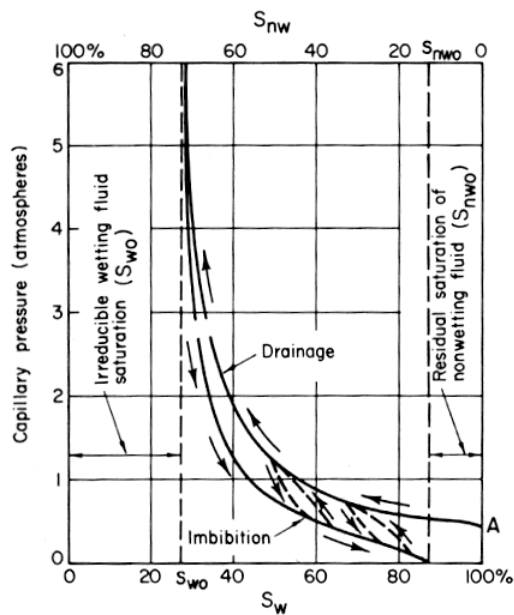


Figura 2.3.2 – Curva de pressão capilar típica. Note a diferença entre as curvas de drenagem e embebição caracterizando os efeitos de histerese (Bear, 1972).

Alguns fatores podem alterar a pressão capilar, como por exemplo, a histerese causada pela dependência do ângulo de contato θ com a direção do deslocamento entre dois fluidos.

Em relação ao ângulo de contato θ , esse pode assumir diferentes valores, dependendo da maneira com que a situação de equilíbrio é alcançada. Por exemplo, na figura 2.3.3, um ângulo de contato de *avanço* ocorre quando a água desloca o óleo, enquanto um ângulo de contato de *reco* ocorre quando o óleo desloca a água. Também pode ser observada a diferença entre o ângulo de contato estático θ , o ângulo de contato θ_1 – quando um fluido não-molhante é deslocado por um fluido molhante – e o ângulo de contato θ_2 – quando um fluido molhante é deslocado por um fluido não-molhante.



Figura 2.3.3 – Ângulo de contato θ estático em um capilar; ângulo θ_1 formado quando uma fase molhante desloca uma fase não-molhante; e ângulo θ_2 formado quando uma fase não-molhante desloca uma fase molhante (Bear, 1972).

2.3.1. Ascensão Capilar

Processos de invasão de fluidos movidos somente por forças capilares são fenômenos que dependem da geometria do meio poroso através do qual as fases se deslocam. Desse modo, torna-se difícil a obtenção de relações matemáticas que descrevem o deslocamento de um fluido por outro, dada a grande variabilidade espacial que a maioria dos meios porosos apresenta. Com o intuito de compreender algumas das características dinâmicas presentes na invasão de fluidos em meios porosos, apresenta-se aqui um estudo sobre a ascensão capilar.

Nesse caso, temos uma fase molhante deslocando uma fase não-molhante ao longo de um capilar de raio R movido somente por forças capilares. Um dos modelos mais simples para estudar a dinâmica da ascensão capilar é descrito logo abaixo.

A força motora desse escoamento é a pressão capilar P_c , dada pela lei de Young-Laplace. Para o caso de um capilar bidimensional ou de placas paralelas separadas por uma distância L , temos

$$P_c = \frac{2\sigma \cos \theta_d}{L} \quad (2.5)$$

onde σ é a tensão interfacial entre as fases. Note que na equação acima se utiliza o ângulo de contato dinâmico θ_d , que é diferente do ângulo de contato estático θ . Sabe-se que o ângulo de contato θ_d é dependente da velocidade de ascensão da fase invasora (Middleman, 1998).

Sendo a direção do escoamento contrária à gravidade, a força motora resultante é dada

$$\Delta P = \frac{2\sigma \cos \theta_d}{L} - \Delta \rho g x(t) \quad (2.6)$$

onde $\Delta \rho$ é diferença de densidade entre os fluidos, g é a aceleração gravitacional e $x(t)$ é altura da coluna da fase invasora medida a partir da superfície do reservatório.

Se assumirmos que as fases líquidas são Newtonianas, que o escoamento tem baixo número de Reynolds e encontra-se plenamente desenvolvido, podemos escrever a velocidade média v de ascensão da fase invasora usando a Lei de Poiseuille, dada por

$$v = \frac{dx(t)}{dt} = \frac{L^2 P_c}{12\mu x(t)} \quad (2.7)$$

onde μ é a viscosidade da fase invasora.

Combinando as equações acima, obtemos a seguinte equação diferencial

$$\frac{dx(t)}{dt} = \frac{\sigma L \cos \theta_d}{6\mu x(t)} - \frac{\rho g L^2}{12\mu} \quad (2.8)$$

onde foi assumido que $\rho_w \gg \rho_{nw}$.

Para resolver a equação acima são necessárias algumas aproximações. Assume-se na equação 2.8 o ângulo de contato estático θ e que o fluido molha completamente a superfície interna do capilar, ou seja, $\cos \theta = 1$.

Dessa forma, obtemos a seguinte equação diferencial na forma adimensional

$$X \frac{dX}{dT} = 1 - \frac{X}{H} \quad (2.9)$$

com $T = \frac{6\sigma t}{\mu L}$, $X = \frac{6x(t)}{L}$ e $H = \frac{6h}{L}$, onde h é a altura de equilíbrio, dada por

$$h = \frac{2\sigma}{\rho g L}. \quad (2.10)$$

Integrando a equação 2.9, obtemos a seguinte solução

$$T = -H^2 \left[\frac{X}{H} + \ln \left(1 - \frac{X}{H} \right) \right]. \quad (2.11)$$

A solução (eq. 2.11) é uma equação transcendental que pode ser utilizada para a comparação de resultados teóricos e/ou simulados com resultados experimentais.

2.3.2. Resistência Capilar Encontrada na Junção Construção-Poro

Quando se pretende simular processos de invasão imiscível, assume-se que o processo como um todo é governado principalmente pelo tamanho das constrições e dos poros do meio poroso. Assim, em um processo de drenagem é assumido que o poro conectado posterior a uma construção é invadido imediatamente após a construção. Tsakiroglou & Payatakes (1988) mostraram que nem sempre essa situação ocorre. Esses autores realizaram experimentos com intrusão de mercúrio e observaram que configurações de equilíbrio podem ser obtidas, não somente na entrada de constrições estreitas, mas também na entrada de poros. Ou seja, a invasão pode cessar quando a fase invasora não-molhante inicia a invasão de um poro de maior dimensão. Esse fenômeno é causado pela abrupta expansão da interface na junção construção-poro, como será mostrado logo abaixo.

Considere um menisco que lentamente invade um poro esférico após invadir uma construção cilíndrica, como é mostrada na figura 2.3.4. Assumindo que o ângulo de contato dinâmico β permanece constante, obtemos a pressão capilar P_c como função da distância z da linha de contato entre as fases, assim

$$P_c(z) = \frac{2\sigma \cos\beta}{r_w(z)} \quad (2.12)$$

onde $r_w(z)$ é o raio de curvatura na entrada do poro na posição z , dado por

$$r_w(z) = \sqrt{\frac{D_t^2}{4} + z\sqrt{D_c^2 - D_t^2} - z^2} \quad (2.13)$$

e

$$\cos\beta = \frac{\cos\theta + \text{sen}\theta \tan\omega}{\sqrt{1 + \tan^2\omega}} \quad (2.14)$$

com

$$\tan\omega = \frac{dr_w(z)}{dz} = \frac{\sqrt{D_c^2 - D_t^2} - 2z}{2\sqrt{\frac{D_t^2}{4} + z\sqrt{D_c^2 - D_t^2} - z^2}}. \quad (2.15)$$

A pressão capilar P_t correspondente ao diâmetro D_t da constricção. De acordo com a equação de Young-Laplace, P_t é dado por

$$P_t = \frac{4\sigma \cos\theta}{D_t}. \quad (2.16)$$

Pode-se utilizar P_t para adimensionalizar P_c , e assim $P^* = P_c/P_t$. Da mesma forma,

$z^* = z/z_t$ com o comprimento característico $z_t = \sqrt{D_c^2 - D_t^2}/2$.

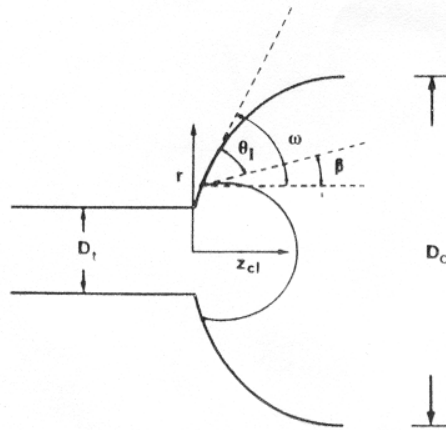


Figura 2.3.4 – Representação esquemática da expansão da interface entre dois fluidos na passagem de uma constrição estreita para um poro esférico. (Tsakiroglou & Payatakes, 1988).

Pode ser mostrado (Tsakiroglou & Payatakes, 1988) que não há a invasão do poro ($P_c(0) \geq P_t$), se e somente se

$$\frac{D_t}{D_c} \geq 2 \cos^2 \theta - 1. \quad (2.17)$$

Quando tal condição é satisfeita, temos que a pressão externa requerida para invadir o poro é maior que a pressão necessária para invadir a constrição. Além disso, é interessante notar que sendo a expansão gradual, a máxima resistência capilar pode ocorrer após a região de entrada do poro. Como será mostrado posteriormente, a referida resistência capilar também é observada em processos de drenagem simulados com a utilização de modelo de gás em rede booleanos com mediadores de campo.

2.4. Processos de Deslocamento Imiscível

O deslocamento imiscível em meios porosos é complicado pela existência de instabilidades dinâmicas presentes na interface, provenientes da competição entre forças inerciais, de superfície e viscosas. No deslocamento, podem existir dois ou mais fluidos imiscíveis escoando simultaneamente em um meio poroso, sendo um desses fluidos responsável pela movimentação dos outros.

Tal processo é controlado e influenciado por uma série de fatores, alguns deles já mencionadas anteriormente. Entre esses fatores, o número capilar Ca e a razão de mobilidade M têm a maior importância. O número capilar mede a relação entre forças viscosas e capilares, sendo definido como

$$Ca = \frac{\bar{v}\mu}{\sigma} \quad (2.18)$$

onde \bar{v} e μ são a velocidade média e a viscosidade dinâmica do fluido e σ é a tensão interfacial. Desse modo, para valores constantes de μ e σ , se \bar{v} é grande, as forças viscosas governam o escoamento, enquanto que se \bar{v} é pequena, as forças capilares predominam.

A mobilidade λ_i de um fluido i é definida como a razão entre a permeabilidade intrínseca do meio e a viscosidade do fluido: $\lambda_i = k_i/\mu_i$. Quando um fluido desloca outro, a razão de mobilidade M é definida como a razão entre as mobilidades do fluido deslocado e deslocante, e é um dos fatores mais importantes em qualquer processo de deslocamento.

Assim, dependendo de como se dá o processo de deslocamento, diferentes regimes de escoamento podem ocorrer. Na terminologia freqüentemente utilizada na literatura, denomina-se um processo de *drenagem* quando a fase não-molhante desloca a fase molhante

através do meio poroso, enquanto que num processo de *embebição* a fase molhante desloca a fase não-molhante.

Agora serão descritos alguns processos de deslocamento imiscível frequentemente citados na literatura.

2.4.1. Embebição Espontânea

O termo espontâneo refere-se à tendência de uma fase molhante *espontaneamente* invadir um meio poroso preenchido com uma fase não-molhante. Nesse processo, as forças capilares são predominantes na invasão. Por essa razão, sempre os menores poros que estão próximos à interface de separação entre os fluidos são inicialmente invadidos. Em qualquer passo de tempo, muitos poros são invadidos, fazendo com que toda uma frente de molhamento avance no meio poroso. Em geral, o deslocamento ocorre para pequenos números capilares. Além disso, o valor de Ca não permanece constante, mas varia em um intervalo de valores, devido a grande variabilidade espacial do meio poroso.

Quando valores relativamente grandes de Ca aparecem, uma *zona de transição* se desenvolve na qual existe um alto gradiente de saturação (Sahimi, 1993). Como a interface avança no meio poroso, duas regiões separadas se desenvolvem. Uma, na frente da zona de transição, na qual a saturação do fluido deslocado é alta, e outra, move-se atrás da zona de transição na qual a saturação do fluido deslocante é alta. Esta região expande-se com o avanço da interface. A zona de transição permanece essencialmente a mesma durante todo o deslocamento, exceto quando a interface aproxima-se do final do meio poroso. Por esta razão, esta região é chamada de zona estabilizada. É nesta região onde as bolhas de óleo são formadas pela desconexão da fase deslocada, devido à fase deslocante.

2.4.2. Embebição Quasi-estática

A principal diferença entre esse processo e a embebição espontânea é que neste, para qualquer passo de tempo, uma pequena quantidade de poros (com aproximadamente a mesma dimensão) é invadida pelo fluido deslocante. Isto pode ser feito ajustando a pressão externa em ambos os fluidos, de modo que as constrições mais estreitas sejam invadidas, enquanto as interfaces de outras constrições maiores permaneçam essencialmente imóveis.

Uma vez que as maiores constrições são menores que os poros que as conectam, depois que o poro é invadido, todas as constrições que estão conectadas a esse poro são também invadidas. Assim que a interface entra em tais constrições, o menor poro que estiver conectado a elas é invadido e assim por diante. Com o deslocamento, pequenas bolhas de fluido deslocado são formadas, ficando aprisionadas. No final do processo, pode haver um grande número de bolhas isoladas com uma fração de volume significativa. O valor desta fração depende da morfologia do espaço poroso (Sahimi, 1993).

2.4.3. Invasão com Vazão de Fluido Deslocante Constante

Nesse processo, uma grande diferença de pressão é aplicada ao domínio do escoamento, podendo ser suficientemente grande para dominar forças capilares. Se $M > 1$, a frente de deslocamento é instável sendo possível o aparecimento do fenômeno de “fingering” viscoso. Para $M < 1$, a frente de deslocamento é estável com uma pequena zona de transição em que as saturações de ambas as fases varia com o tempo. Sendo a pressão capilar desprezível em relação à pressão aplicada, têm-se em qualquer estágio do deslocamento, a invasão de muitos poros simultaneamente. Como a pressão aplicada é a força motora do

escoamento, as interfaces microscópicas escolhem as constrições maiores acessíveis, devido à menor resistência. Entretanto, isto não significa que as constrições menores não sejam invadidas, pois muitas vezes a pressão local é importante e pode causar a invasão de poros e constrições menores (Sahimi, 1993).

2.5. Equações para Escoamentos Imiscíveis

2.5.1. Equações do Contínuo

O escoamento simultâneo de duas fases pode ser descrito pelas equações da conservação da massa e Navier-Stokes escritas para cada fase. Além disso, devem ser impostas condições de contorno junto a interface de interação entre as duas fases. Para fluidos incompressíveis, as equações da massa e Navier-Stokes podem ser escritas para cada fase na forma

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v}_i &= 0 \\ \rho_i \partial_t \mathbf{v}_i + \rho_i (\mathbf{v}_i \cdot \nabla) \mathbf{v}_i &= -\nabla P_i + \mu_i \nabla^2 \mathbf{v}_i \end{aligned} \tag{2.13}$$

onde $i = 1, 2$, ρ_i , \mathbf{v}_i , μ_i , P_i são a densidade, a velocidade, a viscosidade e a pressão relativas à fase i , respectivamente.

Como já citado, devem ser impostas condições de contorno junto à interface. Uma das condições a ser imposta, diz respeito à velocidade normal à interface, que deve ser igual em ambas às fases e igual à componente normal da velocidade da interface. Dessa forma,

$$\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{v}_s \cdot \mathbf{n} \quad (2.14)$$

onde \mathbf{n} , \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 e \mathbf{v}_s são o vetor unitário normal à interface, a velocidade da fase 1, a velocidade da fase 2 e a velocidade da interface, respectivamente.

A outra condição imposta está relacionada a diferença do vetor tensão normal nas fases, que deve ser contrabalançada pela tensão interfacial σ . Matematicamente,

$$\mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{n} - \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{n} = \left(\frac{\sigma}{R} \right) \mathbf{n} \quad (2.15)$$

onde R e \mathbf{T}_i são o raio de curvatura e o tensor tensão relativo à fase i , definido como

$$\mathbf{T} = -P\mathbf{I} + \mu[\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T] \quad (2.16)$$

Existe ainda uma terceira condição de contorno, relacionada a espessura da interface ser considerada nula. A terceira condição diz que a velocidade tangencial a interface deve ser igual para ambas as fases e que as tensões tangenciais devem ser contínuas.

2.5.2. Equações Macroscópicas para Escoamento Bifásico

Em problemas práticos, a equação de Darcy para escoamento monofásico em meios porosos é generalizada para o caso bifásico, onde se assume que cada fase tende a escoar por determinados caminhos isolados. A equação de Darcy apresenta certas limitações, como: baixos números de Reynolds, fluidos Newtonianos, ausência de alterações físicas e químicas entre fluido-sólido, condições de não-eskorregamento e meios isotrópicos.

Para o caso de escoamento bifásico em condições de regime permanente, as equações de Darcy para ambas as fases, têm sido escritas na forma

$$Q_i = \left(\frac{k_i A}{\mu_i} \right) \left(\frac{\Delta P_i}{L} \right) \quad (2.17)$$

onde A , L , Q_i , ΔP_i , μ_i , k_i são a área seccional normal ao meio, o comprimento do meio na direção do escoamento, a vazão volumétrica, a diferença de pressão, a viscosidade e a permeabilidade efetiva, relativas à fase $i = 1, 2$. A permeabilidade efetiva k_i é comumente escrita como $k_i = k_{ri} k$, onde k é a permeabilidade absoluta do meio poroso e k_{ri} é a permeabilidade relativa à fase i , a qual depende de muitos outros parâmetros, como: saturação e “histórias” de saturação dos fluidos, morfologia do espaço poroso e molhabilidade dos fluidos.

CAPÍTULO 3

3. MODELOS DE GÁS EM REDE

Nessa seção, será apresentada uma revisão sobre os modelos de gás em rede para escoamentos monofásicos de fluidos. Visando ilustrar os principais modelos de rede utilizados para a simulação, serão apresentadas a dinâmica microscópica e a evolução do sistema em função do tempo.

Concluída a etapa de descrição geral dos modelos de gás em rede, será apresentada a dinâmica microscópica em função de regras simples impostas nas etapas de colisão e propagação, conduzindo a relações analíticas para descrição das interações entre as partículas que compõem o modelo em cada sítio da rede.

Por fim, será demonstrado que o sistema descrito pela dinâmica microscópica citada conduz para equações macroscópicas de conservação de massa e quantidade de movimento semelhantes às encontradas na mecânica dos fluidos, especificamente as equações da continuidade e Navier-Stokes.

3.1. Dinâmica Microscópica

Modelos de gás em rede são compostos basicamente de partículas que podem ser encontradas somente nos vértices de uma rede discreta. Conseqüentemente, podem interagir somente nessas regiões. As partículas podem mover-se na rede saltando de um sítio para outro sítio vizinho num passo de tempo, como o espaço percorrido pela partícula e o tempo necessário para percorrer esse espaço são discretos, tem-se um conjunto discreto de velocidades. Todos os modelos de gás em rede apresentam em um passo de evolução no tempo, duas etapas: colisão e propagação. Na etapa de colisão, as partículas interagem entre si trocando quantidade de movimento, o que altera suas velocidades. Após a colisão, as partículas passam pela etapa de propagação, que visa conduzi-las para os sítios vizinhos de acordo com o sentido de suas velocidades. As regras de colisão são específicas de cada modelo e rede utilizada, mas todos esses modelos têm em comum a conservação da quantidade de movimento total e número de partículas no sítio.

3.1.1. Modelo HPP

O primeiro modelo de gás de rede foi introduzido por Hardy, Pomeau e de Pazzis (HPP) (1973). Neste modelo, as partículas estão limitadas a uma rede discreta com 4 direções, chamada rede quadrada. Cada partícula possui velocidade unitária e pode se deslocar uma unidade de rede por passo de tempo. As partículas estão sujeitas a um princípio de exclusão que permite haver somente uma partícula em cada direção. Logo, somente 4 partículas podem ser encontradas em cada sítio, pois o modelo não permite partículas em repouso. Na etapa de colisão, as partículas interagem entre si conservando a quantidade de movimento total e

número de partículas no sítio. Após essa etapa, as partículas são propagadas para os sítios vizinhos mais próximos através da etapa de propagação. O modelo HPP pode ser probabilístico ou determinístico, dependendo das regras de colisão impostas. A figura 3.1.1 ilustra dois estados possíveis de saída após a colisão entre duas partículas. O modelo determinístico permite somente estados de saída diferentes do estado de entrada, enquanto o modelo probabilístico permite qualquer um dos estados mostrados como estado de saída. Pode ser mostrado que o modelo HPP não possui implicações físicas adequadas, pois o tensor viscosidade correspondente à rede quadrada não é isotrópico (Frisch et al., 1986). Esse fato é devido ao pequeno número de direções possíveis na rede quadrada.

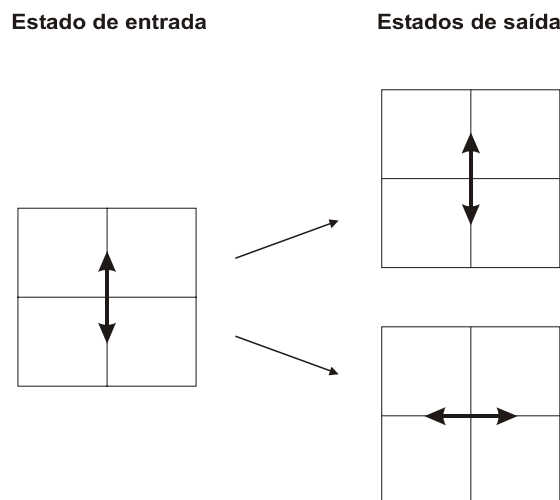


Figura 3.1.1 - Representação de uma rede quadrada na etapa de colisão. Para um dado estado de entrada existem dois prováveis estados de saída que são determinados pelas regras de colisão do modelo.

3.1.2. Modelo FHP

O modelo de gás em rede FHP foi introduzido inicialmente por Frisch, Hasslacher e Pomeau (FHP) (1986) e é baseado em uma rede discreta hexagonal com seis direções. O estado de cada sítio evolui como no modelo HPP, onde partículas colidem entre si e são propagadas para os sítios vizinhos mais próximos em um passo da evolução no tempo, sempre conservando massa e quantidade de movimento total. Da mesma forma que o modelo anterior, as partículas respeitam um princípio de exclusão, o qual permite somente uma partícula em cada direção. Dependendo do modelo de interesse, podem existir tanto partículas com velocidade unitária quanto partículas em repouso presentes nos vértices da rede. As partículas em repouso participam juntamente com partículas em movimento nas etapas colisionais. Diferentemente do modelo HPP, o modelo FHP possui o tensor viscosidade isotrópico (Frisch et al., 1986), e conseqüentemente pode ser utilizado para simulação de escoamentos de fluidos que seguem a equação de Navier-Stokes. As figuras 3.1.2 e 3.1.3 ilustram as etapas de colisão e propagação em uma rede hexagonal.

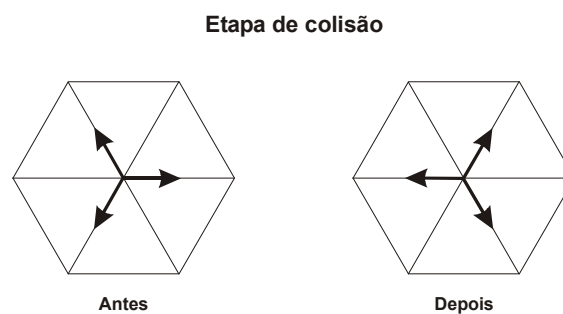


Figura 3.1.2 – Etapa de colisão de três partículas em uma rede hexagonal. Na figura são mostrados os estados do sítio anterior e posterior à colisão.

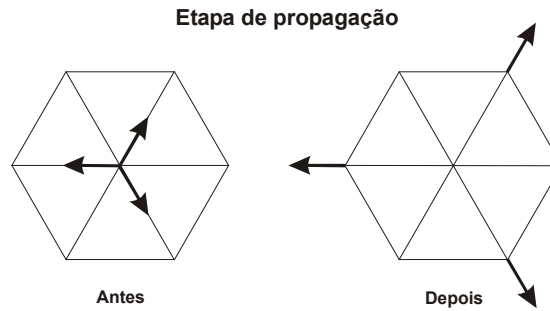


Figura 3.1.3 – Etapa de propagação de três partículas em uma rede hexagonal. Na figura são mostrados os estados do sítio anterior e posterior à propagação.

3.1.3. Modelo FCHC

Segundo Rothman (1997), não existe uma rede tridimensional que possua isotropia suficiente no tensor viscosidade e conseqüentemente recupere as equações macroscópicas isotrópicas de um fluido real. Uma maneira de contornar esse aparente problema é utilizar uma rede quadridimensional FCHC (hipercúbica de face centrada) (d’Humières, 1986) projetada no espaço 3D.

O modelo FCHC projetado possui 24 direções distribuídas entre os primeiros e segundos vizinhos de uma rede cúbica. O modelo segue as mesmas condições dos modelos bidimensionais já descritos, como princípio da exclusão e conservação da massa e quantidade de movimento total no sítio na etapa de colisão. Os 24 vetores da rede FCHC podem ser representados por

$$\mathbf{c}_i = \text{perm}(\pm 1, \pm 1, 0, 0) \quad (3.1)$$

onde $\text{perm}(a, b, c, d)$ indica todos os vetores obtidos das permutações de a, b, c e d . Existem seis permutações e quatro maneiras de escolher os sinais, resultando 24 vetores por vértice.

É possível relacionar diretamente esses 24 vetores com os primeiros e segundos vizinhos de uma rede cúbica, como já citado. Por exemplo, se nós considerarmos somente as três primeiras componentes de \mathbf{c}_i , obtemos 12 vetores da forma

$$\mathbf{u} = \text{perm}(\pm 1, \pm 1, 0) \quad (3.2)$$

os quais estão nas diagonais de uma rede cúbica tridimensional e conectam os segundos vizinhos. Há seis outros vetores, dados por

$$\mathbf{v} = \text{perm}(\pm 1, 0, 0) \quad (3.3)$$

os quais conectam os vizinhos mais próximos da rede cúbica.

Cada um desses vetores corresponde a um par de vetores quadrimencionais (ver figura 3.1.4), que podem ser escritos na forma

$$\mathbf{v} = \text{perm}(\pm 1, 0, 0, +1) \quad (3.4)$$

$$\mathbf{v} = \text{perm}(\pm 1, 0, 0, -1).$$

Assim, o modelo FCHC projetado possui dois vetores velocidade na mesma direção para cada primeiro vizinho, o que possibilita a presença de duas partículas nessas direções.

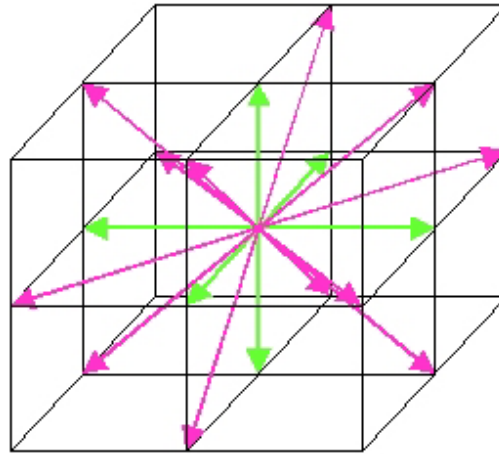


Figura 3.1.4 – Representação de uma célula unitária FCHC projetada no espaço 3D. Na figura são mostrados 18 vetores, sendo que 6 desses vetores (em verde) possuem componentes quadridimensionais, ou seja, representam 2 vetores na mesma direção.

3.2. Equações Microscópicas

Nessa seção, será desenvolvida a formulação matemática para os modelos de gás em rede em nível microscópico. Serão mostradas as equações que descrevem as etapas de colisão e propagação para as partículas nos vértices da rede discreta.

Considere uma rede bidimensional formada por sítios com b direções, onde cada sítio na rede é representado por um vetor posição \mathbf{X} . Cada sítio possui um número médio de partículas que possuem mesma massa (unitária), mesma velocidade (unitária) e pode se deslocar somente uma unidade de rede em cada passo de tempo T . Esse deslocamento, dado pela etapa de propagação, se dá sempre a partir do sítio \mathbf{X} para qualquer um dos primeiros vizinhos definidos por $\mathbf{X} + \mathbf{c}_i$, onde \mathbf{c}_i é um vetor que representa a velocidade na direção i .

Com essas definições, é possível descrever a dinâmica das partículas ilustrada nas figuras 3.1.2 e 3.1.3 da seção anterior, usando a seguinte equação

$$n_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) = n_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)] \quad (3.5)$$

onde (n_1, n_2, \dots, n_b) são variáveis booleanas que representam a presença ($n_i = 1$) ou ausência ($n_i = 0$) de partículas na direção i e $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_b)$. A função $\omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)]$ é o operador de colisão, que descreve a evolução de $n_i(\mathbf{X}, T)$ durante a colisão no sítio \mathbf{X} no tempo T .

O operador colisão pode ser definido como

$$\omega_i(\mathbf{n}) = \begin{cases} +1, & \text{se uma partícula é adicionada na direção } i \\ 0, & \text{se nada ocorre} \\ -1, & \text{se uma partícula é retirada da direção } i \end{cases}$$

O operador $\omega_i(\mathbf{n})$ é dependente da rede discreta utilizada. Dessa forma, para se obter os valores mostrados logo acima é necessário estabelecer o modelo de rede a ser utilizado.

A maneira mais geral de escrever $\omega_i(\mathbf{n})$ sem a necessidade de uma rede específica, pode ser dada pela seguinte relação:

$$\omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)] = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b \delta(n_j, s_j) \quad (3.6)$$

onde $\alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ é um elemento da matriz de transição que possui $2^b \times 2^b$ elementos, que indica quais transições são possíveis de um estado de entrada \mathbf{s} qualquer para um estado de saída \mathbf{s}' e pode ser definida como

$$\alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = \begin{cases} 1, & \text{se a transição } \mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}' \text{ conserva massa e quantidade de movimento total} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Note que a diferença $(s'_i - s_i)$ faz com que o operador de colisão se anule quando o estado de saída \mathbf{s}' for igual ao estado de entrada \mathbf{s} . Por fim, a função delta de Kronecker $\delta(n_j, s_j)$ pode ser escrita para variáveis booleanas como

$$\delta(n_j, s_j) = n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1-s_j}, \quad (3.7)$$

sendo o fator responsável pela verificação da igualdade $(s_1, \dots, s_b) = (n_1, \dots, n_b)$. Essa validação é necessária pois no processo de determinação de $\omega_i(\mathbf{n})$, todos os elementos da matriz de colisão são acessados.

Assim, o operador de colisão $\omega_i(\mathbf{n})$ pode ser escrito como

$$\omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)] = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1-s_j}. \quad (3.8)$$

A consequência natural da utilização das regras de colisão e propagação descritas acima é a conservação da massa e da quantidade de movimento total. Formalmente,

$$\begin{aligned} \sum_i^b n_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= \sum_i^b n_i(\mathbf{X}, T) \\ \sum_i^b n_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) \mathbf{c}_i &= \sum_i^b n_i(\mathbf{X}, T) \mathbf{c}_i. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Assim, a massa e a quantidade de movimento são invariantes colisionais, pois obedecem a relação $\sum_i n'_i Q = \sum_i n_i Q$, onde Q é um invariante colisional.

3.3. Equações Macroscópicas

Como foi visto na seção anterior, a equação de evolução da dinâmica microscópica de um modelo de gás em rede pode ser descrita pela equação

$$n_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) = n_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)] \quad (3.10)$$

Como o objetivo principal é a obtenção de equações macroscópicas que representem o comportamento médio das quantidades conservadas, o detalhamento microscópico descrito pela equação acima não é necessário. Desse modo, pode-se manipular apenas os valores médios de n_i . Tomando a média populacional (“ensemble averaging”) da equação 3.10, obtêm-se

$$N_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) = N_i(\mathbf{X}, T) + \langle \omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)] \rangle \quad (3.11)$$

onde $N_i(\mathbf{X}, T) = \langle n_i(\mathbf{X}, T) \rangle$.

No caso da média do operador de colisão $\omega_i(\mathbf{n})$, temos

$$\langle \omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)] \rangle = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} \left\langle \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{l - s_j} \right\rangle. \quad (3.12)$$

Assumindo a hipótese de *caos molecular*, obtêm-se

$$\Omega_i[\mathbf{N}(\mathbf{X}, T)] = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{l - s_j} \quad (3.13)$$

onde $\Omega_i = \langle \omega_i \rangle$ e $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = \langle \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') \rangle$. Note que $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ é a média dos elementos das matrizes de transição, e representa a probabilidade de evolução do estado \mathbf{s} para \mathbf{s}' .

Logo, a equação de evolução obtida é dada por

$$N_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) = N_i(\mathbf{X}, T) + \Omega_i[\mathbf{N}(\mathbf{X}, T)] \quad (3.14)$$

que é conhecida como equação de Boltzmann para gases em rede.

Juntamente com o conceito de probabilidade de evolução, introduz-se o conceito de balanço semi-detalhado para modelos de gás em rede, dado por

$$\sum_{\mathbf{s}} A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = 1 \quad \forall \mathbf{s}'. \quad (3.15)$$

O balanço semi-detalhado é uma condição menos restritiva que balanço detalhado, que assume $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = A(\mathbf{s}' \rightarrow \mathbf{s})$. Para os modelos de gás em rede utilizados, impõe-se a condição de balanço semi-detalhado.

3.3.1. Distribuições de Equilíbrio

Quando um gás está em equilíbrio pode ser dito que o estado do mesmo não é alterado pelas colisões, ou seja, o efeito global das colisões é nulo. Dessa forma, temos que $\Omega_i = 0$. Considerando que a probabilidade de ocorrência $P(\mathbf{s})$ de um determinado estado \mathbf{s} é dada por

$$P(\mathbf{s}) = \prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} \quad (3.16)$$

e que $\Omega_i = 0$, pode ser mostrado que para situações de equilíbrio todos os estados acessíveis por colisões são equiprováveis, ou seja, $P(s) = P(s')$.

Assim,

$$\prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} = \prod_{j=1}^b N_j^{s'_j} (1 - N_j)^{1-s'_j}. \quad (3.17)$$

Reescrevendo a expressão acima, obtêm-se

$$\sum_{j=1}^b s_j \ln \left(\frac{N_j}{1 - N_j} \right) = \sum_{j=1}^b s'_j \ln \left(\frac{N_j}{1 - N_j} \right). \quad (3.18)$$

Note que, o termo $\ln[N_j/(1 - N_j)]$ é um invariante colisional, assim como a massa e quantidade de movimento.

Sendo a combinação linear de invariantes colisionais também um invariante colisional, é possível escrever $\ln[N_j/(1 - N_j)]$ em função dos outros invariantes: a massa e a quantidade de movimento. Assim,

$$\ln \frac{N_j}{1 - N_j} = -hm_j - q_x c_{jx} - q_y c_{jy} = -h - \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_j \quad (3.19)$$

onde $m_j = 1$, h e \mathbf{q} são constantes a serem determinadas.

Logo,

$$N_j = \frac{1}{1 + e^{h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_j}}. \quad (3.20)$$

A distribuição de equilíbrio obtida é uma distribuição de *Fermi-Dirac*. As constantes h e \mathbf{q} podem ser determinadas utilizando a conservação da massa e da quantidade de movimento, definidas como

$$\begin{aligned}\sum_i N_i &= \rho \\ \sum_i N_i \mathbf{c}_i &= \rho \mathbf{u}.\end{aligned}\tag{3.21}$$

3.3.2. Equilíbrio para Baixas Velocidades

Nessa seção, será explorada a determinação de $N_i^{\text{eq}} = N_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u})$. Para isso, é necessário o conhecimento de $h(\rho, \mathbf{u})$ e $\mathbf{q}(\rho, \mathbf{u})$, as quais podem ser escritas na forma de séries de potências de \mathbf{u} , como

$$\begin{aligned}h(\rho, \mathbf{u}) &= h_0 + h_2 u^2 + O(u^4) \\ \mathbf{q}(\rho, \mathbf{u}) &= q_1 \mathbf{u} + O(u^3).\end{aligned}\tag{3.22}$$

Definindo a função $F(x) = 1/(1 + e^x)$, escreve-se $N_i^{\text{eq}} = F(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{c}_i)$. Expandindo N_i^{eq} em série de Taylor em torno de h_0 , obtêm-se

$$N_i^{\text{eq}} = F(h_0) + F'(h_0)(q_1 \mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i + h_2 u^2) + \frac{1}{2} F''(h_0) q_1^2 (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i)^2 + O(u^3).\tag{3.23}$$

Somando-se em i e fazendo $u = 0$, a equação acima resulta em

$$F(h_0) = \frac{\rho}{b}.\tag{3.24}$$

Usando a notação $f = \frac{\rho}{b}$ e percebendo que $F' = -F(1-F)$, tem-se

$$N_i^{\text{eq}} = f \left[1 - (1-f)(q_1 \mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i + h_2 u^2) + \frac{1}{2}(1-f)(1-2f)(q_1)^2 (\mathbf{u} \cdot \mathbf{c}_i)^2 \right]. \quad (3.25)$$

Substituindo N_i^{eq} nas condições de vínculo:

$$\begin{aligned} \sum_i N_i^{\text{eq}} &= \rho \\ \sum_i N_i^{\text{eq}} \mathbf{c}_i &= \rho \mathbf{u} \end{aligned} \quad (3.26)$$

e sabendo que (Rothman & Zaleski, 1997)

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = \frac{bc^2}{D} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.27)$$

onde D é número de dimensões do espaço e $c = |\mathbf{c}_i|$, os seguintes valores de q_1 e h_2 são obtidos:

$$q_1 = \frac{D}{(f-1)c^2} \quad (3.28)$$

$$h_2 = \frac{1}{2} \frac{D}{c^2} \frac{1-2f}{(1-f)^2}. \quad (3.29)$$

Finalmente, a distribuição de equilíbrio N_i^{eq} (escrita em notação de Einstein, onde índices repetidos em um produto implicam em uma soma sobre aqueles índices, ou seja,

$$X_\alpha Y_\alpha = \sum_{\alpha=1}^D X_\alpha Y_\alpha) \text{ assume a forma}$$

$$N_i^{\text{eq}} = f \left[1 + \frac{D}{c^2} u_\alpha c_{i\alpha} + \frac{D}{2} \frac{(1-2f)}{c^2(1-f)} u_\alpha u_\alpha + \frac{1}{2} \frac{(1-2f)}{(1-f)} \frac{D^2}{c^4} u_\alpha u_\beta c_{i\alpha} c_{i\beta} \right]. \quad (3.30)$$

$$\text{Definindo } G(f) = \frac{D^2}{2c^4} \left(\frac{1-2f}{1-f} \right) \text{ e } Q_{i\alpha\beta} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - \frac{c^2}{D} \delta_{\alpha\beta}, \text{ obtêm-se}$$

$$N_i^{\text{eq}} = f \left[1 + \frac{D}{c^2} u_\alpha c_{i\alpha} + G(f) Q_{i\alpha\beta} u_\alpha u_\beta \right]. \quad (3.31)$$

Como citado anteriormente, existem modelos de gás em rede que podem ter partículas em repouso. Nesse caso, devem ser obtidas as distribuições de equilíbrio relativas às partículas em repouso. Tais expressões podem ser encontradas em Santos (2000).

3.3.3. Equação da Continuidade

Para que seja possível a obtenção de equações macroscópicas é necessário converter a equação de Boltzmann 3.14 de unidades de rede para unidades físicas.

Considerando redes com dimensões grandes e intervalos de tempo longos, pode-se relacionar as variáveis de rede com variáveis contínuas, da seguinte forma:

$$\mathbf{x} = h_x \mathbf{X} \quad (3.32)$$

$$t = h_t T$$

$$C_i = \frac{h_x}{h_t} c_i$$

onde h_x e h_t são fatores de escala ($h_x \ll 1$ e $h_t \ll 1$).

Assim, a equação de Boltzmann 3.14 toma a forma

$$N_i(\mathbf{x} + h_t \mathbf{C}_i, t + h_t) - N_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.33)$$

Expandindo o primeiro termo da equação acima em séries de Taylor, tem-se

$$\begin{aligned} h_t \partial_t N_i + h_t C_{i\alpha} \partial_\alpha N_i + \frac{1}{2} h_t^2 \partial_t \partial_t N_i + h_t^2 C_{i\alpha} \partial_\alpha \partial_t N_i + \\ + \frac{1}{2} h_t^2 C_{i\alpha} C_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta N_i + O(h_t^3) = \Omega_i(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Considerando somente termos em primeira ordem em h_t , obtêm-se a equação de Boltzmann na forma diferencial:

$$\partial_t N_i + C_{i\alpha} \partial_\alpha N_i = \frac{1}{h_t} \Omega_i(\mathbf{x}, t). \quad (3.35)$$

As colisões conservam massa e quantidade de movimento, ou seja,

$$\begin{aligned} \sum_i \Omega_i &= 0 \\ \sum_i C_i \Omega_i &= 0. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Somando a equação 3.35 em i , tem-se

$$\partial_t \sum_i N_i + \partial_\alpha \left(\sum_i C_{i\alpha} N_i \right) = 0, \quad (3.36)$$

a qual resulta na *equação da continuidade* para modelos de gás em rede:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho v_\alpha) = 0 \quad (3.37)$$

onde v_α é a velocidade média em unidades físicas.

3.3.4. Equação de Euler

Para obtenção da equação de Euler para escoamento invíscido em modelos de gás em rede, procede-se da mesma forma adotada na seção anterior. Multiplica-se a equação 3.35 por c_i e soma-se em i , obtendo

$$\partial_t \sum_i C_{i\alpha} N_i + \partial_\beta \sum_i C_{i\alpha} C_{i\beta} N_i = 0. \quad (3.38)$$

Definindo o tensor densidade de fluxo de quantidade de movimento $\Pi_{\alpha\beta}$ como

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i C_{i\alpha} C_{i\beta} N_i. \quad (3.39)$$

É possível escrever a equação para quantidade de movimento para modelos de gás em rede na forma

$$\partial_t(\rho v_\alpha) + \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} = 0. \quad (3.40)$$

Assumindo que $N_i \sim N_i^{\text{eq}}$, e conseqüentemente, $\Pi_{\alpha\beta} \sim \Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}}$, o tensor densidade de fluxo de quantidade de movimento pode ser escrito na forma

$$\Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \left(\frac{h_x}{h_t} \right)^2 \sum_i N_i^{\text{eq}} \mathbf{c}_{i\alpha} \mathbf{c}_{i\beta}. \quad (3.41)$$

Considerando que (Rothman & Zaleski, 1997)

$$\sum_i \mathbf{c}_{i\alpha} \mathbf{c}_{i\beta} \mathbf{c}_{i\gamma} = 0 \quad (3.42)$$

e

$$\sum_i \mathbf{c}_{i\alpha} \mathbf{c}_{i\beta} \mathbf{c}_{i\gamma} \mathbf{c}_{i\delta} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} [\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}] \quad (3.43)$$

obtêm-se

$$\Pi_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = P \delta_{\alpha\beta} + \rho g(\rho) v_\alpha v_\beta \quad (3.45)$$

onde $P = \rho c_s^2 \left(\frac{h_x}{h_t} \right)^2 - \rho g(\rho) \frac{c_s^2 v^2}{c^2}$, $g(\rho) = \frac{D}{D+2} \left(\frac{b-2\rho}{b-\rho} \right)$ e $c_s = \sqrt{\frac{c^2}{D}}$ é a velocidade do som.

Então, a equação de Euler para gases em rede pode ser escrita na forma

$$\partial_t \rho v_\alpha + \partial_\beta [\rho g(\rho) v_\alpha v_\beta] = -\partial_\alpha P(\rho, v^2). \quad (3.46)$$

Note que a equação acima difere da equação de Euler da mecânica dos fluidos pelos fatores $g(\rho)$ e pela dependência da pressão $P(\rho, v^2)$ em relação ao quadrado da velocidade v . Esses dois fatores são provenientes de efeitos de rede originados na discretização do domínio, mas segundo Rothman et al. (1997) e Santos (2000) não são importantes quando as velocidades são pequenas, de forma que $|u| \ll c_s$ (regime incompressível). Se for considerado uma densidade ρ constante, é possível fazer a seguinte troca de variáveis $v' = g(\rho)v$ e $p' = g(\rho)p$, obtendo-se a equação de Euler sem o parâmetro $g(\rho)$ (Frisch et al., 1986).

3.3.5. Equação de Navier-Stokes

Utilizando-se a expansão de Chapman-Enskog mostrada no apêndice A, pode ser demonstrado, assumindo escoamentos incompressíveis, a seguinte equação

$$\partial_t \rho v_\beta + \partial_\alpha [g(\rho) v_\beta v_\alpha] = \partial_\alpha [\mu (\partial_\alpha \rho v_\beta + \partial_\beta \rho v_\alpha)] - \partial_\beta P \quad (3.47)$$

onde μ é o primeiro coeficiente de viscosidade.

A equação acima é a equação de Navier-Stokes para modelos de gás em rede, a qual difere apenas da equação da mecânica dos fluidos pela presença do fator $g(\rho)$, que como foi visto anteriormente, pode ser eliminado por uma mudança de variáveis.

3.4. Condições de Contorno

Como foi visto, os modelos de gás em rede possuem basicamente as etapas de colisão e propagação. A etapa de colisão é responsável pelas interações locais entre as partículas, enquanto que a etapa de propagação é responsável pela transmissão das informações sobre geometria e condições de contorno ao longo da rede juntamente com as partículas.

As condições de contorno podem ser impostas de diferentes maneiras. Entre as mais comuns utilizadas estão:

Condição periódica de contorno: essa condição conecta a entrada e a saída do domínio do escoamento, de modo a fazer com que as partículas que saiam do domínio sejam re-injetadas novamente na entrada. Dessa forma, a informação do escoamento não é modificada quando as partículas encontram as regiões de fronteiras. Essa condição é ilustrada na figura 3.4.1. Em geral, juntamente com as condições periódicas de contorno, utiliza-se a condição de *gravidade* para “forçar” o escoamento. Essa condição não é exatamente uma condição de contorno, pois visa imitar a ação de um campo gravitacional sobre uma massa de fluido, de modo que haja uma direção preferencial de escoamento. Esse processo é realizado acrescentando-se quantidade de movimento (de maneira constante) às partículas do domínio em uma determinada direção.

Velocidade: essa condição é utilizada para impor uma velocidade ao escoamento. Para isso, é utilizada a distribuição de equilíbrio de Fermi-Dirac N_i^{eq} naqueles sítios em que se deseja impor uma dada velocidade. Esse processo é realizado calculando-se um valor de N_i^{eq} para cada direção i a partir da densidade ρ e velocidade v de interesse.

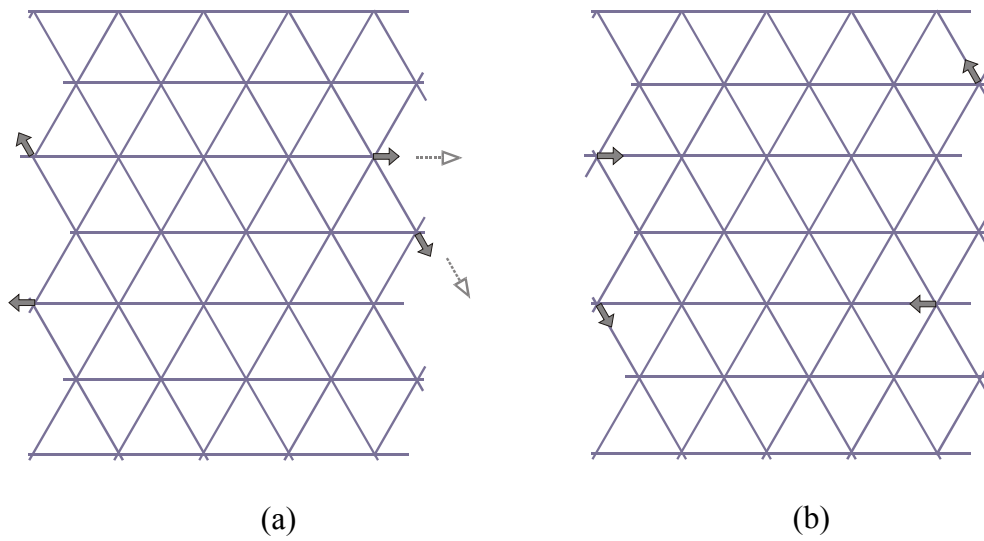


Figura 3.4.1 – Representação esquemática das condições de contorno periódicas em uma rede FHP. Em (a) e (b) são mostradas as situações anterior e posterior a propagação, respectivamente. (Santos, 2000).

Pressão: a pressão em modelos de gás em rede é proporcional a densidade média. Assim, quando se deseja impor uma determinada pressão aumenta-se a densidade média nos sítios da fronteira, de modo que essa pressão seja transmitida igualmente para todo o fluido.

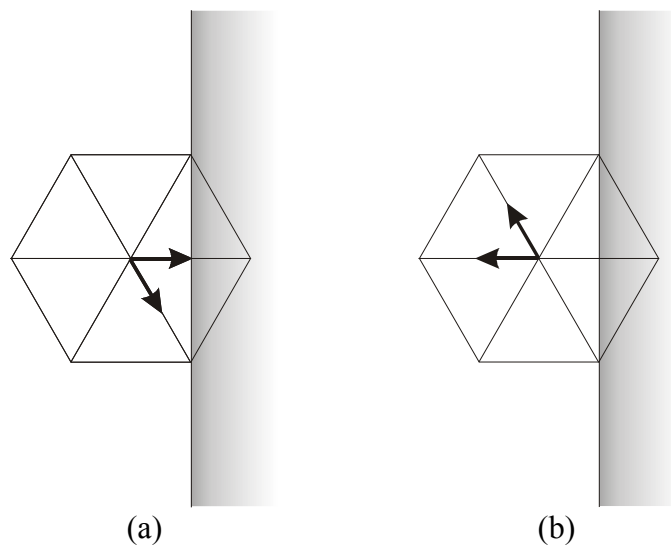


Figura 3.4.2 – Condição de contorno “bounce-back” em uma rede FHP. (a) e (b) representam os estados anterior e posterior a imposição da condição de contorno, dada na etapa de propagação.

Não-escorregamento: a condição de não-escorregamento junto às regiões sólidas é uma consequência da condição de “bounce-back”. Essa condição causa a reflexão de uma partícula da direção i para a direção $-i$ quando esta encontra uma parede sólida, o que resulta em uma velocidade aproximadamente nula nos sítios vizinhos às paredes (ver figura 3.4.2).

3.5. Obtenção dos Campos Macroscópicos

A densidade ρ e a quantidade de movimento ρv para cada sítio podem ser obtidas pelas relações dadas em 3.21. O problema é que muitas vezes esses campos apresentam muitos ruídos. Para superar esse problema, pode-se utilizar as médias de “ensembles”, como feito na seção 3.3, mas esse procedimento é inviável, pois tornam necessária a simulação independente do mesmo sistema várias vezes para que uma média adequada seja obtida. Existem ainda duas outras saídas para solucionar esse problema. A primeira é efetuar médias espaciais no domínio do escoamento, na qual divide-se o domínio em células de dimensão linear muito menor que um comprimento característico, obtendo-se médias localizadas em específicos passos de tempo, o que produz um campo da propriedade macroscópica de interesse. A segunda alternativa (utilizada nesse trabalho), é realizar médias temporais no domínio. Esse procedimento consiste em acompanhar o comportamento de cada sítio da rede e após um número de passos de tempo suficiente, efetuar a média da propriedade macroscópica. Para obtenção da média temporal é importante conhecer o tempo de evolução dinâmica do problema, para que não seja considerado um número excessivo de passos de tempo, o que resultaria em um campo macroscópico incorreto.

CAPÍTULO 4

4. MODELOS DE GÁS EM REDE PARA ESCOAMENTOS IMISCÍVEIS

Ao contrário dos modelos booleanos monofásicos, nos quais necessitávamos apenas de uma variável booleana para indicar a presença ou ausência de uma partícula em uma dada direção, nos modelos de gás em rede bifásicos existe a necessidade de identificar cada tipo de partícula (ou fluido), sendo necessária a utilização de uma nova variável booleana. Além disso, quando se estuda o comportamento de mais de um fluido é conveniente adotar uma terminologia de cor para cada fluido. Dessa forma, essa nova variável booleana conterá a informação de cor de uma dada partícula. Neste trabalho, adota-se as cores azul e vermelha para representar as partículas de cada fluido.

4.1. Modelo de Rothman & Keller (1988)

No modelo proposto por Rothman e Keller o estado de um sítio é descrito por duas variáveis booleanas: $r_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i)$ e $b_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i)$ que representam a presença ou ausência de partículas vermelhas e azuis na direção i , respectivamente.

Assim como nos modelos monofásicos, o modelo de Rothman e Keller é composto pelas etapas de colisão e propagação, sendo a etapa de propagação efetuada da mesma forma que nos modelos monofásicos. A etapa de colisão é efetuada de modo a introduzir o caráter

imiscível do escoamento, ou seja, partículas de determinada cor tenderão a se deslocar em direção de outras partículas de mesma cor, a fim de que seja obtida a separação das fases. Nesse processo, massa total, quantidade de movimento total e o número de partículas azuis e vermelhas são conservados.

Formalmente, o modelo de gás em rede imiscível bidimensional proposto Rothman & Keller pode ser formulado como se segue. Seja um estado qualquer em uma rede hexagonal dado por $s = (\mathbf{r}, \mathbf{b}) = (r_0, b_0, \dots, r_6, b_6)$, onde o índice 0 corresponde às partículas em repouso e os índices superiores referem-se às direções dos vetores velocidade \mathbf{c}_i . Como citado anteriormente, a etapa de propagação é a mesma que nos modelos monofásicos, assim

$$\begin{aligned} b_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= b_i'(\mathbf{X}, T) \\ r_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= r_i'(\mathbf{X}, T) \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde \mathbf{r}' e \mathbf{b}' são os estados pós-colisionais.

Rothman & Keller supuseram que os estados pós-colisionais \mathbf{r}' e \mathbf{b}' deveriam depender da vizinhança, mais especificamente dos vizinhos mais próximos. Dessa maneira, apareceriam as diferenças de concentração para que houvesse a separação de ambas as fases. A maneira encontrada pelos autores do modelo foi criar um processo de maximização responsável pela difusão local das partículas, ou seja, partículas vermelhas e azuis seriam conduzidas na direção de maior concentração relativa a sua própria cor, assim as duas fases separar-se-iam espontaneamente. Dessa forma, os estados pós-colisionais escolhidos seriam aqueles que maximizassem a relação

$$\mathbf{q}(\mathbf{r}', \mathbf{b}') \cdot \mathbf{f} \tag{4.2}$$

onde \mathbf{q} e \mathbf{f} são o fluxo e gradiente de cor dados por

$$\mathbf{q}[\mathbf{r}(\mathbf{X}), \mathbf{b}(\mathbf{X})] = \sum_i c_i [r_i(\mathbf{X}) - b_i(\mathbf{X})] \quad (4.3)$$

e

$$\mathbf{f}(\mathbf{X}) = \sum_i c_i \sum_j [r_j(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i) - b_j(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i)] \quad (4.4)$$

respectivamente.

Note que o vetor fluxo de cor (que aponta na direção para onde as partículas vermelhas tendem a se deslocar) é a diferença entre as quantidades de movimento das partículas vermelhas e azuis, sendo máximo quando as partículas tendem a separar-se (quantidade de movimento das partículas azuis e vermelhas com mesma direção e sentidos opostos). No cálculo do gradiente de cor \mathbf{f} , é computada em cada sítio vizinho a diferença entre o número de partículas azuis e vermelhas, isso faz com que o vetor esteja apontado para a direção de maior concentração de partículas vermelhas e menor concentração de partículas azuis. Deve ser lembrado que em regiões totalmente monofásicas o comportamento do modelo proposto é o mesmo dos modelos monofásicos, já descritos anteriormente.

Para demonstrar que o modelo proposto é capaz de simular o comportamento de fluidos imiscíveis, Rothman & Keller primeiramente simularam a separação entre dois fluidos imiscíveis inicialmente misturados com uma concentração de 50% cada.

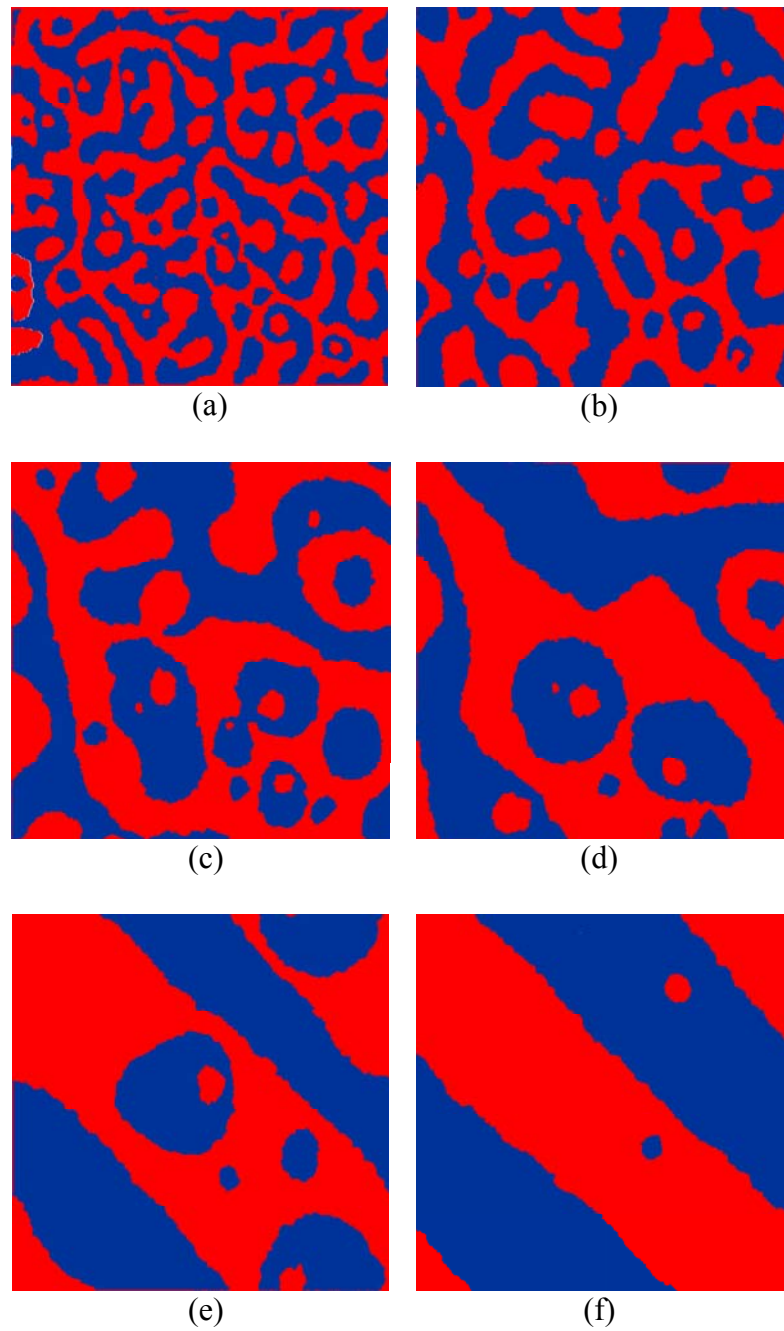


Figura 4.1 – Separação de fases simulada com o modelo proposto por Rothman & Keller. Em (a), (b), (c), (d), (e) e (f) são mostradas etapas da simulação do modelo, correspondendo a 500, 1000, 2000, 4000, 10000 e 50000 passos de tempo, respectivamente (Rothman & Keller, 1988).

Uma outra forma de validação do modelo proposto é submetê-lo a lei de Young-Laplace para uma bolha de raio R (raio de curvatura da interface), que para o caso bidimensional pode ser escrita como

$$P_{in} - P_{out} = \frac{\sigma}{R} \quad (4.5)$$

onde P_{in} e P_{out} são a pressão na fase cuja interface é côncava e a pressão na fase cuja interface é convexa, respectivamente. Os resultados obtidos são apresentados na figura abaixo.

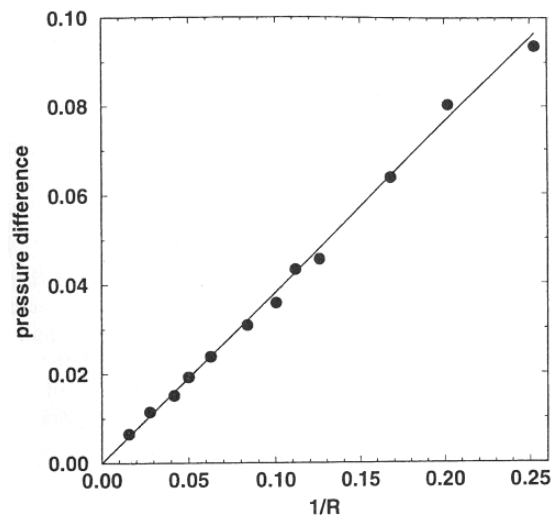


Figura 4.2 – Verificação da lei de Young-Laplace para o modelo de Rothman & Keller (Rothman & Keller, 1988).

4.2. Modelo de Chen et al. (1991)

No modelo proposto por Chen et al. (1991), os autores utilizam um modelo de gás em rede *local* inicialmente introduzido por Somers & Rem (1991). A idéia utiliza o conceito de “buraco” colorido, que representa a “memória” de uma partícula de uma dada cor, movendo-

se na mesma direção anterior a colisão. Dessa forma, o buraco colorido seria propagado como uma partícula qualquer, mas carregaria a informação de que naquela direção existia uma partícula com a mesma cor do buraco. Assim, a informação local de cores de partículas seria transmitida para outras regiões sem a necessidade de consulta aos primeiros vizinhos, o que não ocorre no modelo de Rothman & Keller (1988).

O modelo proposto utiliza duas variáveis booleanas para descrever o estado de um sítio: $f_i(\mathbf{X}, T)$ e $N_i(\mathbf{X}, T)$, sendo que $f_i = 1$ indica a presença de uma partícula vermelha e $f_i = 0$ a presença de uma partícula azul, enquanto que $N_i = 1$ indica a presença de uma partícula e $N_i = 0$ a presença de um buraco. A rede utilizada foi uma rede hexagonal com uma partícula parada em cada sítio, o que aumenta o número de estados possíveis.

A fim de satisfazer as equações de Navier-Stokes, a quantidade de movimento total e o número de partículas de cada cor são conservados durante o processo de colisão, o que resulta nas seguintes regras:

$$\begin{aligned} \sum_i N_i f_i &= \sum_i N_i' f_i' \\ \sum_i N_i (1 - f_i) &= \sum_i N_i' (1 - f_i') \\ \sum_i N_i c_i &= \sum_i N_i' c_i \end{aligned} \tag{4.6}$$

onde N_i' e f_i' representam os estados pós-colisionais.

Como já citado anteriormente, a idéia fundamental do modelo proposto é ter os buracos atuando como memória de partículas de mesma cor e permitir que essa informação de cor seja transmitida com a propagação dos buracos. As partículas coloridas movem-se na direção oposta ao fluxo de buracos na etapa de colisões. Os buracos são criados e destruídos de acordo com a seguinte regra: quando uma partícula muda de direção na colisão, um buraco

de mesma cor é criado na direção original. Um buraco é aniquilado se existe uma partícula na mesma direção. Assim, a informação local de cores de um sítio é transmitida pelos buracos a uma distância da ordem do livre caminho médio (Chen et al, 1991).

Tendo em vista a simulação de fenômenos como separação de fases, há a necessidade de introduzir interações atrativas entre partículas iguais. Para isso, Chen et al. (1991) introduz um vetor fluxo local para partículas coloridas \mathbf{G} dado por

$$\mathbf{G} = \sum_i (2f_i - 1)N_i \mathbf{c}_i \quad (4.7)$$

e um fluxo local para buracos coloridos \mathbf{F} dado por

$$\mathbf{F} = \sum_i (2f_i - 1)(1 - N_i) \mathbf{c}_i. \quad (4.8)$$

As regras de colisões para o modelo proposto são:

(i) Escolha de um estado de saída que maximize a quantidade $Q = -\mathbf{F} \cdot \mathbf{G}'$. Isso garante que as partículas se deslocarão na direção oposta ao fluxo local de buracos de cada cor;

(ii) Se existe mais de um estado de saída com mesmo valor máximo Q , é escolhido o estado de saída com mínimo $|\mathbf{G}'|$;

(iii) Se ainda existem vários estados de saída possíveis, é escolhido aquele com uma partícula em repouso. Isso diminui a velocidade do escoamento e aumenta a separação de fases;

(iv) Se ainda existem várias configurações possíveis, então é escolhido a saída que minimize a viscosidade, ou seja, uma saída diferente da entrada;

(v) Se mesmo assim existir mais de um estado de saída possível, a escolha é feita aleatoriamente.

Terminado o processo de colisão, a etapa de propagação é realizada da mesma maneira que os modelos monofásicos.

Alguns resultados obtidos com o modelo descrito acima, são mostrados na figura 4.2.1.

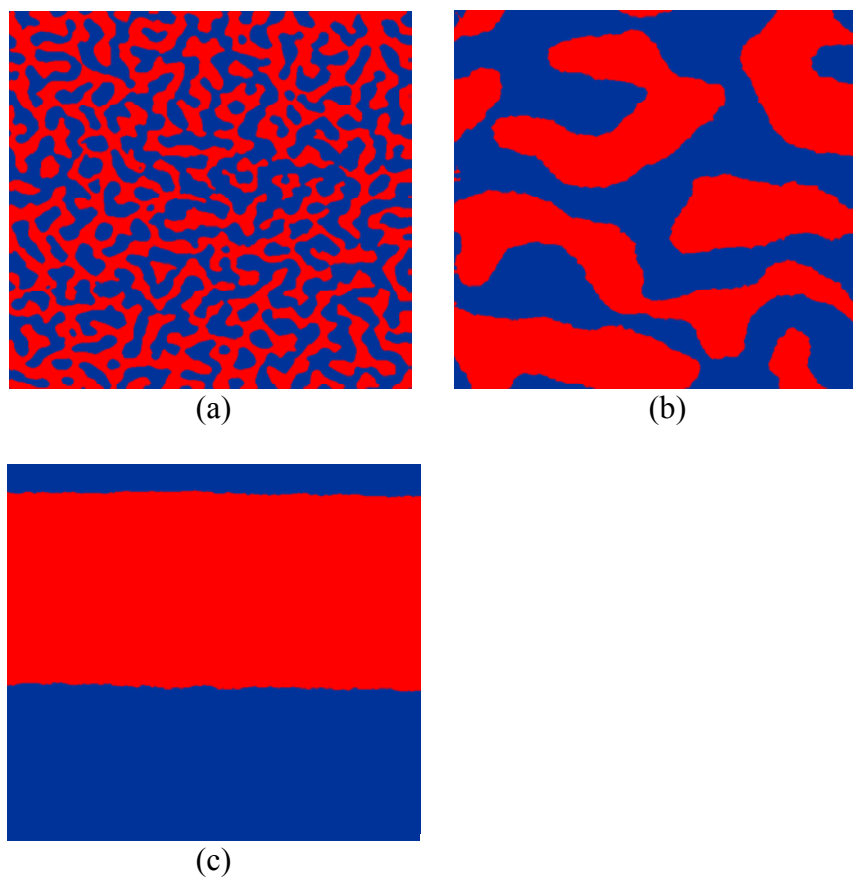


Figura 4.2.1 – Separação de fases simulada com o modelo proposto por Chen et al. Em (a), (b) e (c) são mostradas etapas da simulação do modelo, correspondendo a 200, 3300 e 45000 passos de tempo, respectivamente (Chen et al., 1991).

O modelo proposto por Chen et al. também se comporta de acordo com a Lei de Young-Laplace, conforme pode ser verificado na figura abaixo.

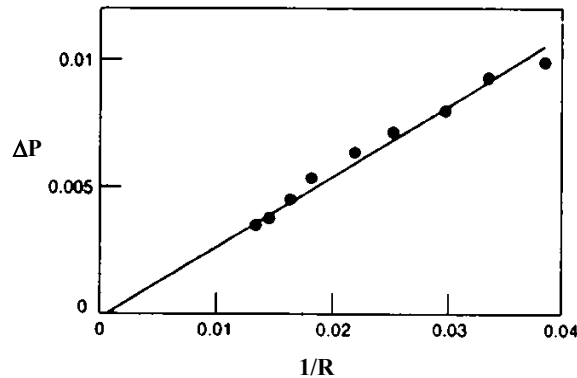


Figura 4.2.2 – Verificação da lei de Young-Laplace para o modelo de Chen et al. (Chen et al., 1991).

4.3. Modelo Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) de Santos (2000)

Nesta seção, descreveremos o modelo de gás em rede booleano com *mediadores de campo* introduzido por Santos (2000) para simulação de escoamentos bifásicos. Do ponto de vista conceitual, o modelo MLGA apresenta inovações importantes na simulação de escoamentos bifásicos imiscíveis ou miscíveis utilizando modelos de gás em rede, pois utiliza o conceito de *mediadores*, como sendo “partículas” responsáveis pelo transporte das informações de campo relacionadas à distribuição de fases distintas na rede. Dessa forma, os mediadores atuam como “partículas” (sem massa) que conduzem a informação de concentração de determinadas fases em regiões do domínio, de modo que tais informações possam estar disponíveis localmente sem a necessidade de consulta aos sítios vizinhos.

Na caracterização dos estados dos sítios são necessários um conjunto de quatro variáveis booleanas: $r_i(\mathbf{X}, T)$ e $b_i(\mathbf{X}, T)$ que indicam a presença ou ausência de partículas

vermelhas e azuis, respectivamente, e $m_i^r(\mathbf{X}, T)$ e $m_i^b(\mathbf{X}, T)$ que indicam a presença ou ausência de mediadores vermelhos ou azuis, respectivamente. As variáveis booleanas r_i e b_i podem assumir os valores zero ou um, independentemente umas das outras, sendo possível haver simultaneamente partículas de cores diferentes na mesma direção e no mesmo sítio.

A dinâmica microscópica do modelo pode ser descrita como se segue:

(i) *Colisão entre partículas de mesma cor:* As colisões são realizadas independentemente para partículas azuis e vermelhas, sendo utilizadas as mesmas regras de colisão dos modelos monofásicos. Chamando de r_i' e b_i' os estados resultantes deste processo, obtêm-se

$$\begin{aligned} r_i'(\mathbf{X}, T) &= r_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i [\mathbf{r}(\mathbf{X}, T)] \\ b_i'(\mathbf{X}, T) &= b_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i [\mathbf{b}(\mathbf{X}, T)] \end{aligned} \quad (4.9)$$

(ii) *Colisão entre partículas de cores distintas:* Nesta etapa partículas azuis e vermelhas trocam de velocidade, conservando o número de partículas de cada cor e a quantidade de movimento total do sítio. Esse processo de “mistura de cores” é de extrema importância no deslocamento de fluidos em estruturas porosas, pois determina a evolução (ou reação) da interface perante diferentes geometrias impostas. Uma maneira eficiente de realizar esta etapa, é fazer a troca entre partículas azuis e vermelhas sem alterar a soma total $r_i' + b_i'$ em cada direção, o que conserva a quantidade de movimento total do sítio. Um exemplo desta etapa é apresentado na figura 4.3.1.

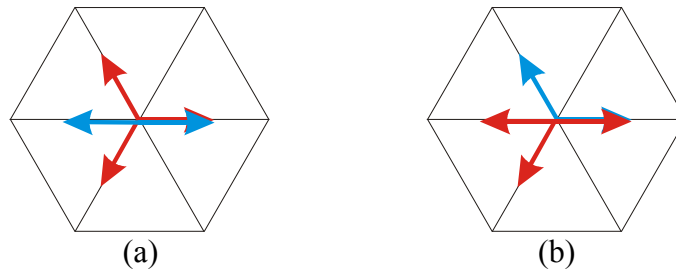


Figura 4.3.1 – Processo de colisão entre partículas distintas no modelo MLGA. Em (a) é mostrado o estado do sítio anterior à colisão e em (b) o estado do sítio posterior a colisão. Note que é conservado o número de partículas de cada cor e a quantidade de movimento total.

(iii) *Etapa de interferência dos mediadores*: Esta etapa é responsável pela separação entre as partículas de cores diferentes. Os mediadores não interferem entre si e atuam somente em partículas da mesma cor, assim os mediadores vermelhos agem somente em partículas vermelhas, e mediadores azuis agem somente em partículas azuis. Nessa etapa, quando um mediador encontra uma partícula de mesma cor na direção i , este interage (caso não haja nenhuma partícula de mesma cor em $-i$) com a mesma mudando a direção de sua velocidade para a direção $-i$. Esse processo reflete a interação de uma partícula portadora de força com uma partícula portadora de matéria, o que faz com que fases distintas se separem e fases idênticas se aproximem formando fases contínuas. Na figura 4.3.2 é apresentado um exemplo do processo de interferência entre os mediadores e as partículas.

Chamando de \mathbf{r}_i'' e \mathbf{b}_i'' os estados após a interferência, pode-se escrever

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_i''(\mathbf{X}, T) &= \mathbf{r}_i'(\mathbf{X}, T) + \xi_i(\mathbf{r}', \mathbf{m}^f) \\ \mathbf{b}_i''(\mathbf{X}, T) &= \mathbf{b}_i'(\mathbf{X}, T) + \xi_i(\mathbf{b}', \mathbf{m}^b)\end{aligned}\tag{4.10}$$

onde a interferência dos mediadores é representada pelo operador ξ_i , que pode ser escrito como

$$\xi_i(\mathbf{m}^r, \mathbf{r}) = m_{-i}^r(1 - m_i^r)(1 - r_i)r_{-i} - m_i^r(1 - m_{-i}^r)(1 - r_{-i})r_i. \quad (4.11)$$

Nesta etapa a quantidade de movimento local não é conservada, isso é devido ao efeito da interação entre partículas e mediadores. Em Santos (2000) são mostradas simulações que demonstram que o modelo conserva a quantidade de movimento total média. Para isso, é necessário que se tenham redes suficientemente grandes e/ou que sejam realizadas médias temporais (Santos, 2000).

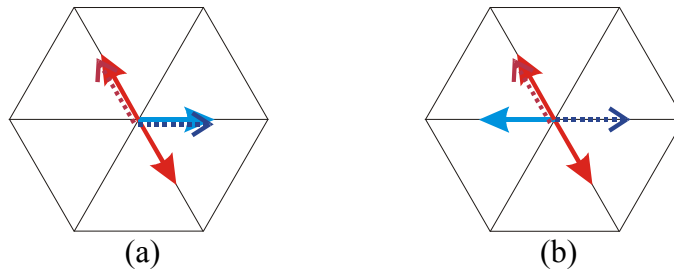


Figura 4.3.2 – Processo de interferência entre os mediadores e as partículas no modelo MLGA. Os mediadores são representados como setas pontilhadas. Em (a), é mostrado o estado do sítio anterior à interferência dos mediadores e em (b), o estado do sítio posterior à interferência dos mediadores. Note que, o sentido da velocidade da partícula na direção i só é invertido, se não existir nenhuma partícula da mesma cor na direção $-i$.

(iv) *Etapa de emissão e aniquilação de mediadores*: A emissão de mediadores é sempre realizada quando o número de partículas de uma cor for maior que o número de partículas de outra cor naquele sítio. Em argumentos matemáticos, têm-se

$$\sum_i r_i(\mathbf{X}, T) > \sum_i b_i(\mathbf{X}, T) \Rightarrow m_i^r(\mathbf{X}, T) = 1 \quad (4.12)$$

$$\sum_i r_i(\mathbf{X}, T) < \sum_i b_i(\mathbf{X}, T) \Rightarrow m_i^b(\mathbf{X}, T) = 1.$$

A fim de controlar a *distância de interação* entre as partículas – distância máxima em que uma partícula “sente” a presença de outra partícula de mesma cor –, introduz-se o parâmetro de probabilidade de aniquilação P_{aniq} , o qual determina o instante da aniquilação dos mediadores de uma determinada cor. Em geral, utiliza-se a probabilidade de 50% de aniquilação, fazendo com que a distância de interação seja ~ 2 unidades de rede. Mas ainda existe uma segunda condição de aniquilação, que permite a aniquilação dos mediadores se somente não existirem partículas da mesma cor do mediador naquele sítio. Essa segunda condição faz com que a distância de interação aumente para ~ 4 unidades de rede (como observado a partir de simulações). O conceito de distância de interação entre partículas também é válido para a distância de interação entre partículas e paredes sólidas.

(v) *Etapa de propagação*: Nessa etapa, tanto as partículas como os mediadores são propagados para os sítios vizinhos da mesma forma como nos modelos monofásicos, já citados anteriormente. Assim, para as partículas

$$\begin{aligned} r_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= r_i''(\mathbf{X}, T) \\ b_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= b_i''(\mathbf{X}, T) \end{aligned} \tag{4.13}$$

e para os mediadores

$$\begin{aligned} m_i^r(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= m_i^r(\mathbf{X}, T) \\ m_i^b(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= m_i^b(\mathbf{X}, T). \end{aligned} \tag{4.14}$$

Após as cinco etapas descritas acima, completa-se um passo de tempo na atualização do modelo. Em Santos (2000) são mostrados alguns resultados obtidos utilizando o modelo

MLGA. Assim como nos outros modelos descritos para escoamento imiscível, são mostradas simulações de separação de fases (ver figura 4.3.4) e validação da equação de Young-Laplace.

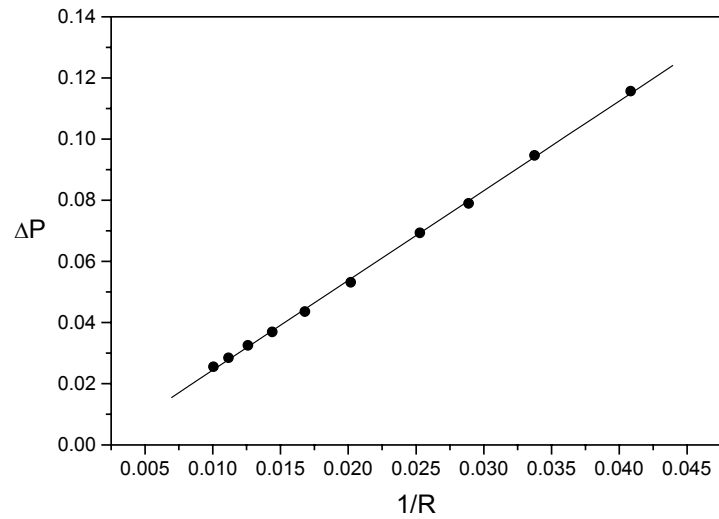


Figura 4.3.3 – Verificação da lei de Young-Laplace para o modelo MLGA (Santos, 2000).

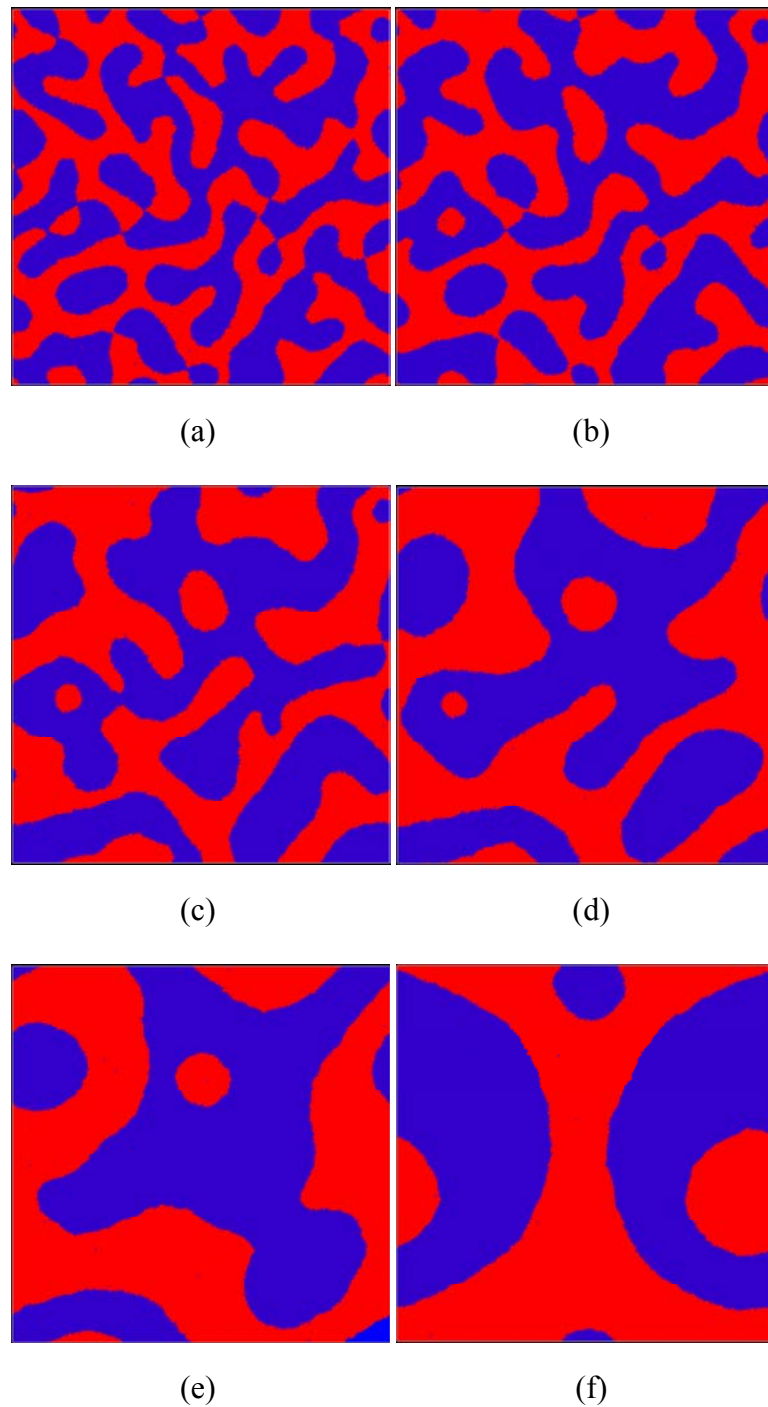


Figura 4.3.4 – Separação de fases obtida utilizando o modelo MLGA. Em (a), (b), (c), (d), (e) e (f) são mostradas etapas da simulação, correspondendo a 800, 1200, 2000, 8000, 20000 e 40000 passos de tempo, respectivamente (Santos, 2000).

A utilização do modelo MLGA no presente trabalho, é devido as suas vantagens em relação aos outros modelos para escoamentos bifásicos já citados. Entre essas vantagens, está o fato do modelo MLGA ser um modelo local, assim como no modelo proposto por Chen et al. (1991). Isto torna o modelo adequado para uso de computação paralela, pois evita a etapa de consulta aos sítios vizinhos, o que torna a simulação mais rápida (Santos, 2000). Outra característica importante é a ausência da etapa de maximização, fazendo com que as simulações sejam mais rápidas, principalmente para os modelos 3D. Além disso, a separação das colisões nas etapas de colisão entre partículas de mesma cor e colisão entre partículas de cores distintas permite que se altere separadamente a difusividade e as viscosidades de cada fluido. Outro fator importante é introdução da probabilidade de aniquilação P_{aniq} , que permite o controle da distância de interação dos fluidos e da tensão interfacial. No modelo de mediadores, também se tem a facilidade de se estender o modelo para a simulação de escoamentos multifásicos com três ou mais fases distintas.

Como pode ser observado nos resultados encontrados na literatura e descritos acima, modelos de gás em rede imiscíveis têm reproduzido com uma certa confiabilidade e simplicidade fenômenos como separação de fases e tensão interfacial, que em geral, estão cercados de grande complexidade de entendimento e modelagem computacional.

CAPÍTULO 5

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção, serão mostrados os resultados obtidos utilizando o modelo MLGA (Santos, 2000; Santos & Philippi, 2002) em uma rede FCHC ($c_s = \sqrt{2}/2$) projetada em 2D. Como o objetivo principal é verificar a validade do modelo perante diferentes estruturas porosas e condições de contorno, foram utilizadas diversas formas de geometrias, desde mais simples, como capilares e cavidades, até meios porosos idealizados formados por círculos de mesmo raio aleatoriamente arranjados. Entre as simulações realizadas encontram-se: verificação da lei de Young-Laplace para capilares, dinâmica de molhamento em superfícies sólidas, ascensão capilar com influência da gravidade, invasão em constrições, resistência capilar encontrada na junção entre uma constrição e um poro, processos de drenagem e embebição em diferentes tipos de poros e em meios porosos idealizados, como já descritos. Além disso, introduz-se uma maneira diferenciada de simular *diferentes viscosidades* para a mesma densidade média utilizando os modelos de gás em rede booleanos. Alguns desses resultados foram comparados com resultados teóricos e experimentais presentes na literatura. Todas as simulações foram realizadas em microcomputadores com processadores Intel Pentium III de 1 GHz e 1 Gb de memória RAM. As simulações foram conduzidas utilizando a distância de interação (ver seção 4.3) de ~ 4 unidades de rede.

5.1. Verificação da Lei de Young-Laplace

Com o objetivo de verificar se o modelo MLGA se comporta de acordo com a lei de Young-Laplace, foram realizadas diversas simulações computacionais. As simulações tiveram

como base, o processo de invasão de um capilar 2D sob ação somente de forças capilares, sem qualquer outra força de campo atuante.

O procedimento adotado consistiu da simulação da invasão de um capilar que separa duas câmaras contendo dois fluidos diferentes. O fluido vermelho, dito molhante, está inicialmente ocupando a câmara esquerda, enquanto o fluido azul, dito não-molhante, ocupa o capilar e a câmara direita.

Como já citado, o objetivo principal é verificar a linearidade da equação de Young-Laplace para o modelo MLGA. Além disso, pretende-se obter uma estimativa da tensão interfacial para o caso em questão, a partir da medida da diferença de pressão ΔP para cada raio R de capilar simulado.

A diferença de pressão ΔP requerida é aquela cuja interface encontra-se aproximadamente em repouso para um dado raio R . Assim, as simulações foram realizadas mantendo-se a pressão na fase vermelha constante, de modo que esta “empurre” o máximo possível a fase azul através do capilar, fazendo com que a fase azul seja comprimida. Após atingida a configuração de equilíbrio, tem-se a diferença de pressão na interface e conseqüentemente a pressão capilar necessária para manter o fluido vermelho fora do capilar.

Os resultados obtidos (todos em unidades de rede) para diferentes raios são mostrados na figura 5.1.1.

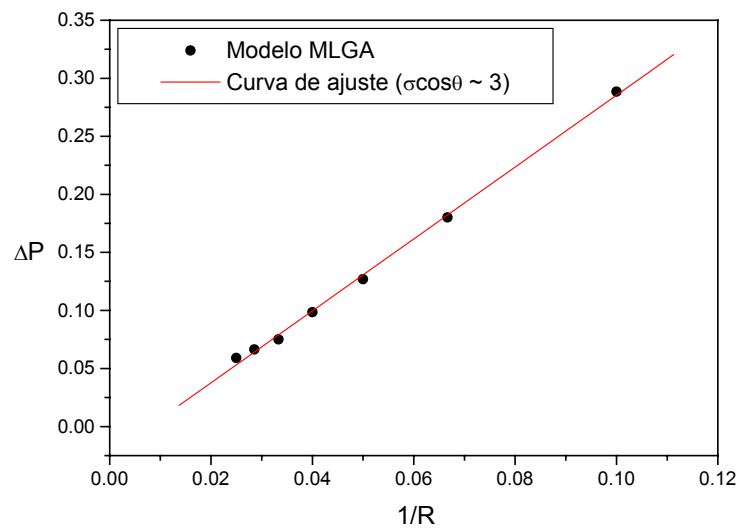


Figura 5.1.1 – Curva $\Delta P \times 1/R$ obtida através do modelo MLGA. Os círculos representam os pontos obtidos nas simulações com média temporal de 30000 passos. A linha contínua é a curva de ajuste. A tensão interfacial σ estimada é de ~ 3.5 (unidades de rede), visto que o ângulo de contato medido é $\sim 30^\circ$.

Como pode ser observado na figura 5.1.1, o modelo utilizado recupera a linearidade da equação de Young-Laplace, mostrando que o modelo MLGA pode oferecer bons resultados na simulação de fenômenos de interface, assim como na simulação de processos de deslocamento imiscível, como embebição e drenagem.

Um fator importante observado foi a dimensão das câmaras que continham as fases vermelha e azul. Quando as câmaras apresentavam um tamanho inferior a um certo limite (Largura $\sim 10R/3$ e Altura $\sim 7R$), a diferença de pressão ΔP na interface oscilava demasiadamente, fazendo com que os pontos simulados na curva $\Delta P \times 1/R$ não se ajustassem adequadamente à curva ajustada. Além disso, pode-se observar que os pontos obtidos para os raios maiores não se ajustavam satisfatoriamente à curva de ajuste. Esse fato é devido à dificuldade de medir a diferença de pressão junto à interface, em virtude das oscilações presentes na mesma. Tais oscilações são provenientes do ruído característico dos modelos de

gás em rede, os quais tendem a fazer com que a interface oscile em regiões distantes das paredes sólidas.

Durante as simulações foi observado que para canais capilares com raios inferiores a 10 unidades de rede, o valor do produto $\sigma \cos\theta$ aumentava bruscamente, sugerindo, em princípio, que a tensão interfacial não se mantinha constante nessas dimensões. Esse fato era esperado, pois quando o raio é demasiadamente pequeno as interações entre as partículas da fase molhante e as paredes tornam-se muito intensas, de modo que o livre caminho médio das partículas é da mesma ordem do comprimento característico da rede. Nesse nível de discretização, a equação de Young-Laplace perde sua validade, pois não há mais sentido em se falar em “interface”, mas sim, em um sistema de partículas com propriedades de interação diferentes.

5.2. Dinâmica de Molhamento

Inicialmente, o modelo MLGA simulava o efeito de molhabilidade, atribuindo uma probabilidade de reflexão pelas paredes sólidas para aqueles mediadores emitidos nas regiões de interface. Desse modo, aqueles mediadores que conseguiam alcançar as paredes eram refletidos e atraíam uma das fases na direção daquelas paredes, o que fazia com que a fase da mesma cor desses mediadores fosse molhante. O problema é que esse procedimento globalmente era fraco, o que impedia a simulação de elevadas molhabilidades. A fim de melhorar esse efeito, foi introduzida neste trabalho, uma modificação no modelo MLGA em relação à molhabilidade. Em vez de refletir os mediadores de uma determinada cor, emite-se os mediadores pela parede. Assim, pode-se controlar a probabilidade de emissão dos mediadores pelas paredes sólidas de cada fase de acordo com a molhabilidade desejada. Portanto, quanto maior a probabilidade de emissão de mediadores de uma determinada fase,

maior será sua molhabilidade. O efeito resultante desse procedimento permitiu simular fluidos fortemente molhantes.

É interessante notar que as paredes emitem mediadores de ambas as fases, mas dependendo do caso, as probabilidades são diferentes. Somente no caso extremo de 100% de emissão de mediadores de uma dada cor, não há emissão de mediadores da outra cor.

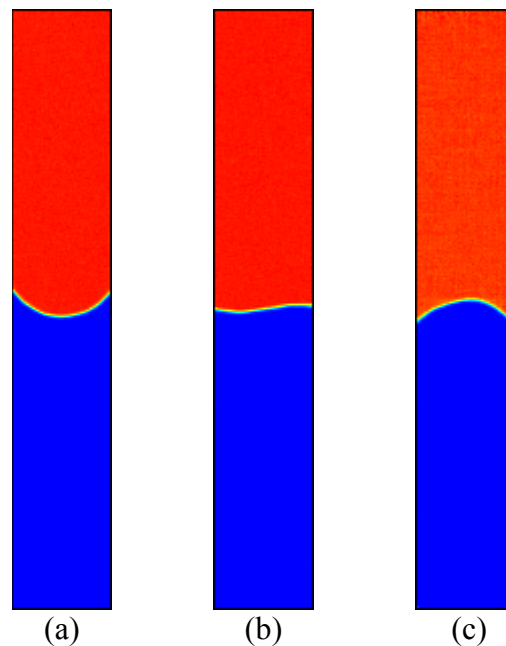


Figura 5.2.1 - Simulação de diferentes configurações de molhabilidade utilizando o modelo MLGA em uma rede 50x300. Em (a), a fase azul é molhante, em (b), a parede não tem preferência por nenhuma das fases e em (c), a fase azul é não-molhante. Cada campo de densidades foi obtido com média temporal de 500 passos. O molhamento se dá apenas pela condição de emissão dos mediadores pelas paredes do capilar.

A figura 5.2.1 mostra o efeito da emissão de mediadores de cada fase pelas paredes de um capilar 2D. Quando a probabilidade de emissão é de 90% para a fase azul e 10% para a fase vermelha, a fase azul molha o capilar, (a); para a probabilidade de 50% para ambas as fases, uma interface plana é obtida, (b); e para a probabilidade de 10% para a fase azul e 90% para a fase vermelha, a fase azul é não-molhante, (c).

De acordo com De Coninck et al. (2000), diversas medidas têm sido realizadas para observar a dinâmica de molhamento de fluidos em substratos sólidos. Tais medidas, conduzidas com diferentes fluidos e substratos, têm mostrado que o deslocamento $X(T)$ da camada de fluido mais próxima da parede sólida se dá de acordo com lei de Tanner (1979), dada por

$$X(T) \sim T^{\frac{1}{10}} \quad (5.1)$$

para situações tridimensionais, e

$$X(T) \sim T^{\frac{1}{7}} \quad (5.2)$$

para situações bidimensionais, onde T é o tempo.

Com o objetivo de verificar a proporcionalidade dada na equação 5.2 para o modelo em questão, simula-se a dinâmica de molhamento em superfícies sólidas. Como condição inicial, uma gota de uma fase molhante (azul) é colocada em contato com uma superfície sólida idealmente plana.

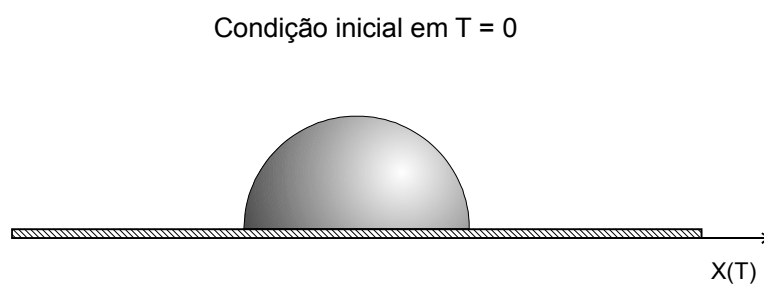


Figura 5.2.2 – Condição inicial para a uma gota líquida molhante sobre uma superfície sólida plana.

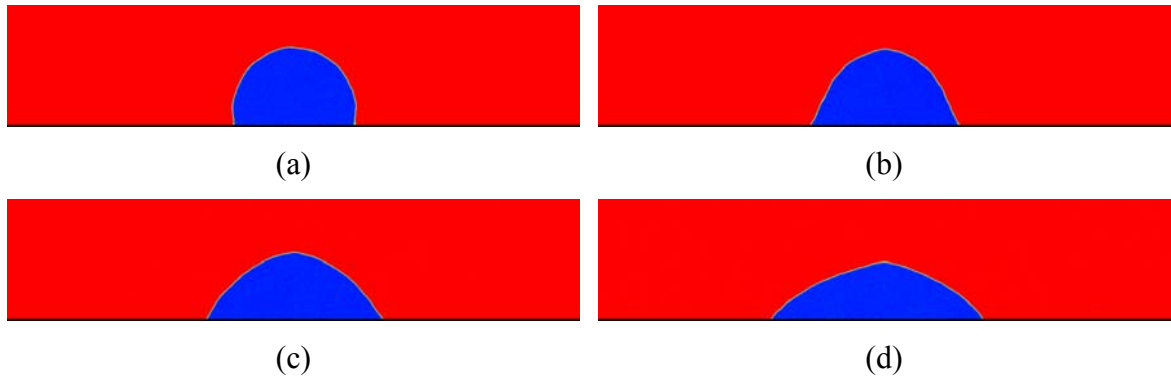
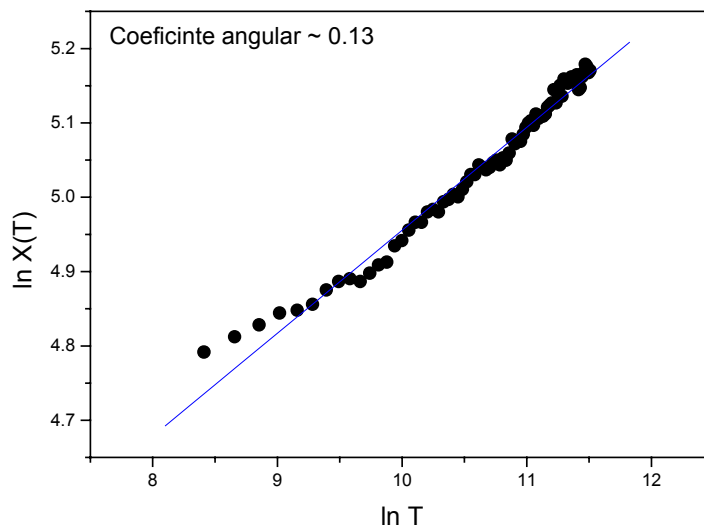
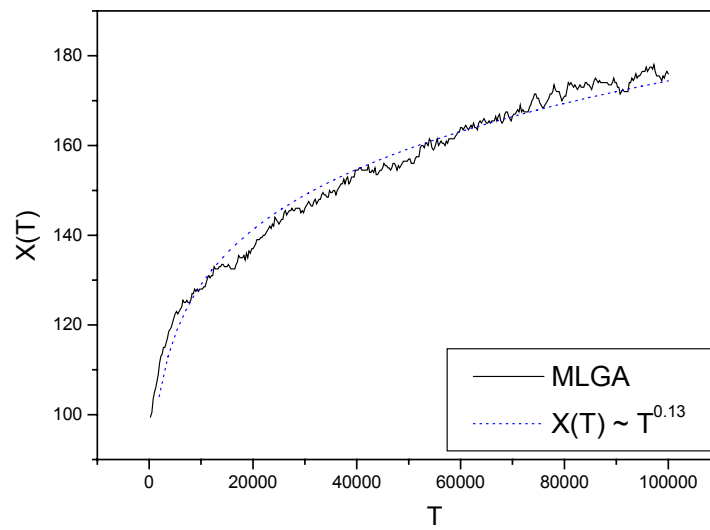


Figura 5.2.3 – Evolução dinâmica do molhamento simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 950x200. As imagens (a), (b), (c) e (d) correspondem a 500, 6000, 28000 e 93000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 500 passos. O tempo total de simulação foi ~ 60 horas.



(a)



(b)

Figura 5.2.4 – Resultados obtidos para o deslocamento $X(T)$ da camada de fluido molhante mais próxima à superfície sólida. Em (a) é mostrado o comportamento de $X(T)$ em um gráfico log-log e a correspondente curva de ajuste. Em (b) tem-se o deslocamento $X(T)$ simulado e sua curva de ajuste na forma $X(T) \sim T^{0.13}$.

Devido à probabilidade de emissão de mediadores azuis pela parede ser 90%, a parede exerce uma força de atração sobre as partículas azuis, fazendo com que estas se espalhem ao longo da superfície, como mostrado na figura 5.2.3. Nenhuma força externa, como a gravidade, é utilizada.

Os resultados obtidos para o deslocamento $X(T)$ são mostrados nas figuras 5.2.3 e 5.2.4. Como pode ser observado, o modelo utilizado recupera o comportamento de $X(T)$ com a potência 0.13 com o tempo, mostrando uma boa concordância com a lei de Tanner (1979).

Como pode ser observado na fig. 5.2.4 (a), inicialmente os pontos simulados oscilam em torno do comportamento linear esperado. Esse fato se deve à imposição não-física de iguais densidades para ambas as fases, quando se estabelece a condição inicial no processo de simulação. Inicialmente as densidades médias em ambas as fases são iguais, de forma que a

tensão interfacial é nula. Durante a evolução da simulação, a tensão interfacial deixa de ser nula e começa a comprimir a fase azul gerando uma diferença de pressão (ou densidade) entre as fases. Como esse efeito não é instantâneo, a curva da dinâmica de molhamento é influenciada. Observa-se então, que a medida que as pressões interna e externa se equilibram o comportamento de $\ln X(T)$ torna-se linear, de acordo com o que é esperado.

5.3. Curva de Viscosidade para Densidade Constante

Nesse trabalho, introduz-se uma maneira diferenciada de simular diferentes viscosidades para uma mesma densidade média de partículas. A viscosidade cinemática depende fortemente das regras de colisão impostas. Essa dependência se dá em termos do tempo necessário para a obtenção da configuração de equilíbrio local para as partículas em um determinado sítio. Antes da configuração de equilíbrio local ser atingida, o sítio passa por inúmeros estados que podem se repetir dependendo da variedade de estados disponíveis – a qual varia com a rede utilizada, o número de partículas ρ e a quantidade de movimento $\rho\mathbf{u}$. Dessa forma, se em um processo de colisão, um sítio evolui de um estado de entrada \mathbf{s} para um estado de saída $\mathbf{s}' = \mathbf{s}$ com muita frequência, a viscosidade apresenta um determinado valor, mas se for inserida a condição de um estado de saída \mathbf{s}' sempre diferente do estado de entrada \mathbf{s} , a viscosidade apresenta um outro valor, o qual é menor que o anterior. Esse comportamento pode ser explicado, argumentando-se que no caso da viscosidade menor, os estados dos sítios evoluem mais rapidamente para o equilíbrio, pois esses estados sempre evoluíram para estados diferentes, fazendo com que a configuração de equilíbrio local seja atingida mais rapidamente.

Pode-se então, tirar proveito dessa situação e simular sistemas físicos mais próximos dos reais (com maiores diferenças de viscosidade), como o gotejamento de gotas de água e o

gotejamento de gotas de óleo, os quais apresentam uma grande diferença no tempo de obtenção da configuração de equilíbrio global (e local) em virtude da diferença de viscosidade entre esses fluidos.

Assim, sendo a viscosidade uma quantidade macroscópica dependente da maneira com que se dá a evolução microscópica dos sítios, entre os estados de entrada s e os estados de saída s' , pode-se modificá-la com a alteração das regras de colisão do modelo de gás em rede com a introdução de uma probabilidade de evolução P_e que controlará a evolução entre s e s' .

Dessa forma, a probabilidade de evolução P_e de um estado de entrada s para um estado de saída *diferente* s' foi modificada, buscando-se o observar o comportamento da viscosidade mediante diferentes probabilidades.

Com o intuito de verificar o intervalo de viscosidades que pode ser simulado para uma dada densidade média de partículas (no caso, 10 partículas por sítio), foram simuladas diferentes probabilidades de evolução P_e . No cálculo das viscosidades foram utilizadas placas paralelas com as dimensões de 200x40x20 unidades de rede. Para obtenção da viscosidade cinemática, assume-se um perfil de velocidades parabólico ou de Poiseuille. Com essa suposição, sabemos que a permeabilidade k entre placas paralelas é dada por $L^2/12$, onde L é a distância entre as placas. Tal informação pode ser utilizada na equação de Darcy escrita adequadamente para modelos de gás em rede em função da permeabilidade k :

$$k = \frac{\phi v h_x^2 \sum_x \sum_i N_i \mathbf{c}_{iz}}{\sum_x g(\mathbf{x})} \quad (5.3)$$

onde ϕ , v , h e $g(\mathbf{x})$ são a porosidade, a viscosidade cinemática, o fator de escala espacial e o momentum adicionado no sítio \mathbf{x} para cada passo de tempo, respectivamente. Assim, determina-se a viscosidade cinemática em função de outros parâmetros conhecidos. Os resultados obtidos são mostrados nas figuras 5.3.1 e 5.3.2.

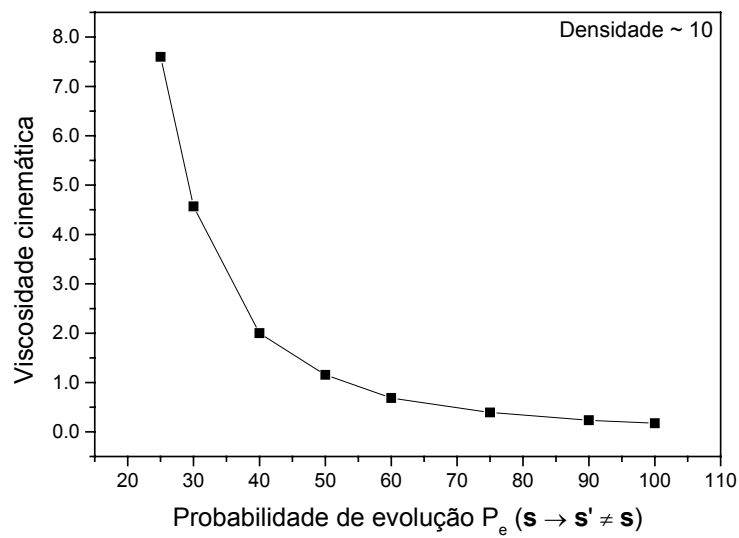


Figura 5.3.1 – Diferentes viscosidades simuladas para a mesma densidade média de 10 partículas. Cada ponto é obtido com média temporal de 150000 passos com a utilização de uma força aplicada $\sim 5 \times 10^{-4}$ (unidades de rede).

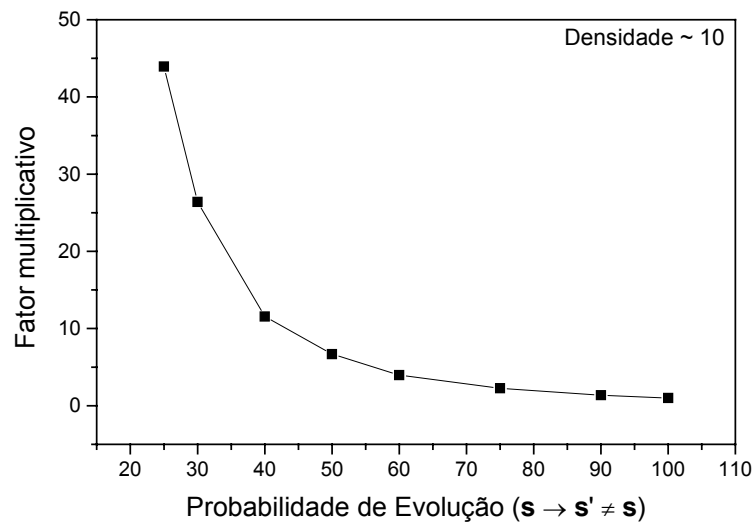


Figura 4.3.2 – Fator multiplicativo da viscosidade em função da probabilidade de evolução P_e para um estado de saída diferente. Note que, modificando as regras de colisão do modelo, pode-se simular viscosidades até 50 vezes maiores.

Como podemos verificar, os resultados obtidos demonstram que a partir da modificação das regras de colisão do modelo de gás em rede, foi possível obter diferentes viscosidades cinemáticas para a mesma densidade média de partículas.

Dessa forma, torna-se possível a simulação de escoamentos multifásicos com fluidos de viscosidades diferentes utilizando modelos de gás em rede booleanos, ou seja, torna-se possível o controle da razão de mobilidade M , definida na seção 2.4.

5.4. Ascensão Capilar Influenciada pela Gravidade

Nessa seção, simula-se o processo de invasão capilar influenciado pela gravidade. O sistema físico escolhido é composto pelas fases água e ar, onde a água é a fase invasora (molhante) e o ar a fase deslocada (não-molhante). Sendo o ar um fluido de baixa viscosidade, este apresenta baixa resistência viscosa no deslocamento. Esse comportamento relativo à fase deslocada, deve ser recuperado nas simulações. Pode-se utilizar uma tabela de colisão modificada, como descrito na seção anterior, obtendo uma razão de viscosidades adequada para o sistema água-ar, mas $\mu_w/\mu_a \sim 70$, e para esses valores as probabilidades de evolução P_e são muito baixas, o que faz o sistema evoluir mais lentamente, e conseqüentemente, a simulação torna-se mais demorada. A fim de superar essa dificuldade, adota-se o procedimento de simular ambas as fases com a mesma viscosidade dinâmica de ~ 1.73 (unidades de rede), mas com o regime de escoamento dado pelo número capilar $Ca \sim 10^{-3}$. Nesse regime, as forças capilares são completamente dominantes sobre as forças viscosas, de modo que a resistência viscosa encontrada na fase deslocada é desprezível em relação à força capilar motora do escoamento.

O procedimento adotado consistiu da simulação da invasão de um capilar que separa duas câmaras contendo dois fluidos diferentes, estando presentes tanto forças capilares quanto

forças gravitacionais. O fluido vermelho, sendo molhante, está inicialmente ocupando a câmara inferior, enquanto o fluido azul, sendo não-molhante, ocupa o capilar e a câmara superior. A fim de imitar a força da gravidade, utiliza-se a condição de gravidade descrita na seção 3.4, com força aplicada de $\sim 10^{-4}$ (quantidade de movimento adicionada por sítio por passo de tempo). Além disso, para assegurar que simula-se a mesma dinâmica do sistema físico, consideramos o mesmo regime de escoamento em relação à ponderação entre forças gravitacionais e forças capilares, dada pelo número de Bond B , $B = \Delta\rho g R^2 / \sigma$, onde $\Delta\rho$, σ , g e R são a diferença de densidade, a tensão interfacial, a aceleração da gravidade e o raio do capilar. No caso em questão, utiliza-se $B \sim 0.06$.

Como o objetivo principal foi verificar a dinâmica da ascensão capilar em função do tempo, a interface entre as fases foi acompanhada até a obtenção aproximada do equilíbrio (após ~ 800000 passos de tempo), onde a interface se encontra aproximadamente em repouso em virtude do equilíbrio entre forças capilares e gravitacionais. Dessa forma, obtêm-se uma curva que corresponde à dinâmica da ascensão capilar $X(T)$, que pode ser comparada com o modelo teórico descrito na seção 2.3.1. Os resultados obtidos são mostrados nas figuras 5.4.1. e 5.4.2.

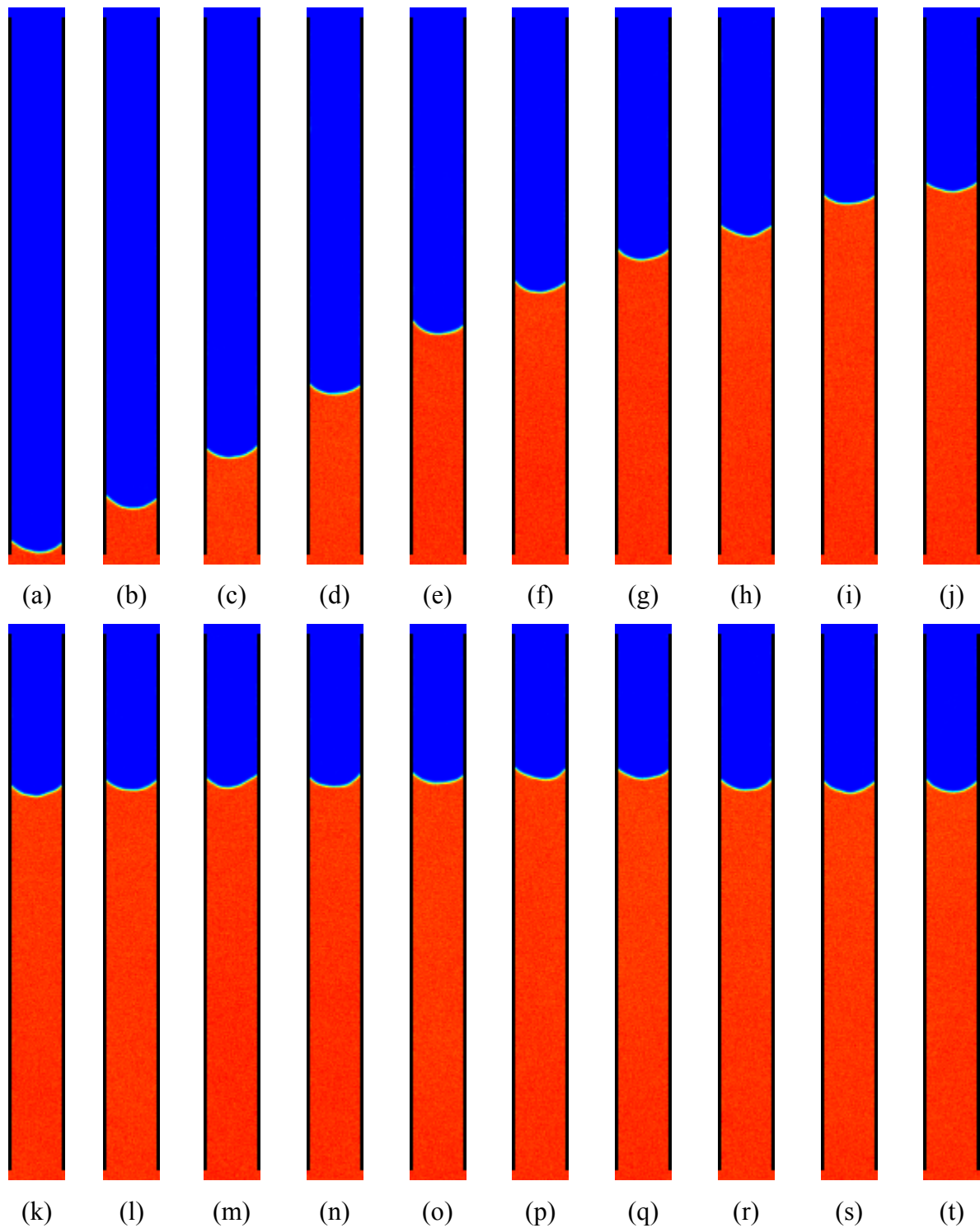


Figura 5.4.1 – Sequência da simulação da invasão de um capilar 2D com dimensão de 325x30 influenciada pela gravidade utilizando o modelo MLGA. As imagens de (a) a (t) correspondem aos passos de tempo de 1000 a 360000, respectivamente, e foram obtidas com média temporal de 200 passos. Note que a medida que as forças capilares se equilibram com as forças gravitacionais a interface tende a situação de equilíbrio.

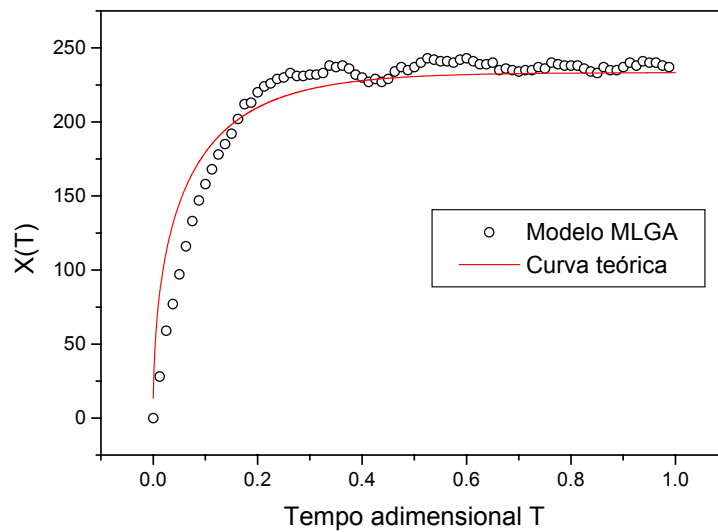


Figura 5.4.2 – Curva de ascensão capilar $X(T)$ obtida a partir do modelo MLGA. Os círculos correspondem aos pontos obtidos na simulação, enquanto a linha contínua corresponde a curva teórica obtida usando o modelo descrito na seção 2.3.1, considerando que as duas fases presentes são água e ar. A altura h de equilíbrio é ~ 237 unidades de rede. O tempo total de simulação foi ~ 80 horas.

Tabela 5.4.1- Parâmetros utilizados e resultados obtidos na simulação.

Parâmetros	R	$\Delta\rho$	σ	g	h	h/R
Simulação*	15	10	3.5	0.0001	237	16
Modelo teórico	0.0007 m	1000 kg/m ³	0.08 N/m	9.8 m/s ²	0.012 m	17

* Parâmetros expressos em unidades de rede

Como pode ser observado na tabela 5.4.1 e na figura 5.4.2, os resultados obtidos utilizando o modelo MLGA tem boa concordância com o resultado teórico esperado. A dinâmica observada é condizente com o que é esperado, pois a medida que a fase molhante invade o capilar, esta tem maior dificuldade de invadir, devido a coluna de fluido molhante aumentar com o tempo. Observando a figura 5.4.2, notamos que a curva $X(T)$ apresenta oscilações antes da interface alcançar o equilíbrio. Esse comportamento realmente existe no processo real, mas nesse caso está exagerado, devido às flutuações (ou ruídos) características

dos modelos de gás em rede. Deve ser notado que na obtenção da curva teórica foram consideradas algumas aproximações que provavelmente não são verdadeiras. Esse é o caso, da aproximação de $\cos \theta_d = \cos \theta$, o que não é verdade, pois o ângulo de contato dinâmico θ_d tende a ser maior que ângulo de contato estático θ . Além disso, foi assumido que a fase molhante “molha” completamente o capilar, ou seja, $\theta \sim 0^\circ$.

5.5. Invasão em Constrições

Uma vez que o modelo MLGA satisfaz a lei de Young-Laplace, pode-se simular processos de invasão em geometrias com constrições de diferentes diâmetros, a fim de observar a tendência da fase não-molhante escoar inicialmente pela maior constrição, pois esta apresenta menor resistência capilar.

Na simulação, utiliza-se a densidade média de 10 partículas por sítio em ambas as fases, mas como pretende-se simular um processo de drenagem, há a necessidade de aplicar um gradiente de pressão no domínio. Para isso, utiliza-se a condição de contorno de pressão descrita na seção 3.4, onde se aumenta a densidade da fase invasora não-molhante (vermelha), enquanto a pressão na fase molhante (azul) é mantida constante. O diferença de pressão aplicada foi ~ 0.5 (unidades de rede).

A figura 5.5.1 mostra a invasão da fase não-molhante em diferentes constrições ocupadas pela fase molhante. Como já citado, em virtude das pressões capilares serem maiores em menores constrições, a fase não-molhante invade inicialmente as maiores constrições, resultando no fenômeno de borbulhamento.

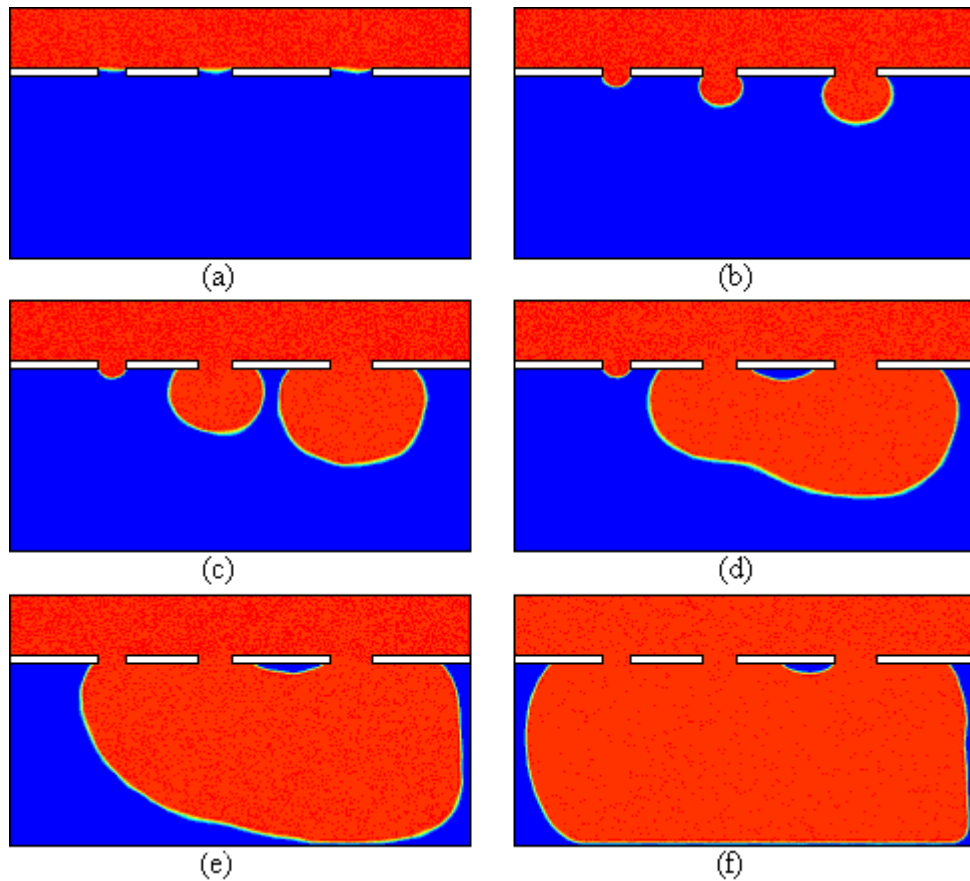


Figura 5.5.1 – Seqüência da simulação da formação de bolhas de um fluido não-molhante em um fluido molhante para uma rede com a dimensão 200x350. Todas as imagens foram obtidas com média temporal de 500 passos, sendo que (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 500, 6500, 11500, 15000, 21000 e 30000 passos de tempo, respectivamente. O tempo total de simulação foi ~ 2 horas.

Como podemos observar nos resultados obtidas na figura 5.5.1, o modelo utilizado fornece bons resultados em processo de invasão de constrições de diferente tamanhos. Esse é um indício que o modelo MLGA pode ser promissor na simulação de escoamentos imiscíveis em meios porosos, pois recupera um resultado simples previsto pela equação de Young-Laplace.

5.6. Resistência Capilar Encontrada na Junção Construção-Poro

Quando se pretende simular processos de invasão imiscível, como intrusão de mercúrio, assume-se que o processo como um todo é governado pelo tamanho das constrições e dos poros do meio poroso. Assim, em um processo de drenagem é assumido que o poro conectado posterior a uma constrição é invadido imediatamente após a constrição. Tsakiroglou & Payatakes (1988) mostraram que nem sempre essa situação ocorre. Esses autores realizaram experimentos com intrusão de mercúrio e observaram que configurações de equilíbrio podem ser obtidas, não somente na entrada de constrições estreitas, mas também na entrada de poros. Ou seja, a invasão pode cessar quando a fase invasora não-molhante inicia a invasão de um poro de maior dimensão. Esse fenômeno é causado pela abrupta expansão da interface na junção construção-poro.

Esse efeito, embora sutil, pode modificar as curvas de pressão capilar obtidas experimentalmente, levando a interpretações incorretas das propriedades de um determinado meio poroso. Assim, um modelo físico-matemático de escoamento imiscível deve levar esse fenômeno em consideração.

A fim de verificar se o modelo MLGA pode simular o fenômeno de resistência capilar, foram realizadas simulações de escoamento bifásico utilizando o modelo referido. Nas geometrias simuladas, de acordo com as definições acima, foram assumidos que o capilar é a constrição e a cavidade é o poro. As simulações foram realizadas utilizando uma junção capilar-cavidade esférica e uma junção capilar-cavidade quadrada. As simulações foram conduzidas utilizando uma pressão aplicada na fase não-molhante suficiente para a invasão completa do capilar, mas não suficiente para a invasão da cavidade esférica, obtendo assim uma configuração de equilíbrio na junção capilar-cavidade. Os resultados mostram que modelo utilizado reproduz o fenômeno de resistência capilar em ambos os casos. Alguns

passos da evolução do escoamento simulado para as junções citadas são mostrados nas figuras 5.6.1 e 5.6.2. O comportamento da pressão capilar medida em função do tempo é mostrado na figura 5.6.3. É interessante notar que nas simulações realizadas, as forças capilares são dominantes em relação às forças viscosas, pois $Ca \sim 10^{-4}$.

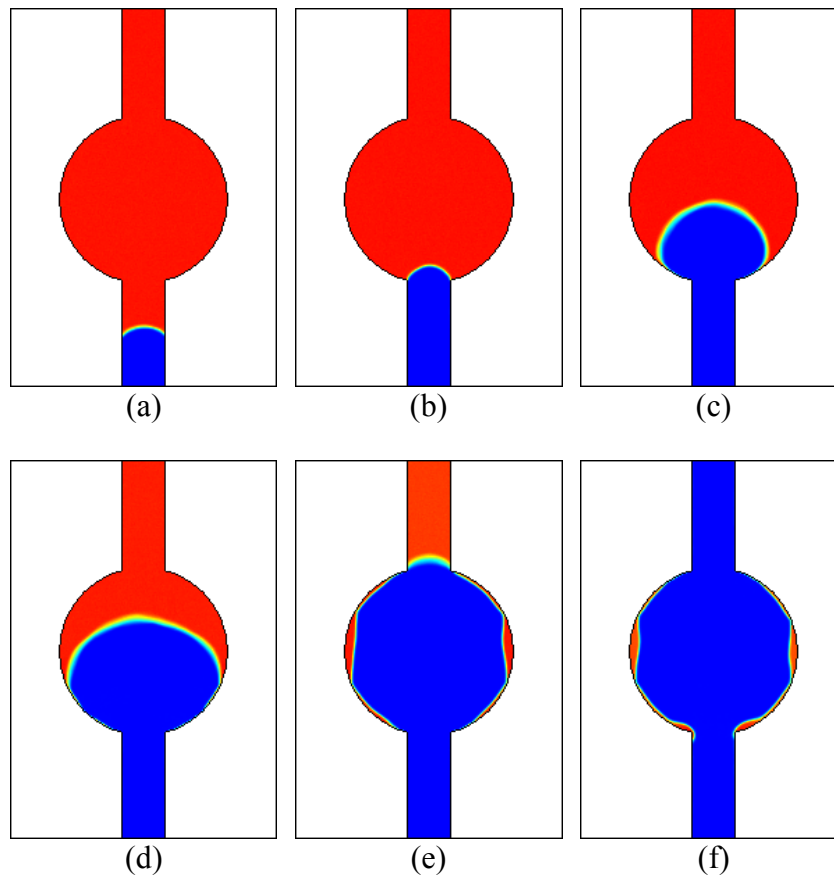


Figura 5.6.1 – Seqüência da simulação de um processo de drenagem em uma junção capilar-cavidade esférica em uma rede de 192×493 . As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 28000, 80000, 148000, 156000, 166000 e 204000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 2000 passos. A configuração de equilíbrio da interface é obtida em (b), sendo necessário aumentar a pressão aplicada na fase não-molhante para o sistema evoluir para as outras situações mostradas. O tempo total de simulação foi ~ 14 horas.

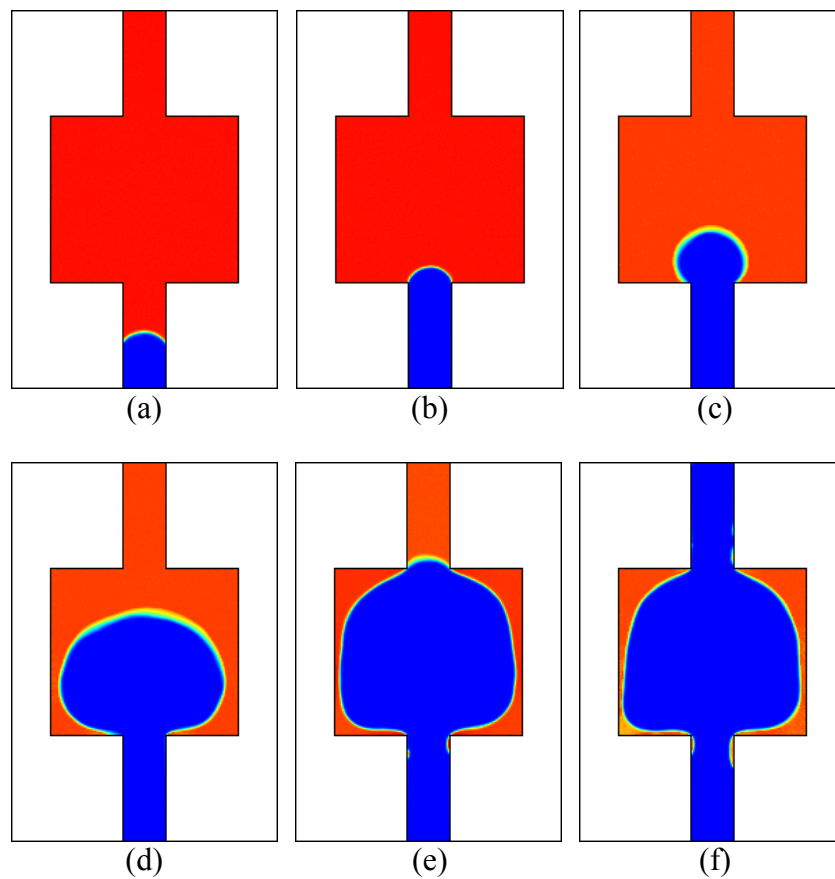


Figura 5.6.2 – Seqüência da simulação de um processo de drenagem em uma junção capilar-cavidade quadrada para uma rede de 192×493 . As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 36000, 116000, 270000, 286000, 296000 e 332000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 2000 passos. A configuração de equilíbrio da interface é obtida em (b), sendo necessário aumentar a pressão aplicada na fase não-molhante para o sistema evoluir para as outras situações mostradas. O tempo total de simulação foi ~ 14 horas.

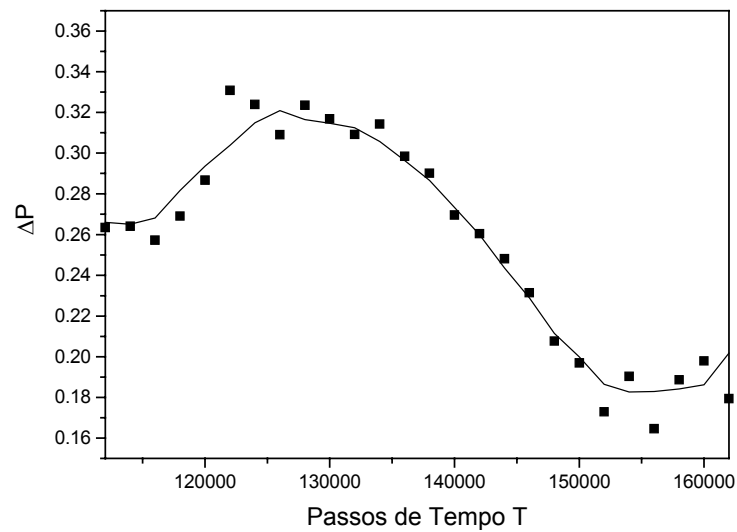


Figura 5.6.3 – Curva de pressão capilar medida em função do tempo para um processo de drenagem em uma junção capilar-cavidade esférica. Nessa situação, o equilíbrio é atingido na junção, sendo necessário uma variação de pressão de ~ 0.05 para que a cavidade seja invadida. Os símbolos representam os pontos obtidos na simulação e a curva contínua é a curva de tendência, obtida pela média dos vizinhos adjacentes.

Observando a curva de pressão capilar em função do tempo é possível verificar o aumento da pressão capilar junto à junção capilar-cavidade, em acordo com os resultados de Tsakiroglou & Payatakes (1988). Além disso, mostra-se que a interface realmente pode estagnar exatamente na junção capilar-cavidade. Na figura 5.6.3, observa-se que a máxima pressão capilar alcançada é ~ 0.3 (unidades de rede); essa é a pressão necessária para superar a resistência capilar encontrada na junção. Utilizando a análise teórica desenvolvida na seção 2.3.2, foi possível calcular teoricamente (para o caso 2D, onde $D_c = 134$ e $D_t = 30$) a máxima pressão capilar adimensional necessária para invadir a cavidade, o valor obtido é $P^*_{\text{Teórico}} = P_c/P_t \sim 1.2$, enquanto para o modelo MLGA, o valor medido é $P^*_{\text{LGA}} = P_c/P_t \sim 1.8$. Essa diferença pode ser decorrente de imprecisões na medida do ângulo de contato ($\theta \sim 45^\circ$) ou/e do fato da pressão aplicada na fase não-molhante ser superior a pressão necessária para a invasão da cavidade, visto que a mínima diferença de pressão que

pode ser imposta é ~ 0.05 . Uma outra fonte de imprecisões pode ser o próprio modelo teórico, que foi obtido para situações estáticas, enquanto que no modelo MLGA a invasão é um processo dinâmico, semelhante ao processo real.

Esses resultados mostram que o modelo MLGA foi capaz de reproduzir o fenômeno de resistência capilar em junções capilar-cavidade.

5.7. Invasão em Configurações Geométricas Representativas

Nessa seção, foram simulados processos de invasão em estruturas porosas simplificadas representativas daquelas encontradas em meios porosos reais. Essas geometrias foram escolhidas com o intuito de visualizar o comportamento do modelo utilizado mediante formas irregulares que muitas vezes podem gerar regiões aprisionadas de uma ou mais fases presentes no escoamento.

Os resultados obtidos foram comparados qualitativamente com resultados experimentais obtidos por Chatzis & Dullien (1983) mostrados nas figuras 5.7.1 e 5.7.2. Em todas as simulações, ambas as fases apresentam a mesma viscosidade e a mesma densidade média de partículas.

Inicialmente foi simulado um processo de drenagem em um poro formado por dois capilares de diâmetros diferentes. Como a fase não-molhante (azul) não invade espontaneamente o capilar de entrada, a condição de contorno de pressão descrita na seção 3.4 foi usada para criar um gradiente de pressão no domínio a fim de forçar a invasão. A diferença de pressão aplicada foi de ~ 0.5 (unidades de rede). Os resultados obtidos são mostrados na figura 5.7.3. Após o processo de drenagem, simulou-se um processo de embebição espontânea no mesmo poro. Os resultados obtidos são mostrados na figura 5.7.4.

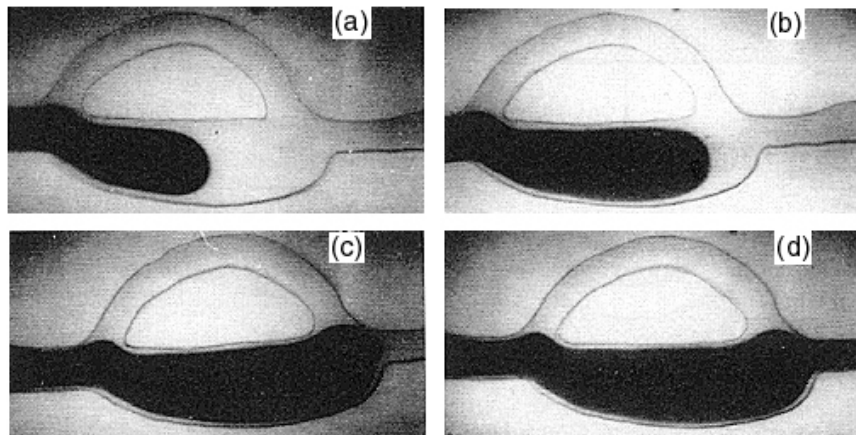


Figura 5.7.1 – Sequência de um processo de drenagem entre água e óleo obtido experimentalmente (Chatzis & Dullien, 1983). As imagens (a) e (d) correspondem aos estágios inicial e final, respectivamente.

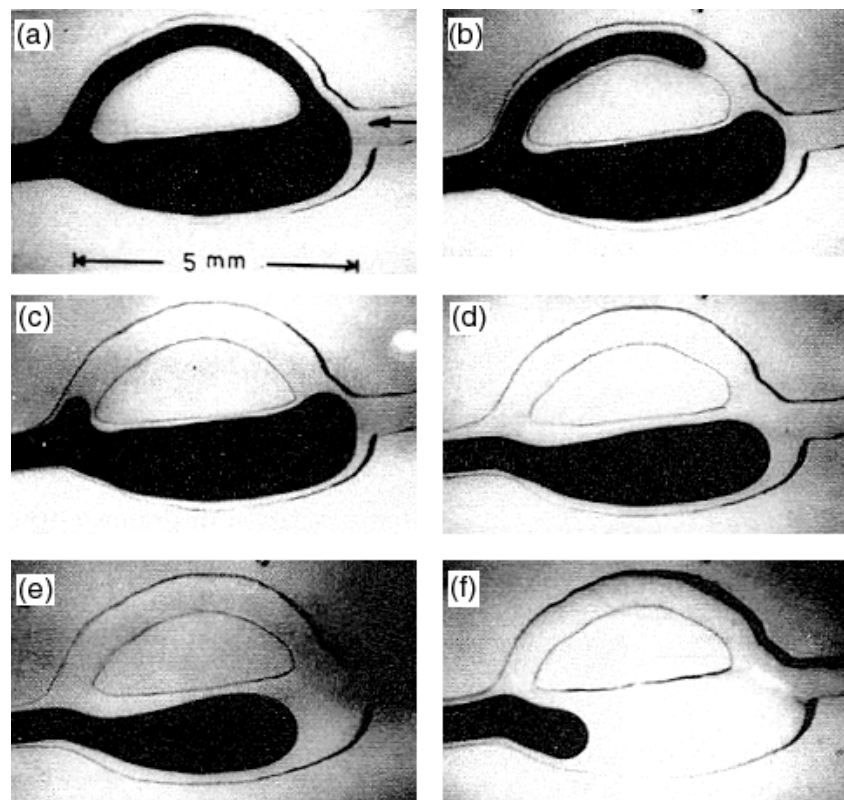


Figura 5.7.2 – Sequência de um processo de embebição entre água e óleo obtido experimentalmente (Chatzis & Dullien, 1983). As imagens (a) e (f) correspondem aos estágios inicial e final, respectivamente.

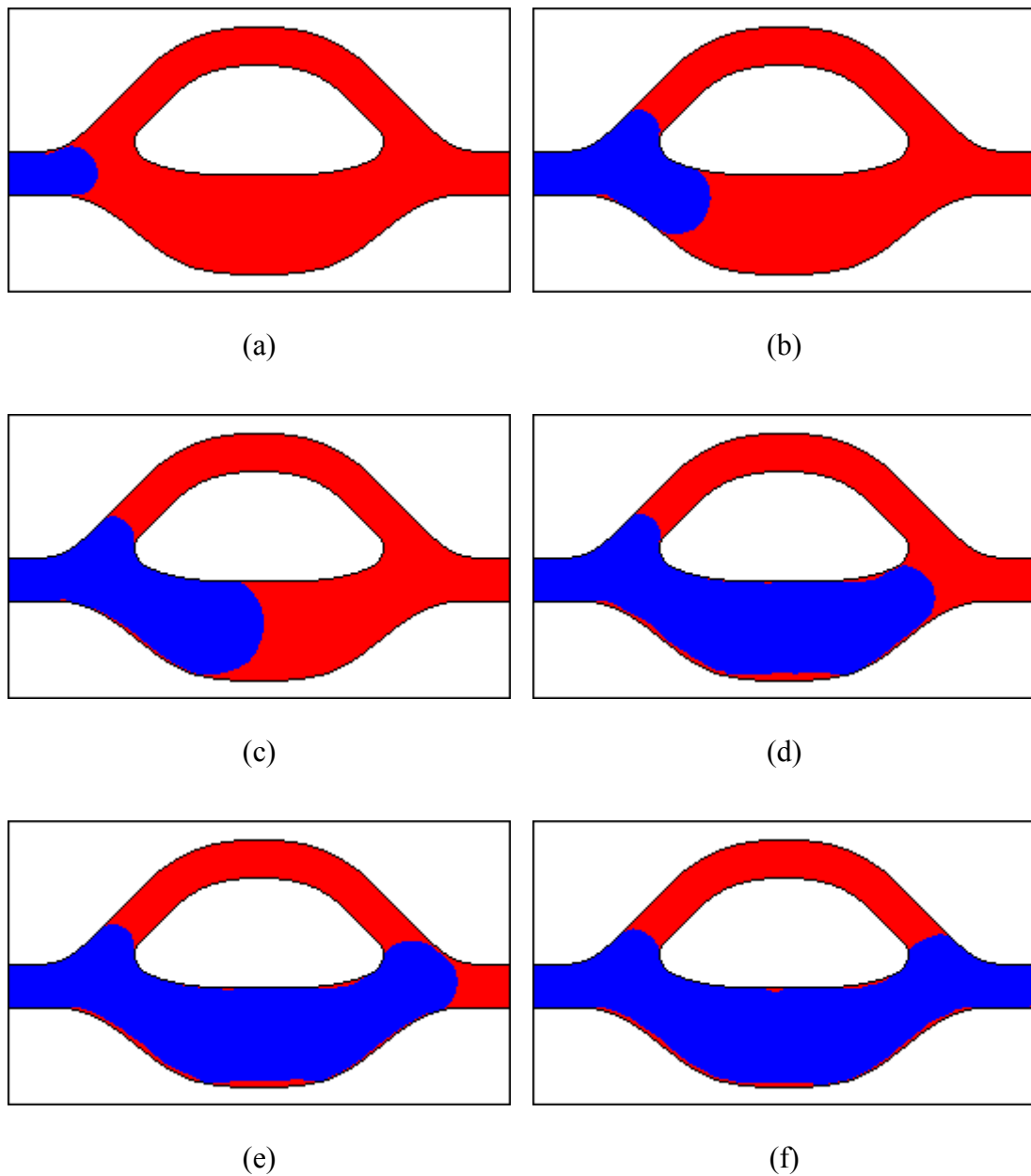


Figura 5.7.3 – Sequência de um processo de drenagem simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 151×487 . As imagens de (a) a (f) correspondem a 12000, 22000, 29000, 42000, 48000 e 57000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 3.3 horas.

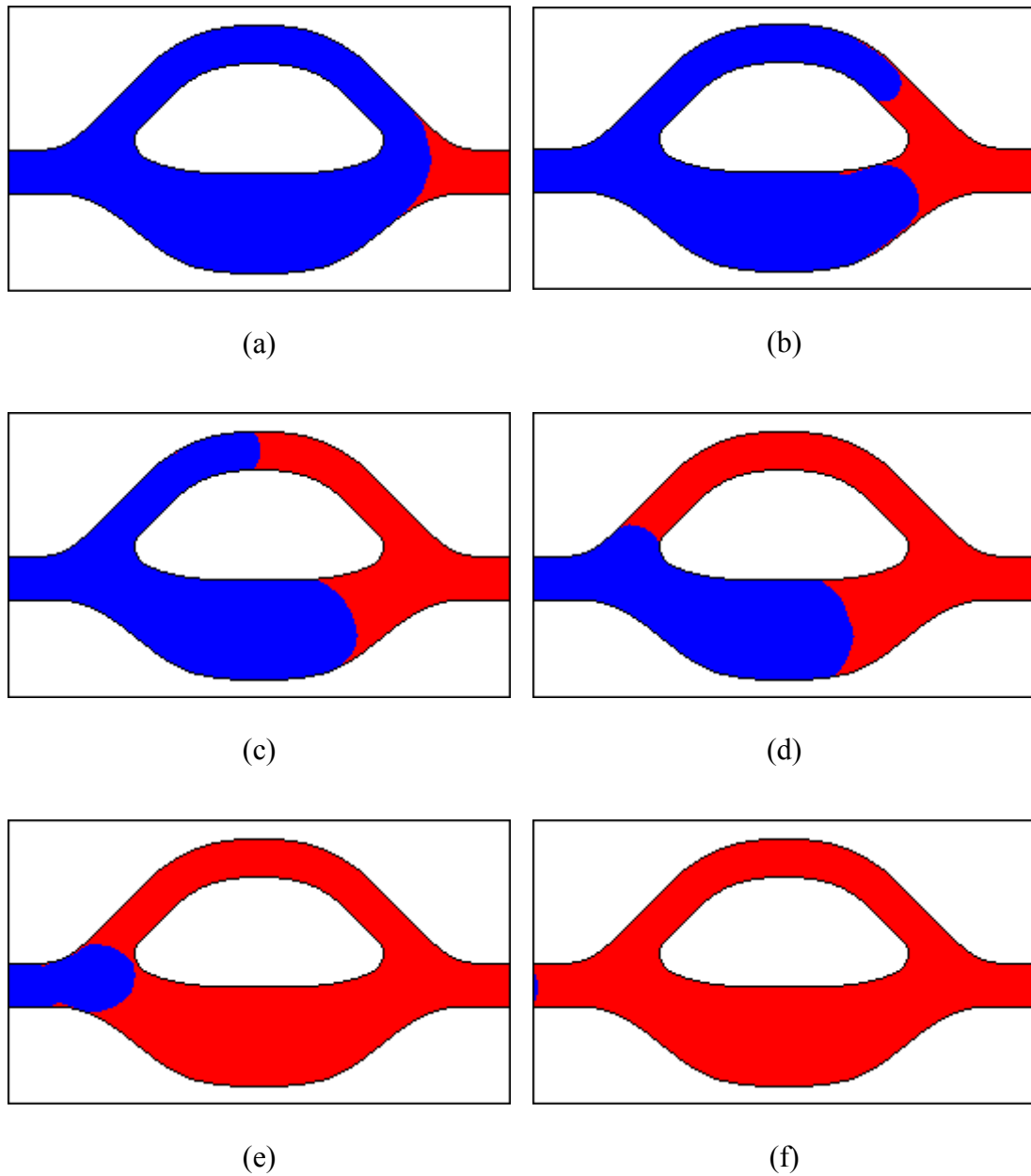


Figura 5.7.4 – Seqüência de um processo de embebição simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 181×487 . As imagens de (a) a (f) correspondem a 1400, 114000, 123000, 134000, 175000 e 190000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 10.5 horas.

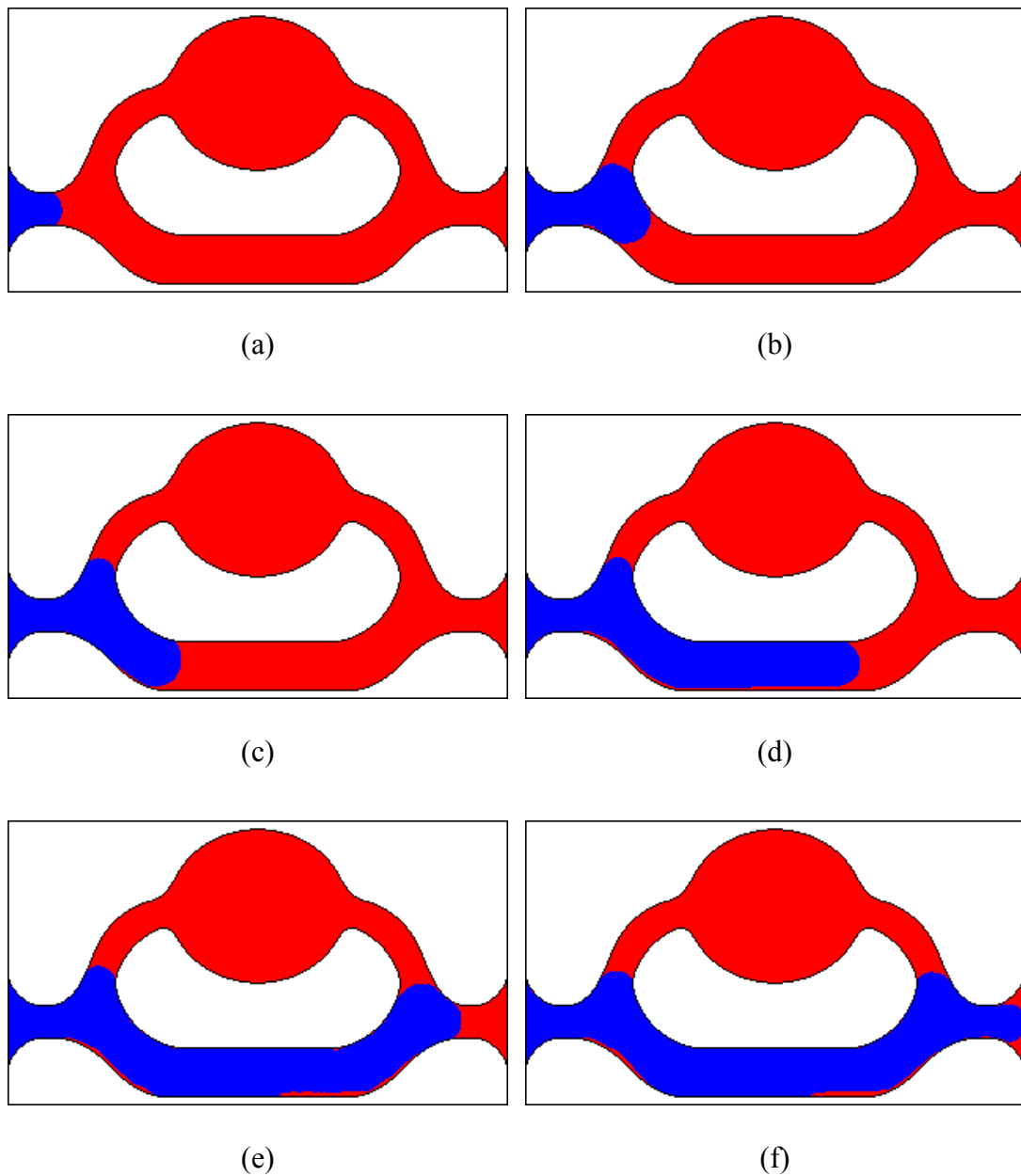


Figura 5.7.5 – Sequência de um processo de drenagem simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 181x541. As imagens de (a) a (f) correspondem a 7000, 21000, 28000, 46000, 61000 e 71000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 5 horas.

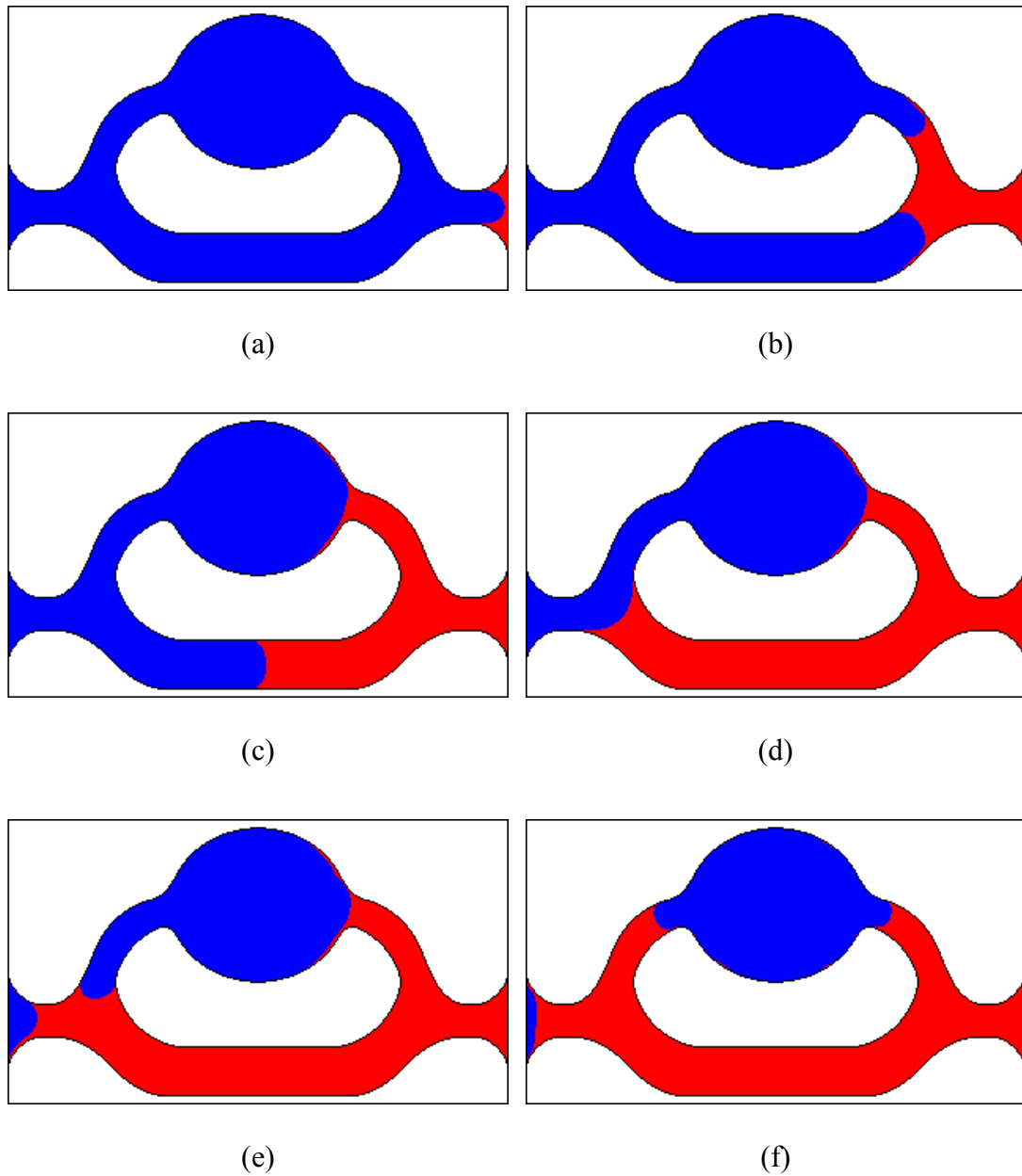


Figura 5.7.6 – Sequência de um processo de embebição simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 181x541. As imagens de (a) a (f) correspondem a 1000, 47000, 65000, 85000, 97000 e 130000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos. O tempo total de simulação foi de ~ 9.5 horas.

Como podemos observar, os resultados obtidos nas figuras 5.7.3, 5.7.4 e 5.7.5 têm boa concordância com os resultados experimentais mostrados nas figuras 5.7.1 e 5.7.2. Comparando ambos os resultados para drenagem, notamos que tanto na visualização experimental quanto no processo simulado a fase deslocada fica aprisionada no capilar de menor diâmetro, ou no caso da figura 5.7.5, naquela região onde a entrada e a saída têm um capilar de menor diâmetro. Em relação aos resultados para embebição, estes também apresentam boa concordância com os resultados experimentais. Como podemos observar nas figuras 5.7.2 e 5.7.4, em ambos os casos a eficiência do deslocamento é de 100%, o que mostra que esse tipo de poro não pode ser utilizado para explicar o fenômeno de “trapping” em meios porosos no caso de embebição (Chatzis & Dullien, 1983). Além disso, nota-se que no caso simulado não há um filme precursor da fase molhante, visto que a característica discreta (conseqüentemente irregular) do meio impede que este se desloque rapidamente. Desse modo, a interface move-se até encontrar a região sólida central, separando-se então em duas, uma no capilar menor e outra no capilar maior. Em virtude das forças capilares nesse escoamento serem dominantes ($Ca \sim 10^{-3}$) a interface no capilar menor move-se mais rapidamente do que a interface do capilar maior.

Os resultados simulados na figura 5.7.6 também estão em acordo com os resultados mostrados em Chatzis & Dullien (1983). Nesse caso, grande parte da fase não-molhante fica nitidamente aprisionada no poro, mostrando que esse tipo de poro é representativo na explicação do fenômeno de “trapping” em meios porosos para o caso de processos de embebição. Verifica-se nas figuras 5.7.3 e 5.7.4 que a própria dinâmica simulada é muito semelhante à experimental, principalmente em relação às curvaturas das interfaces e aquelas porções da fase molhante que ficam retidas junto às paredes. Essas porções podem causar o fenômeno de “lubrificação” da fase não-molhante, pois muitas vezes, a fase invasora perde o

contato direto com a parede, o que faz com que a mesma escoe com maior velocidade através do poro.

Um fator que deve ser observado, é a instabilidade dos filmes da fase molhante que ficam estagnados junto às paredes, que inicialmente estão conectados e após alguns passos de tempo esses filmes se rompem. Esse problema é ocasionado pela difusão das partículas vermelhas na fase azul e vice-versa, e em princípio, não pode ser resolvido, pois resulta da dinâmica microscópica dos modelos de gás em rede, que impõem somente uma partícula em cada direção da rede, de modo que mesmo que haja um mediador e uma partícula de mesma cor na direção i , este não terá efeito nenhum se houver uma outra partícula de mesma cor na direção $-i$, pois aquela direção já estará ocupada.

Para concluir, nota-se que os experimentos foram conduzidos em 3D, enquanto a simulação foi realizada em 2D. Assim, algumas diferenças eventualmente podem aparecer entre o resultado experimental e o resultado simulado.

5.8. Efeito da Molhabilidade em Processos de Deslocamento Imiscível

Processos de deslocamento imiscível são fortemente influenciados pela molhabilidade das fases no escoamento em uma estrutura porosa. Dessa forma, quando se pretende otimizar um processo de deslocamento entre dois fluidos é de extrema importância o conhecimento das interações entre as fases e as regiões sólidas do meio poroso. Mungan (1966) mostrou que podem ser obtidas diferentes saturações residuais, dependendo do ângulo de contato. O autor utilizou para experimentação pó de politetrafluoretileno (TFE) comprimido em diversas pressões. Segundo o autor, o motivo de tal escolha reside no fato de tais meios porosos apresentarem baixas energias de superfície, o que diminui sensivelmente a adsorção de partículas nas superfícies sólidas. Além disso, Mungan utilizou substâncias puras sem agentes

tensoativos. Os resultados obtidos pelo autor referem-se à eficiência do deslocamento imiscível, concluindo que quando uma fase molhante desloca uma fase não-molhante o processo de deslocamento é sempre mais eficiente, de modo que para menores ângulos de contato menor é a saturação residual. Esse resultado é esperado, pois quanto maior a molhabilidade da fase deslocada, maiores (ou mais fortes) são as interações fluido/sólido, sendo mais difícil aumentar a eficiência do deslocamento. Note que nesse trabalho, considera-se como saturação residual a saturação da fase deslocada após a fase invasora atravessar completamente o meio poroso.

Foram realizadas simulações utilizando o modelo MLGA, variando-se o ângulo de contato da fase invasora a fim de verificar a validade dos resultados simulados em relação ao autor citado acima. Nas simulações foi utilizada uma geometria porosa idealizada formada de círculos bidimensionais de mesmo raio aleatoriamente arranjados, mas que não se sobrepõem. Os ângulos de contato da *fase invasora* foram variados de 180° a 0° . Note que passamos de um processo de drenagem para um processo de embebição. A razão de viscosidades entre a fase deslocada e fase invasora é dada por $\mu_d/\mu_i \sim 40$. Nos três casos simulados, a fase invasora está sujeita a uma pressão aplicada P_i , de modo que a ΔP entre as câmaras é de ~ 2.0 (unidades de rede). Alguns passos da evolução dos escoamentos simulados são mostrados nas figuras 5.8.1, 5.8.2 e 5.8.3.

A informação de saturação da fase deslocada em função do tempo é mostrada na figura 5.8.4., onde facilmente pode ser observada a eficiência do deslocamento em função da molhabilidade imposta.

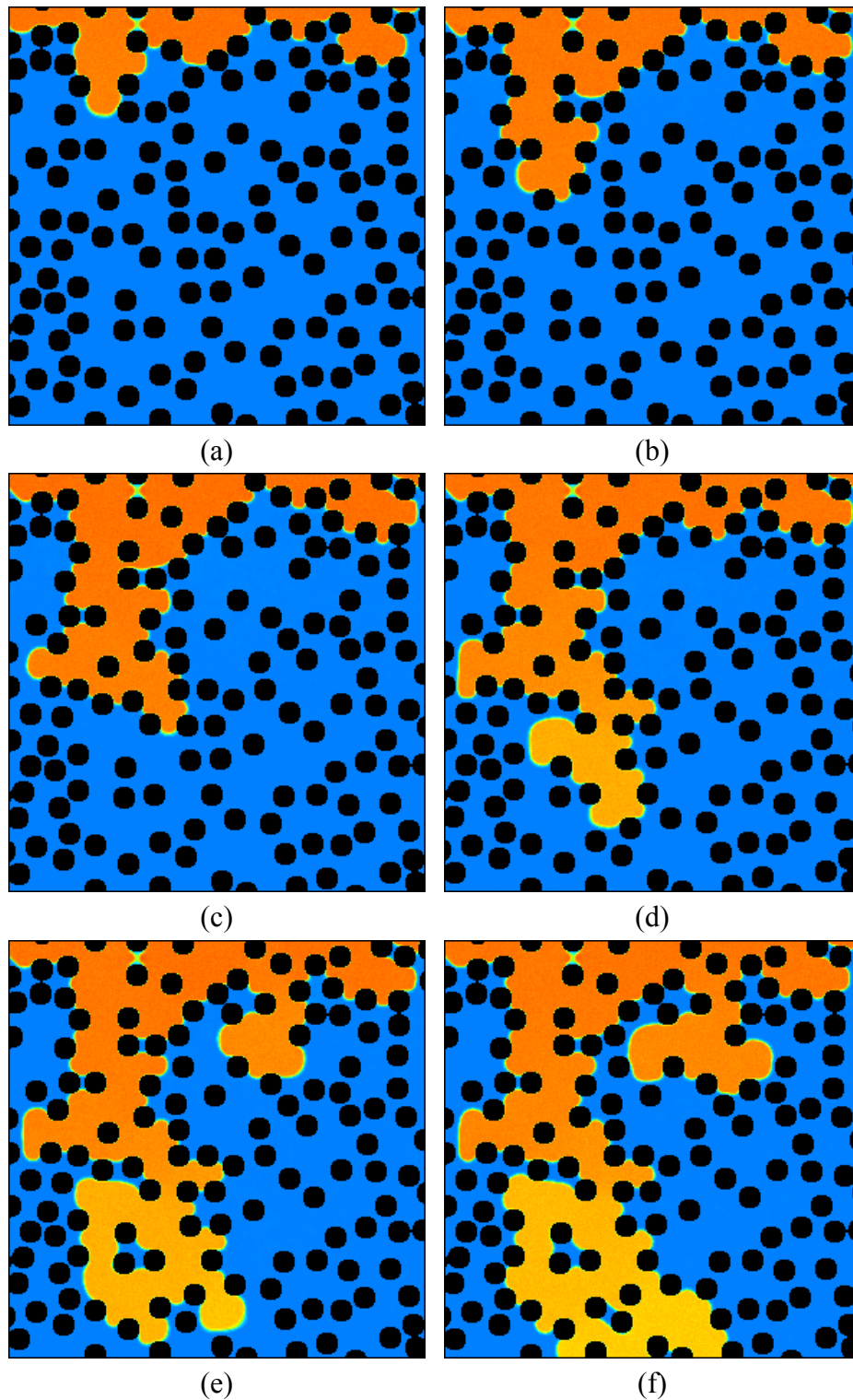


Figura 5.8.1 – Sequência da simulação de um processo de invasão em uma geometria porosa idealizada com dimensão de 290x390 unidades de rede. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 6000, 12000, 18000, 24000, 30000 e 34000 passos de tempo, respectivamente. O ângulo de contato da fase invasora é $\sim 180^\circ$. O tempo total de simulação foi ~ 3.7 horas.

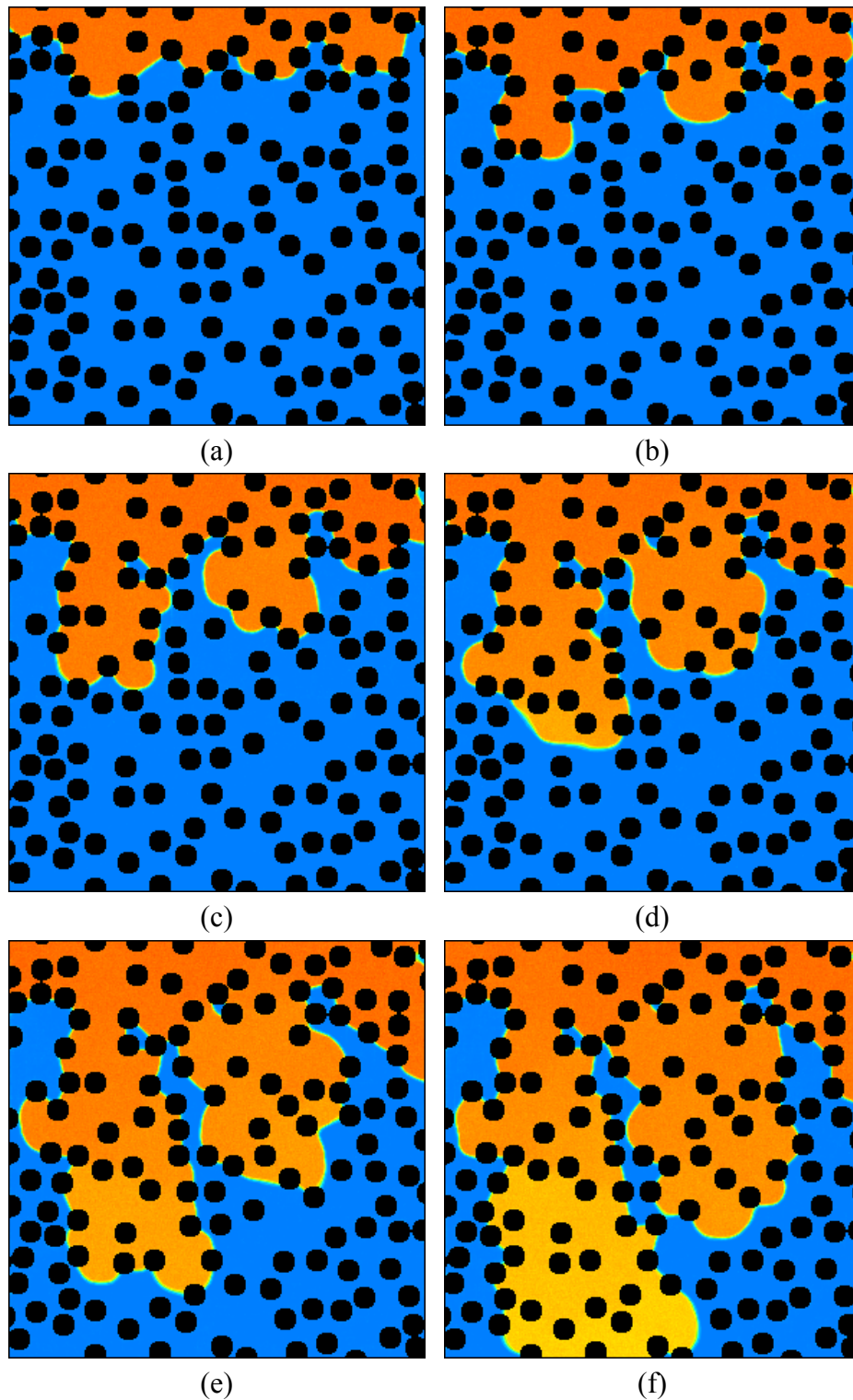


Figura 5.8.2 – Sequência da simulação de um processo de invasão em uma geometria porosa idealizada com dimensão de 290x390 unidades de rede. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 4500, 9000, 13500, 18000, 22500 e 27500 passos de tempo, respectivamente. O ângulo de contato da fase invasora é $\sim 90^\circ$. O tempo total de simulação foi ~ 3.0 horas.

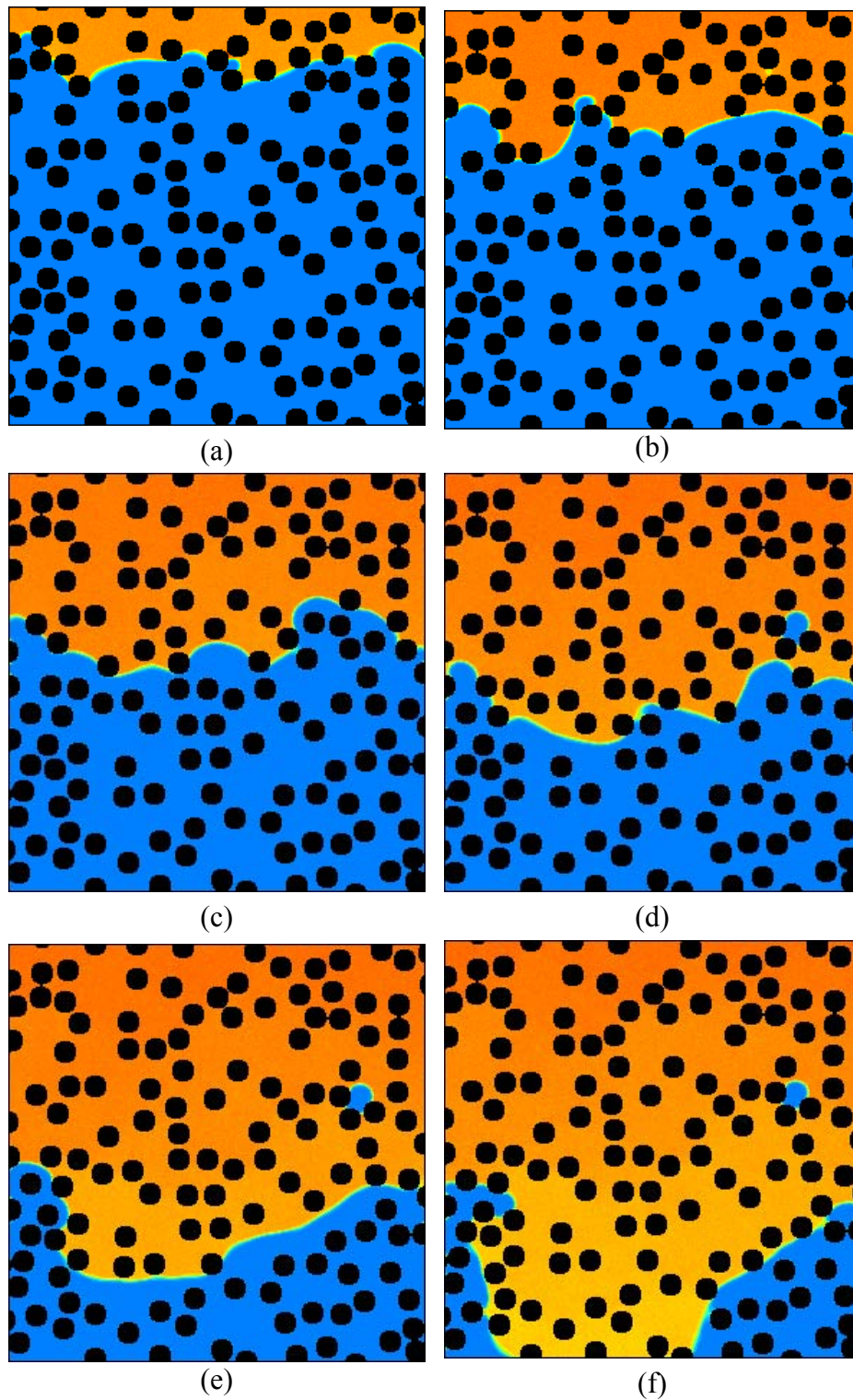


Figura 5.8.3 – Sequência da simulação de um processo de invasão em uma geometria porosa idealizada com dimensão de 290x390 unidades de rede. As imagens (a), (b), (c), (d), (e) e (f) correspondem a 2750, 8500, 13500, 18000, 22000 e 26000 passos de tempo, respectivamente. O ângulo de contato da fase invasora é $\sim 0^\circ$. O tempo total de simulação foi ~ 2.8 horas.

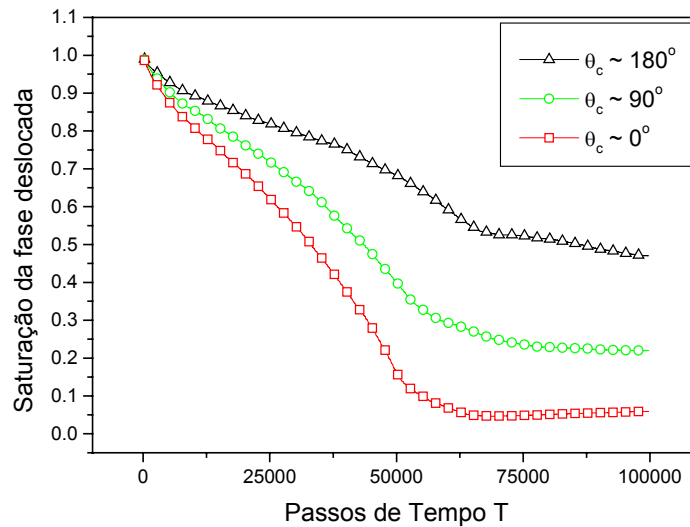


Figura 5.8.4 – Saturação da fase deslocada em função do tempo de simulação para o escoamento em uma geometria porosa formada por círculos de mesmo raio, aleatoriamente arranjados. Note que a saturação residual é menor para menores ângulos de contato, de acordo com os resultados experimentais de Mungan (1966).

Os resultados apresentados na figura 5.8.4, utilizando o modelo MLGA, têm boa concordância qualitativa com os resultados de Mungan (1966).

Nas simulações realizadas, o ângulo de contato foi variado de 180° a 0° , ou seja, como já citado, passamos de um processo de drenagem para um processo de embebição, respectivamente. Como foi mostrado, em um processo de embebição o processo de deslocamento é mais eficiente. Esse fato é devido à ação conjunta de forças capilares e da pressão aplicada na fase invasora. Enquanto as forças capilares tendem a invadir menores poros e constrições, a pressão aplicada tende a fazer com que a fase invasora percorra os caminhos de menor resistência, ou seja, maiores poros e constrições. Assim, o processo como um todo é otimizado e a saturação residual diminui fortemente para menores ângulos de contato.

É importante notar que os resultados obtidos utilizando o modelo MLGA são para estruturas 2D, enquanto que os resultados obtidos por Mungan (1966) são experimentais e

realizados em estruturas 3D, de modo que os resultados simulados são apenas qualitativos. Além disso, nota-se que o fenômeno de “trapping” é muito pequeno em estruturas porosas 2D (especialmente na embebição), pois não há a mesma conectividade presente em estruturas porosas 3D.

5.9. Curvas de Pressão Capilar

As curvas de pressão capilar P_c em função da saturação S de uma das fases (em geral, da fase molhante) têm grande importância no estudo de processos de deslocamento imiscível em meios porosos, pois podem fornecer características importantes do processo de invasão em um determinado meio poroso. Entre as características mais importantes fornecidas, estão a distribuição do tamanho dos poros, a saturação irreduzível da fase deslocada e a saturação residual da fase deslocante. Visto sua importância, é interessante que um modelo computacional para simulação de escoamentos bifásicos seja capaz de simular as curvas de pressão capilar representativas de um determinado meio poroso.

Assim, simulam-se nessa seção processos de invasão em uma estrutura porosa formada de círculos bidimensionais arranjados aleatoriamente no domínio, cuja porosidade é de 65%. Como o objetivo principal é obter uma curva de P_c em função da saturação da fase molhante S_w (fase amarela), a pressão externa aplicada na fase não-molhante (fase azul) P_{nw} é aumentada em passos de 0.25 (unidades de rede) até um limite definido pelo diâmetro dos poros da membrana inserida na câmara (ver figura 5.9.1) ocupada pela fase molhante, no qual os poros da membrana são invadidos. Essa membrana tem a função de evitar que a fase invasora invada a câmara inferior (ver figura 5.9.1), fazendo com que poros de menores diâmetros possam ser invadidos a medida que a pressão externa é aumentada. Para cada passo de pressão, necessita-se aguardar até a obtenção do equilíbrio, onde a saturação de ambas as

no meio torna-se constante. A curva obtida nesse processo é chamada de *curva de drenagem*. Após ser atingida a pressão limite citada, realiza-se o processo inverso, baixando-se a pressão na fase não-molhante P_{nw} , de modo que essa fase recue e a fase molhante desloque a fase não-molhante. Desse processo obtêm-se uma *curva de embebição*. A seqüência da simulação dessas invasões é mostrada nas figuras 5.9.2 e 5.9.3. As curvas de pressão capilar obtidas são mostradas na figura 5.9.4.

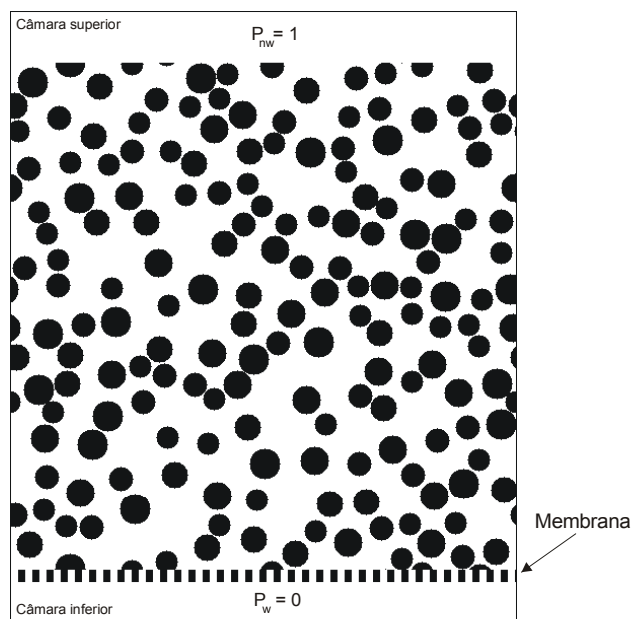
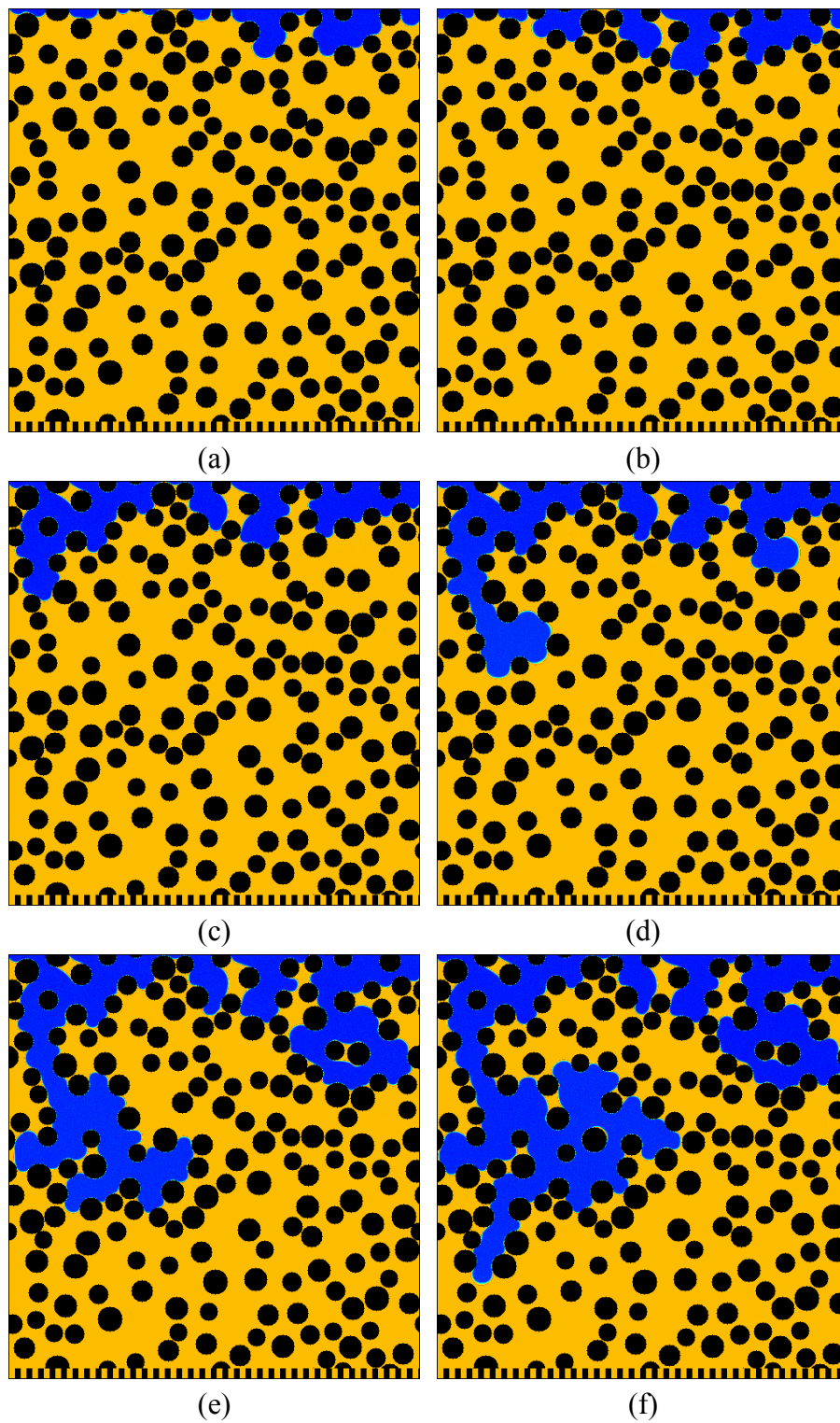


Figura 5.9.1 – Esquematização do domínio de escoamento simulado. Na figura são mostradas as câmaras superior e inferior, onde ficam localizadas as fase não-molhante e molhante, respectivamente.

Como pode ser observado na figura 5.9.4, as curvas de pressão capilar obtidas com o modelo MLGA apresentam as mesmas características de curvas de pressão capilar obtidas experimentalmente. Entre essas características, pode-se observar o fenômeno de histerese, que faz com que o comportamento da curva de drenagem seja diferente da curva de embebição. Nota-se que nas curvas mostradas, existe um valor de pressão capilar de entrada, $P_c \sim 1.0$ (unidades de rede), onde a fase molhante realmente “atravessa” o meio poroso por completo,

encontrando a membrana na câmara inferior. No caso simulado, a pressão capilar máxima na câmara superior que pode ser aplicada, depende do diâmetro dos poros da membrana. Dessa forma, quando a invasão desses poros inicia, não é mais possível o aumento de pressão capilar na fase não-molhante; mesmo assim, foi possível encontrar o valor aproximado de saturação irreduzível da fase molhante de ~ 0.3 . Observando a curva de embebição, foi possível obter o valor da saturação residual da fase não-molhante de ~ 0.2 .

A partir de uma observação mais detalhada das imagens obtidas nas simulações, verifica-se que algumas regiões da fase deslocada tendem a “desaparecer” da simulação (compare as figuras entre 5.9.2(f) e 5.9.2(j)). Como já citado anteriormente, esse efeito é causado pela difusão das partículas da fase deslocada na fase deslocante, devido ao princípio de exclusão presente em modelos de gás em rede. Nesse caso, tal efeito tende a ser aumentado devido às altas pressões aplicadas na fase deslocante. Isso não representa um problema na medição da saturação das fases, pois como é um fenômeno de difusão, essas partículas “desaparecem” de algumas regiões, mas “aparecem” em outras regiões. Essa difusão aparece com mais frequência em processos de embebição, cujos tempos de processamento tendem a ser mais elevados, o que faz com que as fases fiquem mais tempo em contato.



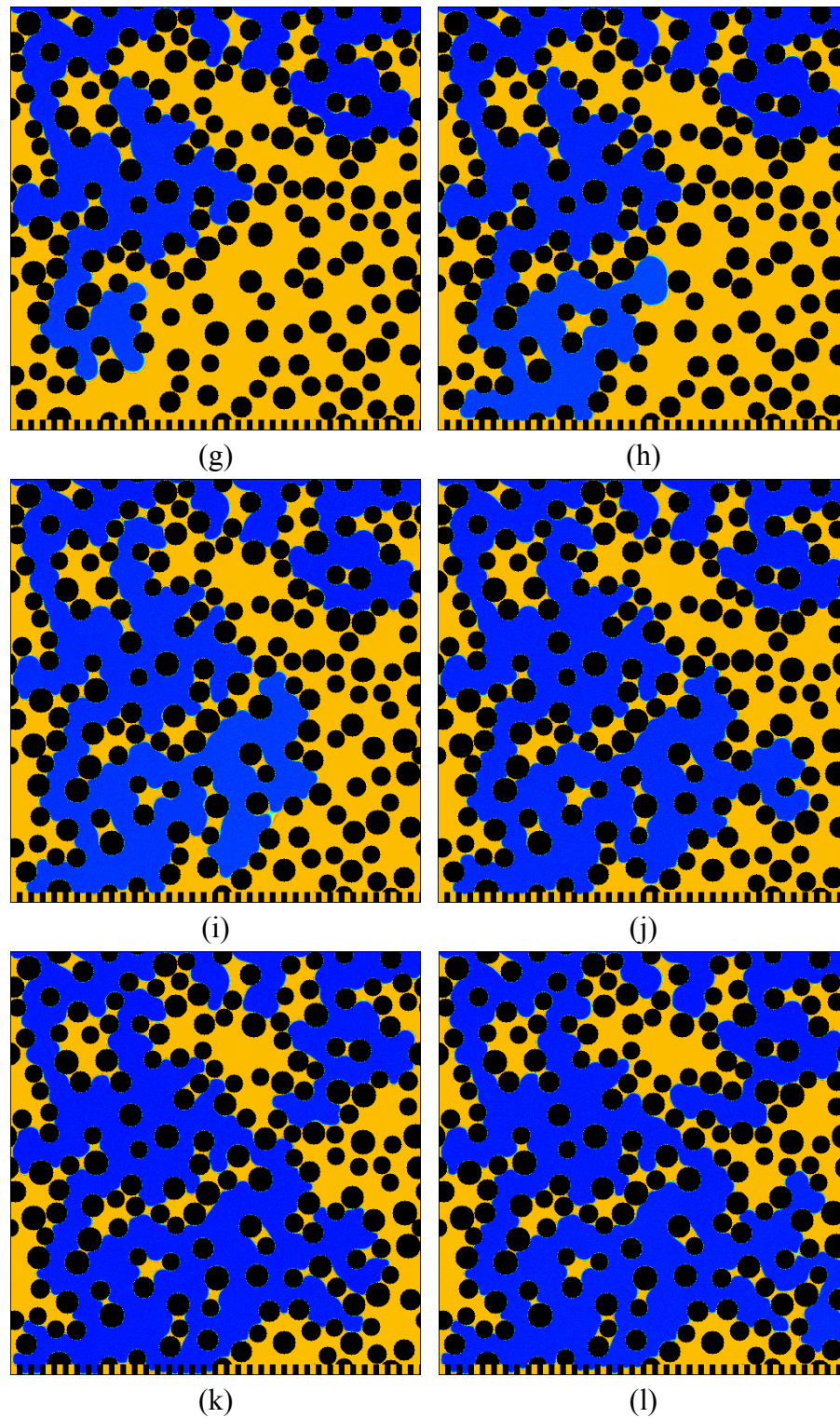
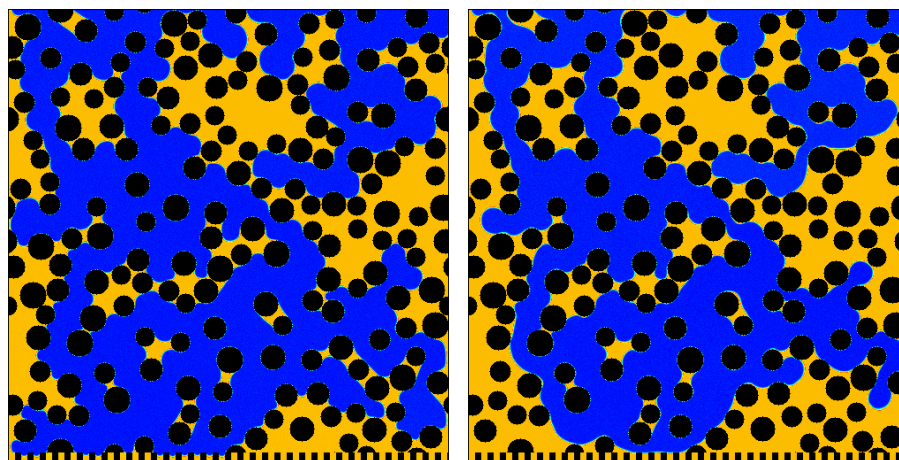
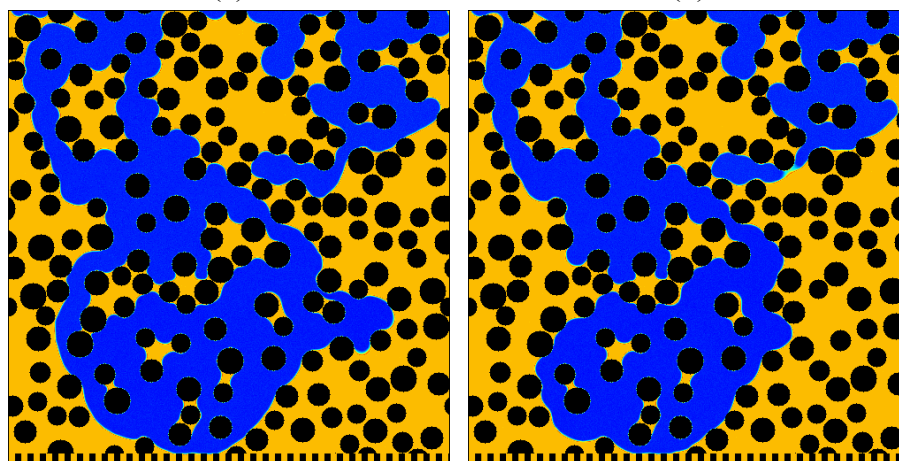


Figura 5.9.2 – Sequência de um processo de drenagem ($\theta_c \sim 180^\circ$) em um meio poroso 2D idealizado com dimensão de 500x500 unidades de rede sob diferentes pressões externas aplicadas. As imagens de (a) a (l) correspondem a 50000, 100000, 150000, 175000, 200000, 225000, 250000, 300000, 350000, 400000, 450000 e 550000 passos de tempo, respectivamente. As imagens foram obtidas com média temporal de 500 passos. O tempo total de simulação foi ~ 145 horas.



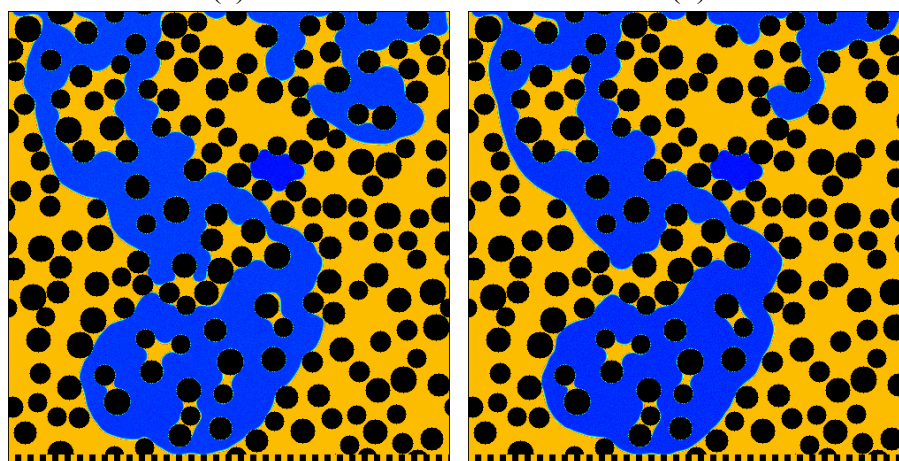
(a)

(b)



(c)

(d)



(e)

(f)

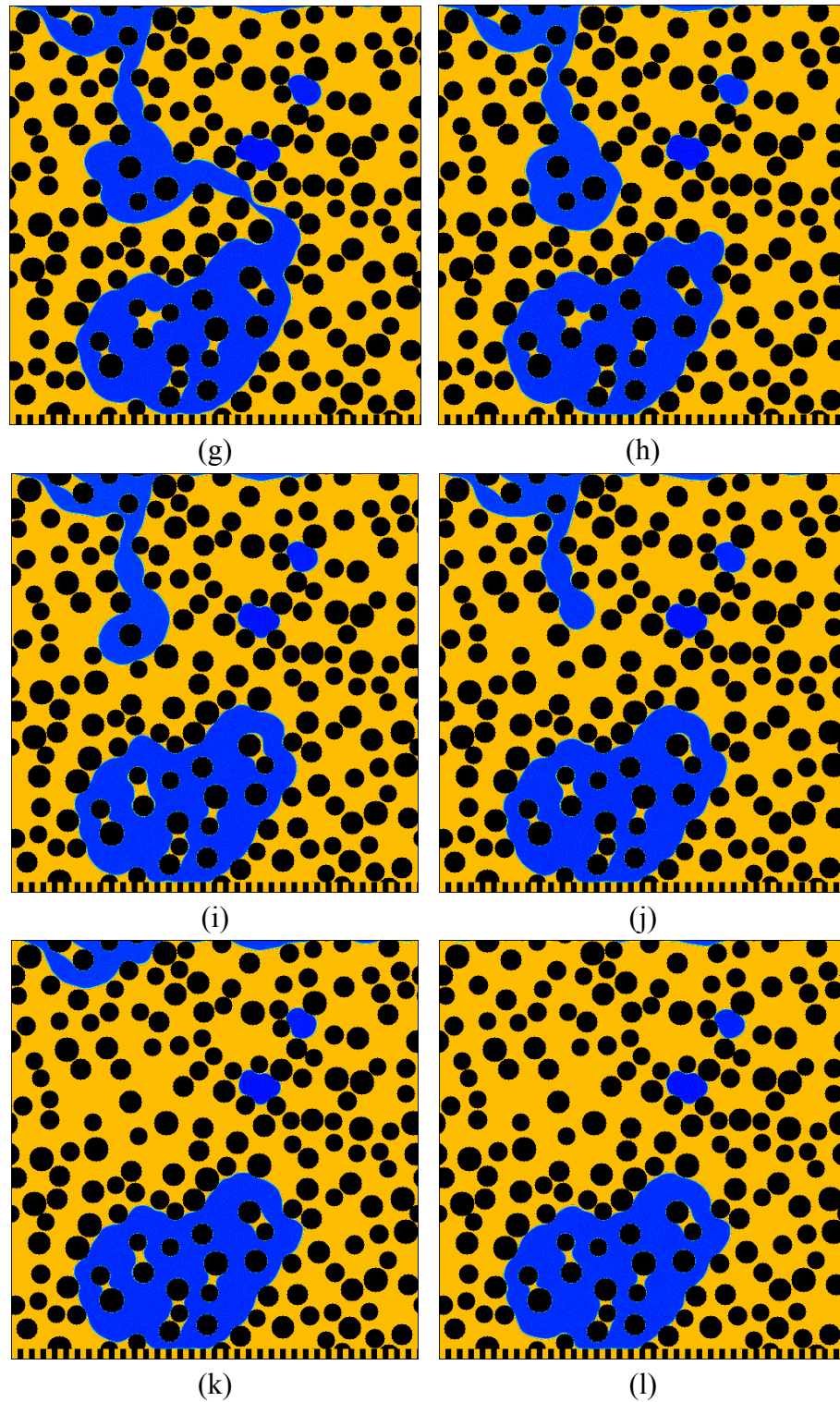


Figura 5.9.3 – Sequência de um processo de embebição ($\theta_c \sim 0^\circ$) em um meio poroso 2D idealizado com dimensão de 500x500 unidades de rede sob diferentes pressões externas aplicadas. As imagens de (a) a (l) correspondem a 16000, 150000, 200000, 235000, 256000, 300000, 403000, 425000, 475000, 506000, 535000 e 600000 passos de tempo, respectivamente, tendo como ponto de partida o último passo de tempo do processo de drenagem. As imagens foram obtidas com média temporal de 500 passos. O tempo total de simulação foi ~ 160 horas.

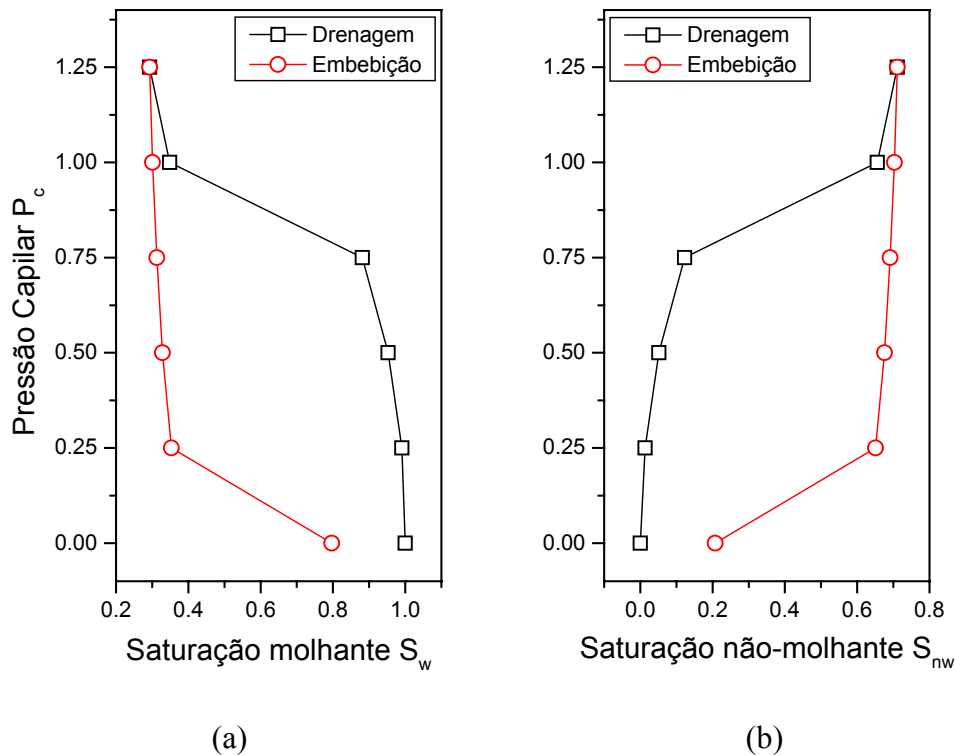


Figura 5.9.4 – Curvas de pressão capilar obtidas utilizando o modelo MLGA. Em (a) e (b), são mostradas as curvas de drenagem e embebição para a saturação da fase molhante e para saturação da fase não-molhante, respectivamente.

Um fator interessante observado nas simulações, e é condizente com a realidade física do problema, é o comportamento do sistema frente aos processos de drenagem e embebição. No caso da drenagem, a fase invasora não-molhante sempre aumenta sua área invadida, o que aumenta seus “caminhos” disponíveis para o escoamento. O mesmo não ocorre no processo de embebição, onde a fase não-molhante perde sua continuidade em virtude de sucessivas rupturas por “snap-off”. O fenômeno de “snap-off” é caracterizado pela ruptura da fase não-molhante em função das instabilidades que ocorrem em regiões estreitas, como constrições. Essa perda de continuidade apresentada pela fase não-molhante no processo de embebição, faz com que tais processos tornem-se mais lentos, pois os caminhos disponíveis para a fase não-molhante escoar, diminuem com o tempo.

É importante notar que o meio poroso utilizado é idealizado e bidimensional, ou seja, não é representativo daqueles meios porosos encontrados na natureza. Embora, muitos fenômenos complexos que são observados em meios porosos reais, possam ser observados nesses tipos de geometrias, como por exemplo, os fenômenos de histerese.

6. CONCLUSÃO

O Modelo de Gás em Rede Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) mostrou-se eficiente na simulação computacional de escoamentos bifásicos em estruturas porosas bidimensionais. O modelo foi capaz de recuperar a natureza física da lei de Young-Laplace, em relação à linearidade da diferença de pressão na interface com o inverso do raio. Foi possível simular a dinâmica macroscópica de molhamento observada experimentalmente com a modificação das interações entre partículas e regiões sólidas. Introduziu-se nesse trabalho, um método para simular viscosidades diferentes com a mesma densidade média por sítio, tornando possível a simulação de escoamentos imiscíveis com fluidos de diferentes viscosidades.

Mesmo com toda simplicidade presente no modelo MLGA, este se mostrou robusto para a simulação de fenômenos complexos, e ainda não completamente entendidos, como a invasão capilar com influência da gravidade e processos de deslocamento imiscível em geometrias de diferentes formas, além de simular aspectos físicos referentes à interação entre diferentes espécies de forças, como capilares e viscosas. Em princípio, os tempos de computação não apresentam grandes problemas, pois tendem a ser minimizados com a utilização de métodos de computação paralela e com o advento de novos computadores, que possuam maior poder de processamento.

Considerando a diversidade dos fenômenos simulados, o modelo MLGA demonstrou ser promissor na simulação de escoamentos multifásicos, visto que todos os resultados obtidos nesse trabalho tiveram boa concordância com resultados experimentais e teóricos presentes na literatura. Isso evidencia que este modelo pode vir a ser uma ferramenta poderosa para simulação e predição do comportamento de diferentes fluidos no escoamento em meios porosos reais, como aqueles encontrados em reservatórios de petróleo.

7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O modelo MLGA mostrou-se adequado para a simulação de processos de deslocamento imiscível em meios porosos bidimensionais. Mas há a necessidade de validação do modelo para meios porosos em três dimensões, semelhantes àqueles encontrados em situações reais, nos quais resultados experimentais estão disponíveis. Sendo esse processo, dispendioso em recursos computacionais, pois as redes utilizadas são bem maiores do que àquelas utilizadas nesse trabalho, a paralelização dos códigos computacionais para processamento de alto desempenho em “clusters” de computadores é de extrema importância. Após todo esse processo, torna-se viável a simulação de escoamentos multifásicos em diferentes geometrias porosas tridimensionais. Então, a aplicação do modelo MLGA para a simulação de sistemas água-óleo, pode ser um caminho a ser seguido, visto que é de grande importância para a indústria do petróleo, pois permite a obtenção de curvas de permeabilidade relativa para o sistema referido.

Um outro ponto importante, é o desenvolvimento de modelos de gás em rede para as substâncias tensoativas que são utilizadas em processos de otimização de recuperação de petróleo. Esses modelos seriam úteis para a previsão de escoamentos multifásicos ao nível de poro, quando estão presentes outras substâncias que modificam o comportamento do escoamento. Assim, seria possível um estudo mais detalhado da influência de tais substâncias em processos de drenagem e embebição, freqüentemente utilizados na indústria de recuperação de petróleo.

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADAMSON, A. **Physical Chemistry of Surfaces** – 5th ed.. John Wiley & Sons, 1990.

ANDERSON, W. G. J. *Pet. Tech.* 38, 1246, 1986.

BALAKOTAIAH, V., JAYAWARDENA, S. S., NGUYEN, L. T. Studies on normal and microgravity annular two phase flows.

BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**. Dover Publications, New York, 1972.

CHAPMAN, S., COWLING, T. G. **The Mathematical Theory of Non-uniform Gases**. Cambridge University Press, 1952.

CHATZIS, I; DULLIEN, F. A. L. Dynamic immiscible displacement mechanisms in pore doublets: Theory versus Experiment. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 91, n. 1, 1983.

CHEN, S.; DOOLEN, G. D.; EGGERT, K. G.; GRUNAU, D.; LOH, E. Local lattice-gas model for immiscible fluids. **Phys. Rev. A**, v.43, p. 7053-7056, 1991.

CHOPARD, B., DROZ, M. **Cellular automata modeling of physical systems**. Cambridge University Press, 1998.

DE CONINCK, J., RUIJTER, M. J., VOUE, M. Dynamics of wetting, **Current Opinion in Colloid & Interface Science**, vol. 6, p.49-53, 2000.

d'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P.; FRISCH, U. Lattice gas models for 3D hydrodynamics. **Europhys. Lett.**, v.2, p.291-297, 1986.

DULLIEN, F. A. L. **Porous media: fluid transport and pore structure**. Academic Press, 1991.

FACIN, P. C. **Análise de modelos booleanos com várias energias para transição de fase em fluidos**. Projeto de Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica, Florianópolis, 2001.

FINN, R. **Capillary surface**. Notice of the AMS, v. 46, n. 7, 2000.

FRISCH, U.; D'HUMIÈRES, D.; HASSLACHER, B.; LALLEMAND, P.; POMEAU, Y.; RIVET, J. Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions. **Complex Systems**, v. 1, p.649-707, 1987.

FRISCH, U., HASSLACHER B., POMEAU Y. Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation. **Physical Review Letters**, v.56, p. 1505-1508, 1986.

GENABEEK, O. V.; ROTHMAN, D. H. Macroscopic manifestations of microscopic flows through porous media: Phenomenology from Simulation. **Annu. Rev. Earth Planet. Sci.** 24, p. 63-87, 1996.

GHIA, U., GHIA, K.N.; SHIN C. T. High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a multigrid Method. **Journal of Computational Physics**, v.48, p.387-411, 1982.

HARDY, J.; POMEAU, Y.; DE PAZZIS O. Time Evolution of a Two-Dimensional Model System. I. Invariant States and Time Correlation Functions. **J. Math. Phys.**, v.14, p.1746-1759, 1973.

JOOS, P; VAN REMOORTERE, P; BRACKE, M. The kinetics of wetting in a capillary. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 136, n. 1, 1990.

KADANOFF, L. P.; MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. A Poiseuille Viscometer for Lattice Gas Automata. **Complex Systems**, v.1, p.791-803, 1987.

LENORMAND, R. **Déplacements polyphasiques em milieu poreux sous l'influence des forces capillaries: Etude expérimentale et modélisation de type percolation**. Thèse. L'Institut National Polytechnique de Toulouse, 1981.

LENORMAND, R.; TOUBOUL, E.; ZARCONE, C. Numerical models and experiments on imiscible displacements in porous media. **J. Fluid. Mech.**, v. 189, p. 165-187, 1988.

LOWE, D. C., REZKALLAH, K. S. Flow regime identification in microgravity two-phase flows using void fraction signals. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 25, p. 433-457, 1999.

MAGNANI, F. S., P. C. PHILIPPI, Z. R. LIANG AND C. P. FERNANDES. Modelling two-phase equilibrium in three-dimensional porous microstructures, **Int. J. Mult. Phase**, v. 26, p. 99-123, 1999.

MAILLET, J. B., COVENEY, P. V. **Two-dimensional hydrodynamics lattice-gas simulations of binary immiscible and ternary amphiphilic fluid flow through porous media**. In: xxx.lanl.gov. 2000.

MIDDLEMAN, S. **An introduction to fluid dynamics: principles of analysis and design**. John Wiley & Sons, 1998.

MUNGAN, N. Interfacial Effects in Imiscible Liquid-Liquid Displacement in Porous Media. **Society of Petroleum Engineers Journal**, p. 247-253, 1966.

OLSON, J. F.; ROTHMAN, D. H. Two-fluid in sedimentary rock: simulation, transport and complexity. **J. Fluid. Mech.** 341, p. 343-370, 1997.

PHILIPPI, P. C. **Notas de aula do curso Modelos de Gás em Rede I**. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

REZKALLAH, K. S., ZHAO, L. A flow pattern map for two-phase liquid-gas flows under reduced gravity conditions. **Adv. Space Res.** V. 16, n. 7, p. 133-136, 1995.

ROSSEN, W. R. Snap-off in constricted tubes and porous media. **Colloids and Surfaces A**. v. 166, p. 101-107, 2000.

ROTHMAN, D. H.; KELLER J. Immiscible cellular-automaton fluids. **J. Stat. Phys.**, v.52, p.1119-1127, 1988.

ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S. **Lattice-gas Cellular Automata: Simple Models of Complex Hydrodynamics**. Cambridge University Press, 1997.

SAHIMI, M. Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing. **Reviews of Modern Physics**, Vol. 65, n. 4, 1993.

SANTOS, L. E. **Desenvolvimento de Modelos de Gás em Rede para Escoamentos Monofásicos e Bifásicos**. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

SANTOS, L. O. E.; PHILIPPI, P.C. Lattice-gas model based on field mediators for immiscible fluids. **Physical Review E**. Accepted to be published in 2002.

SANTOS, L. O. E.; PHILIPPI, P.C.; BERTOLI, S. L.; FACIN, P. C. Lattice-gas models for single and two-phase flows: application to the up-scaling problem in porous microstructures. To be published in **Computational and Applied Mathematics**, 2001.

SOLL, W. E., GRAY, W. G., TOMPSON, A. F. B. Influence of wettability on constitutive relations and its role in upscaling. **Computer Methods in Water Resources XII**.

SOMERS, J. A., REM, P. C. **Physica D**, v. 47, p. 39, 1991.

TANNER, L. H. The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **12**, 1473-1484, 1979.

TSAKIROGLOU, C. D., PAYATAKES, A. C. A New simulator of Mercury Porosimetry for the Characterization of Porous Materials. *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 137, n. 2, 1988.

TSUNODA, S., CHEN, Y., OHASHI, H. A new surface tracking algorithm for lattice gas automata. *Computer Physics Communications*, p. 138-144, 2000.

VAN GENABEEK, O., ROTHMAN D. H. Macroscopic manifestations of microscopic flows through porous media: Phenomenology from Simulation. *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, v.24, p.63-87, 1996.

WOLFRAM, S. Cellular Automaton Fluids: Basic Theory. *J. Stat. Phys.*, v. 45, p. 471-526, 1986.

APÊNDICE A – Expansão de Chapman-Enskog

Para a dedução do comportamento macroscópico de um modelo de gás em rede utiliza-se o método de Chapman-Enskog (Chapman & Cowling, 1952; Philippi, 2002; Santos, 2000) e assume-se que o gás está próximo do equilíbrio, de modo que as correções em torno da distribuição de equilíbrio são pequenas. No desenvolvimento dessa seção, foi utilizado o procedimento seguido por Santos (2000).

A fim de desenvolver o método, introduz-se o tempo característico macroscópico t_c e o comprimento característico macroscópico L , sendo que $t_c \gg h_t$ e $L \gg h_x$. Além disso, utilizam-se as variáveis adimensionais t^* , x^* e C^* , definidas por

$$t^* \equiv \frac{t}{t_c} \tag{A.1}$$

$$x^* \equiv \frac{x}{L}$$

$$C^* = C \frac{t_c}{L}.$$

Considerando-se que a distribuição N_i está próxima da distribuição de equilíbrio N_i^{eq} , pode-se fazer a seguinte decomposição:

$$N_i = N_i^0 + k_n N_i^1 + k_n^2 N_i^2 + \dots \tag{A.2}$$

onde $N_i^0 = N_i^{eq}$ e $k_n = h_t/t_c$ é o número de Knudsen.

Fazendo $h_t = k_n t_c$ na equação 3.34 e desprezando-se termos de ordem superior a k_n^2 tem-se

$$\begin{aligned} k_n (\partial_{t^*} N_i + C_{i\alpha}^* \partial_{\alpha^*} N_i) + \\ + \frac{1}{2} k_n^2 (\partial_{t^*} \partial_{t^*} N_i + C_{i\alpha}^* \partial_{\alpha^*} \partial_{t^*} N_i + C_{i\alpha}^* C_{i\beta}^* \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} N_i) = \Omega_i(x, t). \end{aligned} \quad (A.3)$$

A derivada temporal também pode ser decomposta, para isso define-se

$$\partial_{t^*} \equiv \partial_{0^*} + k_n \partial_{1^*} + k_n^2 \partial_{2^*} + \dots \quad (A.4)$$

Após a aplicação do operador ∂_{t^*} sobre a densidade ρ e a quantidade de movimento ρv , as seguintes definições são importantes

$$\begin{aligned} \partial_{0^*} \rho &\equiv -\partial_{\alpha^*} \rho v_{\alpha}^* \\ \partial_{r^*} \rho|_{r>0} &\equiv 0 \end{aligned} \quad (A.5)$$

e

$$\begin{aligned} \partial_{0^*} \rho v_{\alpha}^* &\equiv -\partial_{\alpha^*} \Pi_{\alpha\beta}^{*0} \\ \partial_{r^*} \rho v_{\alpha}^*|_{r>0} &\equiv -\partial_{\alpha^*} \Pi_{\alpha\beta}^{*r}|_{r>0} \end{aligned} \quad (A.6)$$

onde foi levado em consideração a equações da continuidade 3.37 e da quantidade de movimento 3.40.

Decompondo analogamente o operador de colisão Ω_i , tem-se

$$\Omega_i(N_1, \dots, N_b) = \Omega_i^0 + k_n \Omega_i^1 + k_n^2 \Omega_i^2 + \dots \quad (\text{A.7})$$

sendo que da própria definição de equilíbrio, $\Omega_i^0(N_1, \dots, N_b) = \Omega_i(N_1^{\text{eq}}, \dots, N_b^{\text{eq}}) = 0$.

A substituição destas decomposições na equação A.3, resulta em

$$\begin{aligned} & k_n \left(\partial_{0^*} N_i^0 + C_{i\alpha}^* \partial_{\alpha^*} N_i^0 \right) + \\ & + \frac{1}{2} k_n^2 \left(\partial_{0^*} \partial_{0^*} N_i^0 + C_{i\alpha}^* \partial_{\alpha^*} \partial_{0^*} N_i^0 + C_{i\alpha}^* C_{i\beta}^* \partial_{\alpha^*} \partial_{\beta^*} N_i^0 + \right. \\ & \left. + \partial_{0^*} N_i^1 + C_{i\beta}^* \partial_{\beta^*} N_i^1 + \partial_{1^*} N_i^0 \right) + \dots = k_n \Omega_i^1 + k_n^2 \Omega_i^2 + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Tomando somente os termos de ordem k_n , tem-se,

$$\partial_{0^*} N_i^0 + C_{i\alpha}^* \partial_{\alpha^*} N_i^0 = \Omega_i^1 \quad (\text{A.9})$$

A equação acima permite que se obtenha N_i^1 em função dos invariantes colisionais ρ e ρv . Para isso é necessário expressar o lado esquerdo da equação em termos destes invariantes e linearizar o operador Ω_i , para que se possa obter Ω_i^1 .

Escrevendo a equação A.9 nas variáveis originais

$$\partial_0 N_i^0 + C_{i\alpha} \partial_\alpha N_i^0 = \Omega_i^1 \quad (\text{A.10})$$

e substituindo $N_i^0 = N_i^{\text{eq}}(\rho, \rho v)$, obtêm-se

$$\left(\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{b - b_m}{b b_m} \delta_{\alpha\beta} \right) \partial_\beta (\rho v_\alpha) = \frac{\Omega_i^1}{t_c} \quad (\text{A.11})$$

para as partículas em movimento e

$$-\frac{1}{b} \delta_{\alpha\beta} \partial_{\beta} (\rho v_{\alpha}) = \frac{\Omega_i^1}{t_c} \quad (\text{A.12})$$

para i referindo-se às partículas em repouso.

O operador de colisão $\Omega_i(N_1, \dots, N_b) = \Omega_i(N_1^0 + k_n N_1^1 + \dots, \dots, N_b^0 + k_n N_b^1 + \dots)$ pode ser expresso como uma expansão em série de Taylor em torno de $N_i = N_i^0$. Portanto,

$$\Omega_i = \Omega_i(N_1^0, \dots, N_b^0) + \sum_{k=1}^b \frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_1^0, \dots, N_b^0} k_n N_k^1 + \dots \quad (\text{A.13})$$

Assim, tem-se

$$\Omega_i^1 = \sum_{k=1}^b \frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_1^0, \dots, N_b^0} N_k^1 \quad (\text{A.14})$$

Considerando a distribuição de equilíbrio para quando $|\mathbf{v}| = 0$, obtêm-se $N_i^0 = \frac{\rho}{b}$.

Assim, considerando a expressão 3.13, tem-se

$$\frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_j^0=f} = \sum_{s,s'} A(s,s') (s'_i - s_i) f^{\left(\sum_j s_j\right)^{-1}} (1-f)^{\left(\sum_j (1-s_j)\right)^{-1}} (s_k - f) \quad (\text{A.15})$$

Chamando $\frac{\partial \Omega_i}{\partial N_k} \Big|_{N_j^0=f} = \Lambda_{ik}$, as equações A.11 e A.12 podem ser reescritas como

$$\left(\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{b-b_m}{bb_m} \delta_{\alpha\beta} \right) \partial_{\beta} (\rho v_{\alpha}) = \frac{1}{t_c} \sum_k \Lambda_{ik} N_k^1 \quad (\text{A.16})$$

$$-\frac{1}{b} \delta_{\alpha\beta} \partial_{\beta} (\rho v_{\alpha}) = \frac{1}{t_c} \sum_k \Lambda_{ik} N_k^1 \quad (\text{A.17})$$

sendo válidas para as partículas em movimento e para as partículas em repouso, respectivamente.

As equações A.16 e A.17 definem um sistema linear na forma

$$\begin{bmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \\ C_{b_m} \end{bmatrix} = \frac{1}{t_c} \begin{bmatrix} \Lambda_{00} & \Lambda_{01} & \cdots & \Lambda_{0b_m} \\ \Lambda_{10} & \Lambda_{11} & \cdots & \Lambda_{1b_m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda_{b_m 0} & \Lambda_{b_m 1} & \cdots & \Lambda_{b_m b_m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_0^1 \\ N_1^1 \\ \vdots \\ N_{b_m}^1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.18})$$

onde

$$C_0 = -\frac{1}{b} \delta_{\alpha\beta} \partial_{\beta} \rho v_{\alpha}$$

$$C_{i>0} = \left(\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\alpha\beta} + \frac{b - b_m}{b b_m} \delta_{\alpha\beta} \right) \partial_{\beta} \rho v_{\alpha}.$$

As equações A.16 e A.17 permitem a obtenção de N_i^1 em função dos parâmetros macroscópicos, para tanto reescreve-se as equações na forma:

$$\sum_{\alpha\beta} \frac{D}{c^2 b_m} \partial_{\beta} (\rho v_{\alpha}) \begin{bmatrix} 0 \\ Q_{1\alpha\beta} \\ \vdots \\ Q_{b_m\alpha\beta} \end{bmatrix} + \frac{\sum_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} \partial_{\beta} (\rho v_{\alpha})}{b b_m} \begin{bmatrix} -b_m/b_r \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{t_c} \Lambda \cdot \begin{bmatrix} N_0^1 \\ N_1^1 \\ \vdots \\ N_{b_m}^1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.19})$$

onde b_r refere-se às partículas em repouso e Λ é a matriz $b_m \times b_m$ mostrada em A.18.

Devido à conservação da massa e da quantidade de movimento, a matriz Λ têm $(1, \dots, 1)$ e $(c_{1\alpha}, \dots, c_{b\alpha})$ como vetores característicos associados ao valor característico 0.

Considerando apenas uma partícula em repouso, os outros vetores característicos são

$$\begin{bmatrix} 0 \\ Q_{1xx} \\ Q_{2xx} \\ \vdots \\ Q_{b_m xx} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ Q_{1xy} \\ Q_{2xy} \\ \vdots \\ Q_{b_m xy} \end{bmatrix}, \dots, \begin{bmatrix} 0 \\ Q_{1zz} \\ Q_{2zz} \\ \vdots \\ Q_{b_m zz} \end{bmatrix} \quad (\text{A.20})$$

associados ao valor característico λ_Q . E também

$$\begin{bmatrix} -b_m \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.21})$$

é um vetor característico, associado ao valor característico λ_0 . Sendo que os valores λ_Q e λ_0 vão depender da forma do operador de colisão.

Os vetores característicos da matriz Λ formam uma base na qual é possível representar o vetor \mathbf{N}^1 . Chamando de $\Psi_k^{\alpha\beta}$ estes vetores característicos, escreve-se

$$\mathbf{N}^1 = \sum_k \sum_{\alpha\beta} a_k^{\alpha\beta} \Psi_k^{\alpha\beta} \quad (\text{A.22})$$

e portanto,

$$\Lambda \cdot \mathbf{N}^1 = \sum_k \sum_{\alpha\beta} a_k^{\alpha\beta} \lambda_k \Psi_k^{\alpha\beta}. \quad (\text{A.23})$$

Substituindo $\Lambda \cdot \mathbf{N}^1$ na expressão A.19, determina-se os coeficientes $a_k^{\alpha\beta}$:

$$a_Q^{\alpha\beta} = \frac{Dt_c}{\lambda_Q c^2 b_m} \partial_\beta (\rho v_\alpha) \quad (\text{A.24})$$

$$a_0 = \frac{t_c \delta_{\alpha\beta}}{b b_m \lambda_0} \partial_\beta (\rho v_\beta). \quad (\text{A.25})$$

Retornando à expressão A.22 temos então \mathbf{N}^1 como função dos parâmetros macroscópicos:

$$\mathbf{N}^1 = \sum_{\alpha\beta} a_0^{\alpha\beta} \begin{bmatrix} -b_m \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} + \sum_{\alpha\beta} a_Q^{\alpha\beta} \begin{bmatrix} 0 \\ Q_{1\alpha\beta} \\ Q_{2\alpha\beta} \\ \vdots \\ Q_{b_m\alpha\beta} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.26})$$

Reescrevendo,

$$N_0^1 = -\frac{t_c}{b\lambda_0} \partial_\beta \rho v_\beta \quad (\text{A.27})$$

$$N_i^1 = \sum_{\alpha\beta} \frac{Dt_c}{\lambda_Q c^2 b_m} Q_{i\alpha\alpha} \partial_\beta \rho v_\alpha + \frac{t_c}{b b_m \lambda_0} \partial_\beta \rho v_\beta \quad (\text{A.28})$$

Usando a equação A.8 e retornando às variáveis originais, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \partial_0 \partial_0 N_i^0 + \partial_0 \partial_\alpha N_i^0 C_{i\alpha} + \frac{1}{2} \partial_\alpha \partial_\beta N_i^0 C_{i\alpha} C_{i\beta} + \\ + \partial_0 \frac{N_i^1}{t_c} + C_{i\beta} \partial_\beta \frac{N_i^1}{t_c} + \frac{1}{t_c} \partial_1 N_i^0 = \frac{\Omega_i^2}{t_c^2} \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Multiplicando-se por C_i e somando sobre i , obtêm-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{t_c} \partial_1 \rho v_\beta + \frac{1}{t_c} \partial_\alpha \left(\sum_i N_i^1 C_{i\alpha} C_{i\beta} \right) + \\ + \frac{1}{2} \partial_\alpha \left(\sum_i C_{i\alpha} C_{i\beta} \left[\frac{D}{c^2 b_m} Q_{i\gamma\delta} + \frac{1}{b b_m} \delta_{\gamma\delta} \right] \partial_\gamma \rho v_\delta \right) = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Substituindo N_i^1 calculado anteriormente e utilizando A.1 e a definição do número de Knudsen, tem-se

$$k_n \partial_1 \rho v_\beta = \partial_\alpha \left(\frac{h_x^2}{h_t} v_2 \partial_\gamma \rho v_\gamma \right) + \partial_\alpha \left[\frac{h_x^2}{h_t} v_1 (\partial_\alpha \rho v_\beta + \partial_\beta \rho v_\alpha) \right] \quad (\text{A.31})$$

onde

$$v_1 = -\frac{c^2}{D+2} \left(\frac{1}{\lambda_Q} + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.32})$$

$$v_2 = \frac{2c^2}{D(D+2)} \left(\frac{1}{\lambda_Q} + \frac{1}{2} \right) - \left(\frac{1}{b b_m \lambda_0} + \frac{1}{b b_m} \right) \frac{b_m c^2}{D(D+2)}. \quad (\text{A.33})$$

Adicionando os termos de primeira ordem (Equação de Euler) e usando a definição A.4, obtêm-se a seguinte equação

$$\partial_t \rho v_\beta + \partial_\alpha [\rho g(\rho) v_\beta v_\alpha] = \partial_\alpha [\mu (\partial_\alpha \rho v_\beta + \partial_\beta \rho v_\alpha)] + \partial_\beta (\kappa \partial_\alpha \rho v_\alpha) - \partial_\beta P \quad (\text{A.34})$$

onde P é a pressão, $\mu = \frac{h_x^2}{h_t} v_1$ e $\kappa = \frac{h_x^2}{h_t} v_2$ são os coeficientes de viscosidade em unidades físicas.

Se for considerado um escoamento incompressível, a seguinte equação é obtida

$$\partial_t \rho v_\beta + \partial_\alpha [\rho g(\rho) v_\beta v_\alpha] = \partial_\alpha [\mu (\partial_\alpha \rho v_\beta + \partial_\beta \rho v_\alpha)] - \partial_\beta P \quad (\text{A.35})$$

que é equação de Navier-Stokes para modelos de gás em rede, a qual difere da equação da mecânica dos fluidos pela presença do fator $g(\rho)$, que como foi visto anteriormente, pode ser eliminado por uma mudança de variáveis.