

UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ

RICARDO LEITE MARTINS BAZARIN

**MODELAGEM LATTICE BOLTZMANN MULTICOMPONENTE PARA O
ESCOAMENTO DE FLUIDOS IMISCÍVEIS COM ALTAS RAZÕES DE
VISCOSIDADE**

CURITIBA

2023

RICARDO LEITE MARTINS BAZARIN

**MODELAGEM LATTICE BOLTZMANN MULTICOMPONENTE PARA O
ESCOAMENTO DE FLUIDOS IMISCÍVEIS COM ALTAS RAZÕES DE
VISCOSIDADE**

**Multicomponent Lattice Boltzmann modeling for immiscible fluid flow with
high viscosity ratio**

Tese apresentado como requisito para obtenção do título de Doutor em Engenharia do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR).

Orientador: Prof. Dr. Silvio Luiz de Mello Junqueira

Coorientador: Prof. Dr. Christian Naaktgeboren

CURITIBA

2023



[4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Esta licença permite compartilhamento, remixe, adaptação e criação a partir do trabalho, mesmo para fins comerciais, desde que sejam atribuídos créditos ao(s) autor(es). Conteúdos elaborados por terceiros, citados e referenciados nesta obra não são cobertos pela licença.



Ministério da Educação
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Campus Curitiba



RICARDO LEITE MARTINS BAZARIN

**MODELAGEM LATTICE BOLTZMANN MULTICOMPONENTE PARA O ESCOAMENTO DE FLUIDOS IMISCÍVEIS COM
ALTAS RAZÕES DE VISCOSIDADE**

Trabalho de pesquisa de doutorado apresentado como requisito para obtenção do título de Doutor Em Engenharia da Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR). Área de concentração: Engenharia Térmica.

Data de aprovação: 17 de Fevereiro de 2023

Dr. Silvio Luiz De Mello Junqueira, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Dr. Admilson Teixeira Franco, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Dr. Cezar Otaviano Ribeiro Negrao, Doutorado - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Dr. Luis Orlando Emerich Dos Santos, Doutorado - Universidade Federal de Santa Catarina (Ufsc)

Dr. Paulo Cesar Philippi, Doutorado - Pontifícia Universidade Católica do Paraná (Pucpr)

Documento gerado pelo Sistema Acadêmico da UTFPR a partir dos dados da Ata de Defesa em 17/02/2023.

RESUMO

O presente trabalho propõe o desenvolvimento de um modelo *lattice* Boltzmann multicomponente para a representação de elevadas razões de viscosidade em escoamentos imiscíveis, utilizando como referência no seu desenvolvimento os modelos descritos por Shan e Chen (1993) e Philippi *et al.* (2012). O modelo proposto é elaborado com base na utilização de esquemas de discretização de alta ordem e na adaptação de um modelo de colisão baseado em momentos. Através de análises de Chapman-Enskog que recuperam as equações governantes do modelo discretizado numericamente, demonstra-se que as equações de balanço do presente modelo eliminam erros de discretização e de modelagens presentes no modelo proposto por Shan e Chen (1993). Resultados de verificação do modelo de colisão baseado em momentos foram conduzidos para verificação da hipótese de Stokes em escoamentos incompressíveis, sendo observado que o modelo aumenta a estabilidade numérica e reduz os efeitos de compressibilidade característico do LBM, ambos mantendo a taxa de convergência de malha em segunda ordem. A validação do modelo multicomponente é feita por meio dos problemas de bolha estática, escoamento de Poiseuille para dois-componentes e deslocamento fluido-fluido, sendo analisados os comportamentos de limite de estabilidade numérica, acurácia e magnitude de correntes espúrias. Os resultados demonstram limites de estabilidade numérica para a razão de viscosidade tendendo ao infinito nos problemas de bolha estática e escoamento de Poiseuille para dois-componentes, enquanto no problema de deslocamento fluido-fluido notam-se limites na ordem de 10^4 . Nas demais análises de correntes espúrias e acurácia, observou-se conformidade dos resultados com os apresentados pelos demais modelos da literatura. Por fim, o presente modelo é empregado na representação do problema de deslocamento fluido-fluido em meio poroso, sendo observada boa capacidade de representação dos comportamentos que caracterizam os diferentes estados de deslocamento, assim como altas faixas de estabilidade numérica da razão de viscosidade na ordem de 10^{-6} até 10^6 , dependendo do número de capilaridade.

Palavras-chave: *lattice* boltzmann; fluidos imiscíveis; modelagem multicomponente; modelo pseudo-potencial; deslocamento de fluido.

ABSTRACT

The present work proposes the development of a multicomponent *lattice* Boltzmann model for the representation of high viscosity ratios in immiscible flows, using as reference in its development the models described by Shan e Chen (1993) and Philippi *et al.* (2012). The proposed model is based on the use of high-order discretization schemes and on the adaptation of a moments-based collision model. Through Chapman-Enskog analyses, which recover the balance equations of the numerically discretized model, it is demonstrated that the balance equations of the developed model eliminate discretization and modeling errors present in the model proposed by Shan e Chen (1993). Verification results of the moments-based collision model were conducted to verify the Stokes hypothesis in incompressible flows, being observed that the model increases numerical stability and reduces the compressibility effects characteristic of LBM, both while maintaining the second-order grid convergence rate. The multicomponent model validation is done through problems of static bubble, Poiseuille flow for two-components and fluid-fluid displacement, analyzing the numerical stability limit behaviors, accuracy, and magnitude of spurious currents. The results demonstrate numerical stability limits for the viscosity ratio tending to infinity in the problems of static bubble and Poiseuille flow for two-components, while in the fluid-fluid displacement problem were reached stability in the order of 10^4 . In the other analyzes of spurious currents and accuracy, the results were consistent with those presented by the other models in the literature. Finally, the present model is employed in the representation of the fluid-fluid displacement problem in porous media, being observed a good capacity to represent the behaviors of distinct displacement states, as well as a high numerical stability of the viscosity ratio in the order of 10^{-6} to 10^6 , depending on the capillary number.

Keywords: *lattice* boltzmann; immiscible fluids; multicomponent modeling; pseudo-potential model; fluid displacement.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Processo de evolução do sistema no método de Lattice-Gas Automata: (a) colisão; (b) transmissão (Adaptado de: Krüger <i>et al.</i> (2017)).	18
Figura 2 – Estados de deslocamento em meio poroso: a) <i>viscous fingering</i> ; b) <i>capillary fingering</i> ; c) deslocamento estável (Adaptado de : Tsuji, Jiang e Christensen (2016)).	21
Figura 3 – Volume de controle no modelo de interface singular (Fonte: Siebert (2013)).	25
Figura 4 – Evolução temporal de sistemas multicomponentes: a) coalescência de bolhas (Adaptado de: Huang, Sukop e Lu (2015)); b) segregação de fluidos (Adaptado de: Philippi <i>et al.</i> (2012))	27
Figura 5 – Diagrama de estados de deslocamento: a) <i>viscous fingering</i> ; b) <i>capillary fingering</i> ; c) deslocamento estável. Adaptado de Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) e Tsuji, Jiang e Christensen (2016).	31
Figura 6 – Conversão da função distribuição contínua em discreta, no espaço de Hilbert	43
Figura 7 – <i>Lattices</i> : a) unidimensional com três velocidade (D1Q3); b) bidimensional com nove velocidades (D2Q9); c) tridimensional com vinte e sete velocidades (D3Q27) (Adaptado de: Krüger <i>et al.</i> (2017)).	44
Figura 8 – Geometria dos <i>lattices-multispeed</i> D2V17 ($N = 3$), D2V33 ($N = 3$), D2V37 ($N = 4$) (Fonte: Siebert (2013)).	45
Figura 9 – Diagrama de relação entre a equação de Boltzmann discreta no espaço de velocidades e as equações hidrodinâmicas macroscópicas.	47
Figura 10 – Diagrama de relação entre as formas da equação de Boltzmann e as equações macroscópicas de Hidrodinâmica.	51
Figura 11 – Fluxograma da estrutura numérica da abordagem <i>lattice</i> Boltzmann multicomponente.	77
Figura 12 – Campo de vorticidade para os comprimentos de malha de (a) 32, (b) 96, (c) 288 and (d) 864 unidades <i>lattices</i> . Os campos foram coletados nos tempos $T_{over} = 1$. e $T_{over} = 1.5$ paras as fileiras superior e inferior, respectivamente.	81

Figura 13 – Esquema de comparação dos pontos de malha para o cálculo do erro L_2. Os pontos em vermelho são os pontos de comparação determinados pela malha mais grosseira.	81
Figura 14 – Teste de estabilidade: máximo número de Reynolds atingível como função do número de Mach. O teste é performed considerando uma malha de 129×129 pontos. O sobrescrito * indica os resultados que foram obtidos de Mattila, Philippi e Hegele (2017).	83
Figura 15 – Formação de vórtice para $Re = 10000$ na geometria do problema de cavidade de tampa deslizante bidimensional. A tampa em $y = L$ se move com velocidade U_0.	85
Figura 16 – Isolinhas de corrente e vorticidade para (a) $Re = 100$, (b) $Re = 400$, (c) $Re = 1000$, (d) $Re = 3200$ and (e) $Re = 5000$. Na linha superior é ilustrado as linhas de corrente e na inferior as linhas de vorticidade. . .	85
Figura 17 – Resultados numéricos em $Re = 400, 1000$ e 5000 para: a) velocidade horizontal u_x/U_0 ao longo da linha média $x = L/2$; b) velocidade vertical u_y/U_0 ao longo da linha média $y = L/2$ da cavidade. Os resultados são comparados com Ghia, Ghia e Shin (1982), Botella e Peyret (1998) e Erturk, Corke e Gökçöl (2005).	86
Figura 18 – Teste de convergência de malha para $Re = 100, 400$ and 1000: (a) escala convectiva; (b) escala difusiva. As linhas tracejadas e pontilhas representam os casos com condições de contorno HW e MB, respectivamente.	87
Figura 19 – Teste de estabilidade: máximo número de Reynolds atingível em função de L variando de 40 até 400 para a) $Ma = 0.2165$ e b) $Ma = 0.1082$. A ausência dos resultados do modelo Stokesiano com HW em a) e ambos, Stokesiano com MB e HW em b), ocorrem devido as simulações permanecerem estáveis em $Re \rightarrow \infty$.	88
Figura 20 – Representação esquemática do problema de bolha estática.	92
Figura 21 – Teste de faixa de imiscibilidade variando a razão de viscosidade: as linhas em vermelho e preto representam os resultados obtidos pelos lattices D2Q9 e D2V141, respectivamente.	93

Figura 22 – Comparação do perfil de densidade do <i>lattice</i> D2Q9 (vermelho) com o D2V141 (preto): (a) perfil de densidade ao longo de x e $y = H/2$; (b) imagem com zoom da interface transição.	93
Figura 23 – Tensão interfacial: verificação da equação de Young-Laplace para diferentes valores de M_ν , $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$	94
Figura 24 – Análise de correntes espúrias: valores de $ u _{max}$ como função de (a) ν_1 para $M_\nu = 1$ e (b) M_ν para $\nu_1 = 0.0067$	96
Figura 25 – Variação de correntes espúrias em função $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. Nas colunas (a) e (b) são ilustradas para os <i>lattices</i> D2Q9 e D2V141, respectivamente, os valores de $ u _{max}$ para as variações de ν_1 em $M_\nu = 1$ e M_ν em $\nu_1 = 0.0067$	97
Figura 26 – Representação esquemática do escoamento de Poiseuille para dois-componentes.	97
Figura 27 – Comparações entre os perfis de velocidade numérico (pontos) e analítico (linha): (a) 10^{-1} , (b) 10^1 , (c) 10^{-6} , (c) 10^6 . As velocidade plotadas são normalizadas pela velocidade analítica máxima u_{max}	98
Figura 28 – Comparação entre os resultados de permeabilidade relativa (k_{rp}) analíticos e numéricos para (a) $M_\nu > 10^0$ e (b) $M_\nu < 10^0$	99
Figura 29 – Deslocamento fluido-fluido: geometria, condições iniciais e de contorno.	101
Figura 30 – Numero de Atwood dos padrões <i>finger</i> obtidos para $M_\nu = 10^4$ e (a) $Ca = 0.6$, (b) $Ca = 1.1$, (c) $Ca = 1.6$, e (d) $Ca = 2.1$	102
Figura 31 – Espessura de <i>finger</i> normalizada (a_f/H) em função do número de capilaridade (Ca): comparação da Eq.(231) em diferentes valores de razão de viscosidade.	103
Figura 32 – Simplificações geométricas e dimensionais de representação do meio poroso.	104
Figura 33 – Geometria porosa em padrão escalado: a) meio poroso completo; b) volume elementar representativo do padrão escalado; c) aproximação em escadaria.	105
Figura 34 – Condições iniciais e de contorno no processo de deslocamento fluido-fluido em meio poroso.	106
Figura 35 – Esquema de comparação entre malhas no cálculo do E_{med} . Os pontos vermelhos representam os centros dos elementos de malhas.	108

Figura 36 – Comparação das malhas 80×138, 160×276 e 320×552, de simulação do caso crítico $M_\nu = 10^{-3}$ e $Ca = 10^{-3}$. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente	109
Figura 37 – Faixa de estabilidade numérica de Ca e M_ν para a malha de 160×284. Considerando as faixas de análise para $10^{-6} \leq M_\nu \leq 10^6$ e de $10^0 \leq Ca \leq 10^{-10}$. As linhas tracejadas e pontilhadas circundam as zonas de tendência de cada estado de deslocamento	110
Figura 38 – Transição do estado de <i>viscous fingering</i> para deslocamento estável. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente	111
Figura 39 – Transição do estado de deslocamento estável para <i>capillary fingering</i>. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente	112
Figura 40 – Transição do estado de deslocamento estável para <i>capillary fingering</i>: a) resultados numéricos do presente modelo para $M_\nu = 10^{-3}$ em $Ca = 10^{-3}$, 10^{-4} e 10^{-5}; b) resultados experimentais de Zhang <i>et al.</i> (2011) para $M_\nu = 10^{-1,88}$ em $Ca = 10^{-2,69}$, 10^{-4} e $10^{-4,57}$.	113
Figura 41 – Transição do estado de <i>capillary fingering</i> para <i>viscous fingering</i>. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente	114

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	– Valores de e_i e W_i do <i>lattice</i> D2V141. O valores p representam o número de vetores velocidade obtidos por suas permutações.	68
Tabela 2	– Erro L_2 e taxa de convergência $\hat{\alpha}$ para (A) modelo BGK, (B) Regularizado, e (C) modelo Stokesiano.	82
Tabela 3	– Dependência do RMS do divergente da velocidade no número de Reynolds (Re), número de Mach (Ma) e comprimento de malha (L). (A) modelo BGK, (B) Regularizado e (C) Stokesiano.	84
Tabela 4	– Dependência do RMS do divergente da velocidade com relação ao número de Reynolds (Re) e tamanho de malha (L). Os resultados para os modelos MRT, TRT, e BGK foram obtidos de Luo <i>et al.</i> (2011).	89
Tabela 5	– Erros de permeabilidade relativa: comparação com Porter <i>et al.</i> (2012).	100
Tabela 6	– Valores estimados de análise do número de capilaridade e razão de viscosidade, para o processo de transição entre diferentes estados de deslocamento.	110
Tabela 7	– Exemplos de notações para variáveis escalares, vetoriais, tensoriais e produtos.	124
Tabela 8	– Formulação das condições de contorno implementadas nas camadas e quinas do problema de tampa deslizante.	148

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

Abreviaturas

Eq.	Equação
Eqs.	Equações
i.e.	isto é
Sec.	Seção

Siglas

BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
CFD	Dinâmica dos fluidos computacional (<i>computational fluid dynamics</i>)
DI	Dinâmica interfacial
LB	<i>lattice</i> Boltzmann
LBM	método de <i>lattice</i> Boltzmann (<i>lattice Boltzmann method</i>)
LGA	Lattice-Gas Automata
MRT	Multi-tempos de relaxação (<i>multi-relaxation-time</i>)

LISTA DE SÍMBOLOS

a_s	potencial intermolecular	$\left[\frac{m^5}{kg \cdot s^2} \right]$
At	número de Atwood	$[-]$
\mathcal{A}	Tensor coeficiente de expansão	$[-]$
b	volume da partícula	$[m^3]$
c_s	velocidade do som	$[m/s]$
\mathbf{c}	vetor velocidade molecular peculiar	$[m/s]$
Ca	número de capilaridade	$[-]$
d_{ef}	diâmetro efetivo da partícula	$[m]$
D	dimensão	$[-]$
D_t	derivada advectiva	$[-]$
e	energia total específica	$[J/kg]$
\mathbf{e}	vetor velocidade de rede	$[-]$
f	função distribuição	$\left[\left(\frac{1}{m^D} \right) \left(\frac{m}{s} \right)^D \right]$
F	termo de força externa	$\left[\left(\frac{1}{s \cdot m^D} \right) \left(\frac{m}{s} \right)^D \right]$
F_C	forças capilares por volume	$[N/m^3]$
\mathbf{g}	força por unidade de massa	$[N/kg]$
$G^{(pp)}$	força de interação entre componentes	$[-]$
H	altura	$[m]$
\mathcal{H}	tensor polinômio de Hermite	$[-]$
\mathbf{I}	matriz identidade	$[-]$
k	condutividade térmica	$\left[\frac{W}{m \cdot K} \right]$
k_b	constante de Boltzmann	$\left[\frac{m^2 \cdot kg}{s^2 \cdot T} \right]$
k_r	permeabilidade relativa	$[m^2]$
Kn	número de Knudsen	$[-]$
Kn_t	relação de escalas de tempo	$[-]$
ℓ_c	livre caminho médio	$[m]$
L	comprimento	$[m]$
\dot{m}	fluxo de massa	$\left[\frac{kg}{m^2 \cdot s} \right]$
\mathbf{m}	vetor momento de não equilíbrio de primeira ordem	$\left[\frac{kg}{m^2 \cdot s} \right]$
M_ν	razão de viscosidade cinemática	$[-]$

Ma	número de Mach	$[-]$
\mathbf{n}	vetor unitário normal a face	$[-]$
N_b	número de velocidades	$[-]$
\mathcal{O}	ordem de escala	$[-]$
p	pressão	$[Pa]$
P_s	pressão escalar	$[Pa]$
P_e	pressão termodinâmica	$[Pa]$
\mathbf{P}	tensor de segunda ordem	$[Pa]$
\mathcal{P}	tensor de Pressão	$[Pa]$
\mathbf{q}	vetor fluxo de calor	$\left[\frac{J}{m^2 \cdot s} \right]$
\mathbf{q}_s	vetor fluxo de entropia	$\left[\frac{J}{m^2 \cdot K \cdot s} \right]$
\mathbf{Q}	tensor de terceira ordem	$\left[\frac{Pa \cdot m}{s} \right]$
r	raio	$[m]$
\mathbf{R}	tensor de quarta ordem	$\left[\frac{Pa \cdot m^2}{s^2} \right]$
Re	número de Reynolds	$[-]$
s	entropia por unidade de massa	$\left[\frac{J}{kg \cdot K} \right]$
Sr	número de Strouhal	$[-]$
\mathbf{S}	tensor de Kortweg	$[Pa]$
t	tempo	$[s]$
t_c	tempo médio de colisão	$[s]$
\mathbf{t}	vetor unitário tangencial a face	$[-]$
T	temperatura	$[K]$
\mathbf{u}	vetor velocidade	$[m/s]$
U_{max}	velocidade escalar máxima	$[m/s]$
U_s	velocidade do som	$[m/s]$
V_{D_2}	energia potencial por unidade de massa	$[J/kg]$
x	coordenada cartesiana	$[m]$
\mathbf{x}	vetor posição	$[m]$
w	função peso	$[-]$
W	fator de ponderação	$[-]$
y	coordenada cartesiana	$[m]$
z	coordenada cartesiana	$[m]$
∇	operador Nabla	$[-]$

Letras Gregas

γ	tensão interfacial	$[N/m]$
δ_t	passo de tempo	$[-]$
$\delta_{\alpha\beta}$	delta de Dirac	$[-]$
δ_p	diâmetro de poro	$[m]$
ϵ	energia cinética de flutuação	$[N.m]$
ϵ_{KH}	perturbação perpendicular	$[-]$
θ	temperatura normalizada	$[-]$
Θ	desvio relativo de temperatura	$[-]$
κ	potencial intermolecular	$\left[\frac{m^7}{kg.s^2} \right]$
λ	viscosidade volumétrica	$[Pa.s]$
λ_{KH}	espessura da camada de cisalhamento	$[-]$
Λ_s	termo de geração de entropia	$\left[\frac{J}{m^3.K.s} \right]$
μ	viscosidade dinâmica	$[Pa.s]$
ν	viscosidade cinemática	$[m^2/s]$
ξ_{med}	velocidade média da partícula	$[m/s]$
ξ	vetor velocidade da partícula	$[m/s]$
π	número pi	$[-]$
Π	tensor tensão	$[N/m^2]$
ρ	densidade	$[kg/m^3]$
ϕ	porosidade	$[-]$
τ	tempo de relaxação	$[s]$
χ	fração mássica	$[-]$
ψ	energia livre de helmholtz	$[J/m^3]$
Ψ	massa virtual	$[kg/m^3]$
Ω	operador de colisão	$\left[\left(\frac{1}{m^D} \right) \left(\frac{m}{s} \right)^D \right]$

Subscritos

1	referente ao fluido 1
2	referente ao fluido 2
<i>att</i>	atração
<i>d</i>	fluido deslocado

<i>i</i>	referente aos pontos de discretização ou fluido injetado
<i>med</i>	referente ao valor médio
<i>p</i>	referente ao poro
<i>ref</i>	referente à um parâmetro de referência
<i>rep</i>	repulsão
<i>total</i>	referente ao valor total
<i>x</i>	referente à coordenada
<i>y</i>	referente à coordenada
<i>z</i>	referente à coordenada
σ	referente às fases 1 e 2
$\bar{\sigma}$	referente à fase oposta de σ

Sobrescritos

$\hat{\quad}$	referente à função distribuição implícita
*	referente aos parâmetros adimensionais na escala mesoscópica
<i>eq</i>	referente ao estado de equilíbrio
<i>it</i>	referente à iteração
<i>neq</i>	referente ao estado de não equilíbrio
(<i>p</i>)	referente ao componente <i>p</i>
<i>T</i>	matriz transposta

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	Modelagem Multicomponente	18
1.2	Deslocamento Fluido-Fluido em Meios Porosos	20
1.3	Objetivos	21
1.4	Organização do Trabalho	21
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	23
2.1	Equações de Balanço Hidrodinâmico e Termodinâmico	23
2.2	Formulação para Escoamento Incompressível e Isotérmica	24
2.3	Modelagem Macroscópica da Dinâmica Interfacial	25
2.3.1	Modelo de Interface Singular	25
2.3.2	Modelo de Interface Difusa	27
2.4	Deslocamento fluido-fluido em meios porosos	29
3	MODELAGEM LATTICE BOLTZMANN	33
3.1	Equação de Boltzmann	33
3.1.1	Adimensionalização	33
3.1.2	Termo de Colisão	35
3.1.3	Função Distribuição de Equilíbrio e Propriedades Macroscópicas	37
3.1.4	Projeção da Função Distribuição em Bases de Hermite	38
3.1.5	Equações Macroscópicas de Equilíbrio (Equações de Euler)	40
3.1.6	Equações de Navier-Stokes e Além - Análise de Chapman-Enskog	40
3.2	Equação de Boltzmann Discreta no Espaço de Velocidades	42
3.3	Equação <i>Lattice Boltzmann</i>	47
3.3.1	Discretização de Primeira e Segunda Ordem	48
3.3.2	Análise de Chapman-Enskog	49
4	MODELO LB MULTICOMPONENTE	52
4.1	Modelo Cinético Multicomponente	52
4.2	Modelo LB pseudo-potencial	54
4.2.1	Análise de Chapman-Enskog	57
4.2.1.1	Abordagem de Shan e Doolen (1995)	57
4.2.1.2	Abordagem Proposta	59

4.2.2	Comparação: pseudo-potencial e modelo cinético	62
4.3	Modelo Aprimorado	62
4.3.1	Tempo de Relaxação	63
4.3.2	Termo de Força Explícito	64
4.3.3	Discretização de Segunda Ordem do Espaço-Tempo	64
4.3.4	Termo de Colisão Baseado em Momentos	65
4.3.5	Modelo de Força	66
4.3.6	Análise de Chapman-Enskog	67
4.3.7	Equação Lattice Boltzmann	75
4.4	Discussões e Comparações	76
5	RESULTADOS DE VERIFICAÇÃO - MONOCOMPONENTE	79
5.1	Instabilidade de Kelvin-Helmholtz	79
5.1.1	Teste de convergência de malha	80
5.1.2	Teste de estabilidade	82
5.1.3	Efeito de compressibilidade	83
5.2	Cavidade com tampa deslizante	84
5.2.1	Acurácia	85
5.2.2	Teste de convergência de malha	86
5.2.3	Teste de Estabilidade	87
5.2.4	Efeito de Compressibilidade	88
5.3	Considerações	89
6	PROBLEMAS MULTICOMPONENTE	91
6.1	Bolha Estática	91
6.1.1	Teste de Faixa de Imiscibilidade	92
6.1.2	Tensão Interfacial	93
6.1.3	Correntes Espúrias	94
6.1.4	Estabilidade Numérica	95
6.2	Escoamento de Poiseuille para Dois-Componentes	96
6.3	Deslocamento Fluido-Fluido	100
6.4	Considerações	102
7	DESLOCAMENTO FLUIDO-FLUIDO EM MEIO POROSO	104
7.1	Geometria do Meio Poroso	104

7.2	Implementação <i>lattice</i> Boltzmann	105
7.3	Resultados	107
7.3.1	Teste de Malha	107
7.3.2	Estabilidade Numérica	108
7.3.3	<i>Viscous Fingering</i> - Deslocamento Estável	110
7.3.4	Deslocamento Estável - <i>Capillary Fingering</i>	111
7.3.5	<i>Capillary Fingering</i> - <i>Viscous Fingering</i>	113
7.4	Considerações	114
8	CONCLUSÕES	115
	REFERÊNCIAS	117
	APÊNDICE A NOTAÇÕES	124
	APÊNDICE B POLINÔMIOS DE HERMITE	126
	B.1 Relação 1	127
	B.2 Relação 2	127
	B.3 Propriedade de Ortogonalidade	128
	B.4 Projeção em polinômios de Hermite	129
	APÊNDICE C ANÁLISE DE CHAPMAN-ENSKOG DO MODELO	
	PSEUDO-POTENCIAL	132
	C.1 Análise de Shan e Doolen (1995)	135
	C.2 Análise Proposta	140
	APÊNDICE D CONDIÇÕES DE CONTORNO	147

1 INTRODUÇÃO

Tanto na natureza como em processos industriais encontram-se problemas que envolvem a interação de diferentes fases da matéria (multifásicos) e de diferentes componentes (multicomponentes), sendo considerado como fase o estado da matéria que pode ser líquido, sólido ou gasoso, e componente o constituinte químico, como exemplo água (H_2O) e dióxido de carbono (CO_2). Tais problemas multifásicos/multicomponentes atualmente despertam grande interesse científico devido às suas aplicações comerciais, a exemplo do deslocamento de fluidos no processos de recuperação avançada de petróleo (MUGGERIDGE *et al.*, 2014a), transição de fase em motores de combustão interna (CHOI; LEE; KANG, 2019) e ebulição de água em caldeiras industriais (BALCI; EZAN; TURHAN, 2019).

Com o desenvolvimento tecnológico, em específico os avanços na capacidade processamento computacional, a possibilidade de substituição de testes experimentais por simulações numéricas tornaram-se cada vez mais atraentes (ANDERSON, 1995). Na área dos problemas multifásicos/multicomponentes o elevado custo de produção e operação de bancadas experimentais em comparação com o baixo custo dos computadores de alto poder de processamento, favoreceram e favorecem o desenvolvimento de métodos numéricos capazes de simularem problemas cada vez mais complexos de dinâmica dos fluidos. Desde a década de 1960, que data o início da dinâmica dos fluidos computacional (CFD, *computational fluid dynamics*) com os métodos numéricos de diferenças finitas e volumes finitos (WENDT, 2008), novos métodos surgiram com abordagens diversas de representação e discretização das equações fluidodinâmicas. Passando por um processo de seleção natural, os métodos que melhor se adaptaram, minimizando deficiências operacionais e possibilitando maiores representações físicas, permaneceram e continuaram ganhando destaque na literatura. Neste sentido, o método de *lattice* Boltzmann tem se destacado na simulação de escoamentos entorno de geometrias complexas, na capacidade de representação física em problemas multifásicos/multicomponentes, assim como na alta eficiência computacional em processos de paralelização (GUO; ZHENG; SHI, 2002; HUANG; SUKOP; LU, 2015).

Historicamente, o método de *lattice* Boltzmann surgiu como aprimoramento do método autômato celular, denominado de Lattice-Gas Automata (LGA). O LGA teve origem no artigo publicado por Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986), que propôs um método de escala microscópica, onde um sistema de partículas com abordagem booleana é capaz de reproduzir comportamentos macroscópicos de um fluido. O sistema de partículas que constitui o fluido fica restrito à ocupação de direções em pontos de uma rede regular, e a evolução deste sistema é dada pela colisão das partículas (Figura 1 (a)) e pela transmissão destas para os pontos de rede vizinhos (Figura 1 (b)). A estrutura do método LGA chamou atenção por sua configuração intuitiva na resolução de problemas físicos complexos. Consequentemente diversos trabalhos buscaram o seu aprimoramento, tendo como destaque o trabalho de McNamara e Zanetti (1988), que propôs modelar o método utilizando a equação de Boltzmann, substituindo a abordagem

booleana por uma representação probabilística das partículas. Tal modificação proposta por McNamara e Zanetti (1988) marca na década 1980 a transição do método LGA para o método de *lattice* Boltzmann (LBM, *Lattice Boltzmann Method*). Posteriormente, He, Shan e Doolen (1998) e Abe (1997) demonstraram que o método consiste de uma forma discretizada da equação de Boltzmann. As relações com a equação de Boltzmann suportam o método em conceitos de mecânica estatística clássica, em específico na teoria cinética de gases, ampliando o seu horizonte e a sua capacidade para a representação de fenômenos físicos complexos.

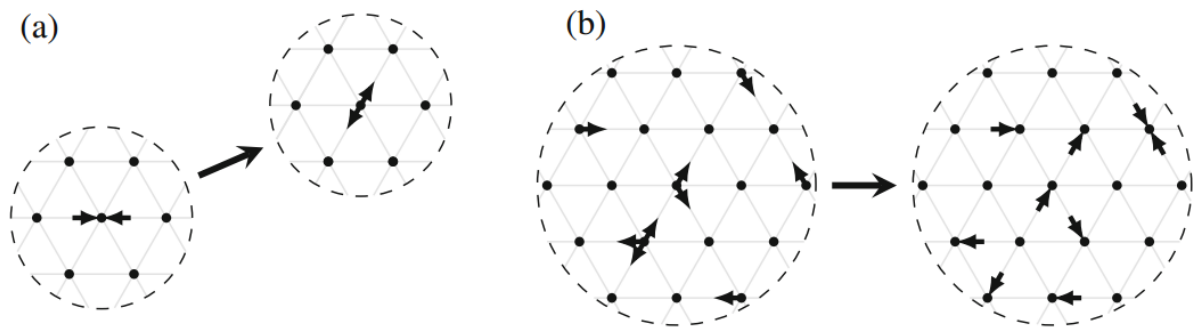


Figura 1 – Processo de evolução do sistema no método de Lattice-Gas Automata: (a) colisão; (b) transmissão (Adaptado de: Krüger *et al.* (2017)).

1.1 Modelagem Multicomponente

Especificamente na modelagem dos problemas multicomponentes imiscíveis, a interface entre os fluidos é caracterizada por uma camada de transição onde as moléculas de cada fluido são submetidas a dois processos contrapostos. O primeiro processo refere-se ao movimento térmico aleatório das moléculas, o que tende a misturar os fluidos. Enquanto o segundo é relativo às forças de atração intermoleculares entre cada molécula do componente, o que tende a segregar os fluidos. A predominância das forças atrativas sobre o movimento térmico aleatório leva à segregação, *i.e.*, a um comportamento imiscível com uma interface bem definida e descrita por gradientes de densidade e viscosidade.

Do ponto de vista físico e numérico, a descrição realista da interface fluido-fluido permanece como um complexo desafio para a modelagem multicomponente do LBM (PHILIPPI *et al.*, 2012). O LBM *framework* não é capaz de representar diretamente o movimento térmico aleatório e a atração entre moléculas da escala microscópica. Contudo, as modelagens numéricas de *lattice* Boltzmann (LB) se concentram na descrição dos processos de mistura e segregação em uma escala mesoscópica com base em formas discretas das equações cinéticas. As modelagens LB de sistemas multicomponentes imiscíveis são basicamente representadas por: modelos de força, como gradiente de cor (GUNSTENSEN *et al.*, 1991; GUNSTENSEN; ROTHMAN, 1992) e pseudo-potencial (SHAN; CHEN, 1993; SHAN; CHEN, 1994); e modelos de pressão, como energia-livre (SWIFT; OSBORN; YEOMANS, 1995; SWIFT *et al.*, 1996) e

rastreamento de interface (HE; CHEN; ZHANG, 1999; LEE; LIN, 2005)), ambos baseados na representação da equação modelo de Cahn-Hilliard (HUANG; SUKOP; LU, 2015). Cada uma destas modelagens tem suas próprias vantagens e desvantagens nas simulações dos sistemas multicomponentes, mas todas buscam representações de elevadas razões de viscosidade e densidade (relação de viscosidade e densidade entre os componentes do sistema), baixas correntes espúrias (fluxo de escoamento resultante de erros numéricos que ocorrem próximos da interface entre os componentes), menor dissolução de pequenas bolhas, baixo custo computacional e outras características de interesse para simulações de problemas complexos de engenharia (LIU *et al.*, 2016a).

Neste contexto, o presente trabalho volta-se ao desenvolvimento de um modelo numérico aprimorado para representação de sistemas multicomponentes de fluidos imiscíveis. Com esta finalidade, o modelo é desenvolvido utilizando-se de discretizações de alta ordem e de modelagens de interface que possibilitam atingir estabilidade numérica e acurácia em elevadas razões de viscosidade, assim como mitigar efeitos de correntes espúrias. Outras características desejadas em modelos multicomponentes, como elevada razão de densidade entre os fluidos e baixa dissolução de pequenas bolhas, não serão exploradas no presente trabalho, deixando-as como sugestão para uma próxima etapa de estudo e desenvolvimento do presente modelo.

Numa revisão da literatura relacionada a presente proposta, foram destacados apenas trabalhos voltados ao desenvolvimento/aprimoramento de modelos LB multicomponentes com foco na representação de elevadas razões de viscosidade cinemática na interface de fluidos imiscíveis de densidades idênticas. Deste modo, destacam-se os trabalhos:

- Ginzburg (2007) desenvolveu um modelo de gradiente de cor utilizando componentes de colisão descontínuas com multi-tempos de relaxação (multi-relaxation-time, MRT), capaz de atingir razões de viscosidade da ordem de 10^4 para escoamento de Poiseuille com dois componentes.
- Porter *et al.* (2012) utilizaram um modelo LB pseudo-potencial com termo de força explícito, discretização de segunda ordem do espaço-tempo, discretização de alta ordem dos termos de derivada espacial do cálculo de forças, e modelo de colisão MRT, resultando em correntes espúrias máximas na ordem de 10^{-3} e razões de viscosidade de até 10^3 para os problemas de bolha estática e escoamento de Poiseuille com dois componentes.
- Otomo *et al.* (2018) aplicaram no modelo LB pseudo-potencial o método de regularização proposto por Latt e Chopard (2006), explicitação do termo de força e discretização de primeira ordem do espaço-tempo, atingindo razão de viscosidade e correntes espúrias nas mesmas ordens de magnitude encontradas por Porter *et al.* (2012).

- Liu *et al.* (2016b) propuseram um modelo de gradiente de cor com modelo de colisão MRT capaz de simular razões de viscosidade na ordem 10^4 e correntes espúrias máximas na ordem de 10^{-6} no problema de bolha estática.
- Gharibi e Ashrafizaadeh (2020) aprimoraram o modelo LB pseudo-potencial utilizando o termo de força explícito, discretização de alta ordem dos termos derivada espacial e modelo de colisão em cascata modificado com momentos centrais não-ortogonais, obtendo correntes espúrias máximas na ordem de 10^{-4} e alcançando resultados para razão de viscosidade na ordem 10^4 nos mesmos problemas estudados por Porter *et al.* (2012).

Nos trabalhos que utilizaram os modelos pseudo-potencial e de gradiente de cor, notaram-se limites de variação da razão de viscosidade na ordem 10^3 e 10^4 , respectivamente. Enquanto para as correntes espúrias, observaram-se valores máximos na ordem de 10^{-4} e 10^{-6} para os modelos pseudo-potencial e gradiente de cor, respectivamente.

Modelos LB multicomponentes baseados na equação de Cahn-Hilliard não estão destacados na revisão da literatura devido à sua incapacidade de variação da razão de viscosidade cinemática, resultante da utilização de um único tempo de relaxação para representação de ambas viscosidades cinemáticas da mistura fluido-fluido. Nestes modelos são possíveis apenas variações da razão de viscosidade dinâmica pela diferença de densidade dos fluidos.

1.2 Deslocamento Fluido-Fluido em Meios Porosos

Na continuidade do presente trabalho, aplica-se o modelo multicomponente desenvolvido para a representação do problema de deslocamento fluido-fluido em meios porosos, o qual é caracterizado pela interação de fluidos imiscíveis através de um meio poroso, onde o fluido injetado desloca o fluido presente nos poros, como ilustrado na Figura 2. Este processo de deslocamento é um problema complexo e de grande interesse da indústria de petróleo devido à sua ocorrência nas etapas de recuperação de petróleo secundária e de *enhanced oil recovery* (EOR). Nestas etapas, líquidos ou gases são injetados no reservatório com o objetivo de deslocar o petróleo presente na formação porosa em direção aos poços de produção (DONALDSON; CHILINGARIAN; YEN, 1989; MUGGERIDGE *et al.*, 2014a).

A finalidade desta aplicação é observar a capacidade de representação do presente modelo LB multicomponente para os casos limites de razão de viscosidade no processo de deslocamento fluido-fluido. Estando estes limites relacionados à caracterização dos diferentes padrões de estado de deslocamento, *i.e.*, *viscous fingering*, *capillary fingering* e deslocamento estável, ilustrados na Figura 2. Os cenários de representação de cada estado de deslocamento e conceitos que fundamentam este problema são detalhados na Seção 2.4. Enfim, as verificações deste problema tem como objetivo estabelecer o presente modelo LB como uma ferra-

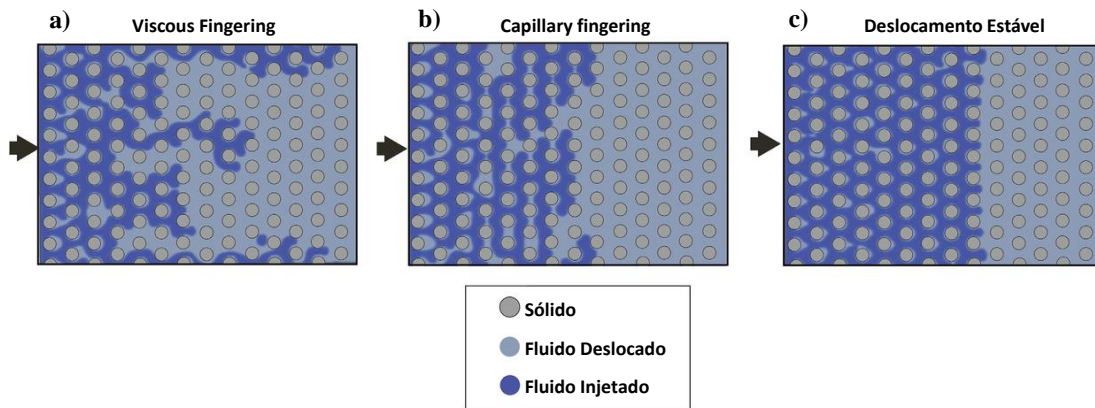


Figura 2 – Estados de deslocamento em meio poroso: a) *viscous fingering*; b) *capillary fingering*; c) deslocamento estável (Adaptado de : Tsuji, Jiang e Christensen (2016)).

menta extensível para a simulação da física dos processos de deslocamento fluido-fluido em rochas digitais.

1.3 Objetivos

Em suma, o objetivo geral deste trabalho é o desenvolvimento de um modelo LB multi-componente aprimorado para a representação do escoamento de fluidos imiscíveis com altas razões de viscosidade. Sendo a modelagem LB desenvolvida a partir do modelo pseudo-potencial proposto por Shan e Chen (1993), e aprimorado na direção de uma modelagem cinética termodinamicamente consistente, como exemplificada pelo modelo cinético de Philippi *et al.* (2011).

Secundariamente, como objetivos específicos, espera-se:

- identificar erros de discretização e de modelagem no modelo pseudo-potencial, os quais possam ser corrigidos para o aprimoramento do modelo;
- minimizar os efeitos de correntes espúrias característicos da modelagem discreta LB multicomponente;
- verificar as capacidades do modelo para a representação do problema de deslocamento fluido-fluido em meios porosos, observando suas faixas de estabilidade numérica e as características físicas que descrevem o processo de escoamento dos fluidos.

1.4 Organização do Trabalho

O presente documento encontra-se dividido em 8 capítulos, incluindo este que apresenta os seus cenários e objetivos. Seguindo uma ordem coerente de desenvolvimento, tem-se:

- No Capítulo 2 é abordado a formulação hidrodinâmica multicomponente, com o foco na representação da dinâmica interfacial entre os fluidos. As equações macroscópi-

cas que descrevem o presente problema são apresentadas e a utilização do modelo de interface difusa é justificada por conceitos termodinâmicos e capacidade de representação física. Por fim, a formulação multicomponente desenvolvida é empregada na análise e caracterização do problema de deslocamento fluido-fluido em meio poroso.

- No capítulo seguinte é apresentado a modelagem *lattice* Boltzmann voltada para a descrição de sistemas multicomponentes. A abordagem LBM é desenvolvida por seções, partindo da equação contínua de Boltzmann até sua forma discreta no espaço de velocidades e no espaço-tempo, assim representando a equação *lattice* Boltzmann.
- No Capítulo 4 foca-se no desenvolvimento do modelo *lattice* Boltzmann multicomponente. Utilizando como referência os modelos propostos por Philippi *et al.* (2012) e Shan e Chen (1993), o presente modelo segue a aplicação de discretizações de alta ordem e a adaptação de um modelo de colisão baseado em momentos. Análises de Chapman-Enskog são conduzidas para comparações das equações macroscópicas dos modelos envolvidos.
- Com base na proposta de aplicação do termo de colisão baseado em momentos feita na Seção 4.3.4, no Capítulo 5 são desenvolvidas análises monocomponente para verificação das influências e comportamentos de representação do termo colisão em problemas isotérmicos e incompressíveis. Em específico, são empregados nas análises os problemas de instabilidade de Kelvin-Helmholtz e cavidade com tampa deslizante.
- Em sequência, no Capítulo 6 o modelo desenvolvido é aplicado aos casos de verificação multicomponente, em específico os problemas de bolha estática, escoamento de Poiseuille para dois-componentes e deslocamento fluido-fluido. No foco das análises de verificação, busca-se investigar os comportamentos do limite de estabilidade numérica, acurácia e efeitos de correntes espúrias.
- No Capítulo 7 o modelo é empregado na representação do problema de deslocamento fluido-fluido em meio poroso, tendo como foco a sua aplicação em casos com altas razões de viscosidade, assim como a sua capacidade de representação dos diferentes estados de deslocamento.
- Por fim, no Capítulo 8 são apresentadas as principais conclusões do presente estudo e discutidas possíveis linhas para a continuidade de aprimoramento do modelo desenvolvido.
- Nos apêndices estão destacadas as características específicas das notações utilizadas, assim como diversos passos de desenvolvimento matemático que foram suprimidos no decorrer deste documento.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Com o foco voltado para a hidrodinâmica de sistemas multicomponentes, a física de interação entre os diferentes fluidos pode ser aproximadamente descrita por modelagens matemáticas de equações de balanço do escoamento. Contudo, as complexidades que envolvem tais modelagens decorrem da evolução da interface dos fluidos durante o escoamento, denominada de dinâmica interfacial (DI). A DI é responsável pela transferência de massa, quantidade de movimento e energia entre os fluidos, sendo necessárias modelagens específicas para a interface de acordo com as características do problema. Entre os principais modelos de DI na literatura destacam-se os de interface singular e interface difusa (PAN *et al.*, 2019; QIU, 2020), os quais envolvem diferentes escalas de representação e meios de conexão com as equações de balanço.

Neste capítulo abordam-se as modelagens matemáticas que englobam a representação de sistemas multicomponentes compostos por fluidos imiscíveis. Inicialmente, as equações de balanço que descrevem a dinâmica de um único fluido são apresentadas brevemente. Em seguida, são abordadas as características das modelagens de dinâmica interfacial através dos modelos de interface singular e interface difusa. Por fim, a modelagem multicomponente desenvolvida é empregada às características do problema de deslocamento fluido-fluido em meio poroso.

2.1 Equações de Balanço Hidrodinâmico e Termodinâmico

As equações de balanço hidrodinâmico e termodinâmico para um único fluido, referentes a massa, quantidade de movimento, energia e entropia, respectivamente, podem ser obtidas na forma diferencial por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{\Pi} + \rho \mathbf{g} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{\Pi} : \nabla \mathbf{u}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_s + \Lambda_s, \quad (4)$$

onde ρ é a densidade do fluido, \mathbf{u} o vetor velocidade com componentes (u, v, w) , $\mathbf{\Pi}$ o tensor tensão, \mathbf{g} o vetor de aceleração resultante da presença de força externa, $e(\rho, T)$ a energia total específica, \mathbf{q} o vetor fluxo de calor, T a temperatura, s a entropia, \mathbf{q}_s o vetor fluxo de entropia e Λ_s o termo de geração de entropia (ANDERSON; MCFADDEN; WHEELER, 1998; JAMET, 2010).

Com base em relações constitutivas que refletem os comportamentos moleculares dos fluidos, as equações de balanço são fechadas especificando as expressões Π , \mathbf{q} , \mathbf{q}_s e Λ_s , para um fluido de comportamento newtoniano:

$$\Pi = -p\mathbf{I} + \left[\mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) - \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right], \quad (5)$$

$$\mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (6)$$

$$\mathbf{q}_s = \frac{\mathbf{q}}{T}, \quad (7)$$

$$\Lambda_s = \frac{k(\nabla T)^2}{T^2} + \frac{\mu}{T} (\nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u}), \quad (8)$$

onde μ é a viscosidade dinâmica, λ a viscosidade volumétrica, k a condutividade térmica e \mathbf{I} o tensor identidade. O tensor tensão Π , no presente caso, é descrito pelo tensor pressão, tensor taxa de deformação linear e o tensor de deformação volumétrica que segue a hipótese de Stokes, *i.e.*, $\lambda = \frac{2}{3}\mu$.

As equações 1, 2, 3 e 4 em conjunto com as relações constitutivas representadas nas equações 5, 6, 7 e 8, fecham o balanço das propriedades de massa, velocidade, temperatura, energia e entropia, do sistema composto por um único fluido.

2.2 Formulação para Escoamento Incompressível e Isotérmica

Considerando o escoamento de um líquido num ambiente idealizado, com pressões moderadamente baixas e com pequenas oscilações de temperatura, as variações de densidade podem ser consideradas nulas, conseqüentemente, o líquido pode ser denominado incompressível. Em casos de escoamento de gases, a consideração de incompressibilidade é válida apenas quando a variação de temperatura é desprezível e a velocidade local do escoamento é relativamente menor que a velocidade de propagação do som no meio (FOX; MCDONALD; MITCHELL, 2020). Sendo a relação entre a velocidade local do escoamento e a velocidade do som dada pelo número de Mach (Ma), determinada por

$$Ma = \frac{|\mathbf{u}|}{U_s} \quad (9)$$

onde U_s é velocidade do som. Segundo Guo, Zheng e Shi (2002), para $Ma < 0,3$ a variação de densidade de um gás é menor que 5%. Assim, com certa tolerância, em $Ma < 0,3$ o escoamento de um gás pode ser considerado incompressível.

Para os casos incompressíveis e isotérmicos (ρ e T constantes), as equações de balanço que fecham o sistema são simplificadas e representadas por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (10)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \nabla \cdot \left(\nu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] \right) + \mathbf{g} \quad (11)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot (s\mathbf{u}) = \frac{\nu}{T} (\nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{u}), \quad (12)$$

onde ν é viscosidade cinemática do fluido. A Equação (3) que representa a conservação da energia do sistema se torna nula devido a dependência de $e(\rho, T)$.

2.3 Modelagem Macroscópica da Dinâmica Interfacial

Na representação dos problemas multifásicos/multicomponentes a modelagem matemática da DI é essencial para representação dos fenômenos de transferência de massa, quantidade de movimento e energia entre os fluidos, garantindo o acoplamento das equações de balanço de cada fluido e a representação de uma equação de balanço da mistura.

2.3.1 Modelo de Interface Singular

O modelo de interface singular é caracterizado pela representação de uma interface descontínua (infinitesimal), a qual não possui região de transição entre os componentes (Figura 3). Numa perspectiva de representação física, em problemas reais a interface entre dois fluidos é contínua e apresenta variações de massa específica em comprimentos da ordem de dezenas de Angstroms (JAMET, 2010). Para problemas onde os fenômenos representados possuem comprimentos de referência muito maiores que a espessura da interface, a consideração da interface descontínua pode ser aplicada sem grandes prejuízos à representação física do sistema.

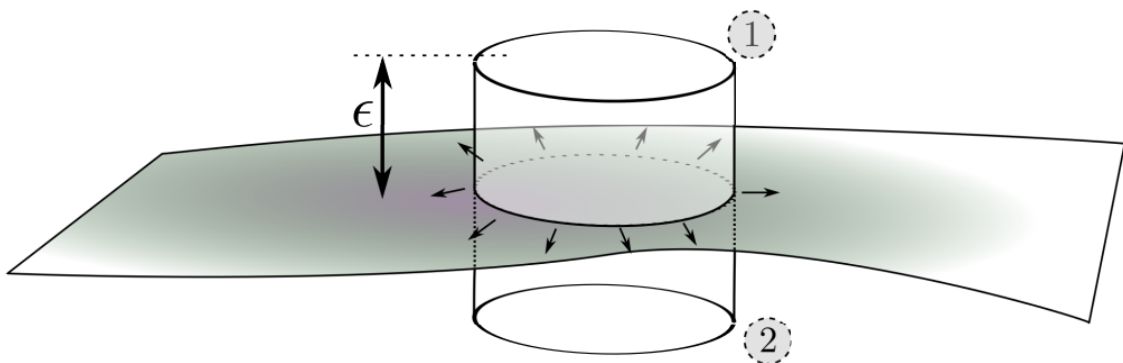


Figura 3 – Volume de controle no modelo de interface singular (Fonte: Siebert (2013)).

Do ponto de vista matemático a representação do modelo corresponde à aplicação de equações de balanço à interface dos volumes de controle infinitesimais de cada componente

(Figura 3). As equações de balanço na interface são representadas por:

$$\rho_1(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = \rho_2(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = \dot{m}, \quad (13)$$

$$(\mathbf{\Pi}_1 - \mathbf{\Pi}_2) \cdot \mathbf{n} = \dot{m}(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) - (\gamma \nabla \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \nabla \gamma, \quad (14)$$

$$\dot{m} \left[\left(\frac{u_2^2}{2} + e_2 \right) - \left(\frac{u_1^2}{2} + e_1 \right) \right] = (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \mathbf{n} + (\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{\Pi}_2 - \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{\Pi}_1) \cdot \mathbf{n}, \quad (15)$$

onde os subscritos 1 e 2 indicam os respectivos fluidos, \mathbf{n} é um vetor unitário com direção normal à interface, \dot{m} a vazão mássica e γ a tensão interfacial entre os fluidos. Contudo, as equações de balanço na interface não são suficientes para fechar o sistema de equações, sendo necessário a aplicação de condições de contorno em conjunto. Tais condições consideram o equilíbrio termodinâmico da interface, sendo representadas por:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{n}, \quad (16)$$

$$\mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{t} = \mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{t}, \quad (17)$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Pi}_2 \cdot \mathbf{n} - \mathbf{n} \cdot \mathbf{\Pi}_1 \cdot \mathbf{n} = -\gamma \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad (18)$$

$$p_2 - p_1 = \gamma \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad (19)$$

onde \mathbf{t} é um vetor unitário com direção tangencial à interface e p a pressão do fluido (JAMET, 2010). A Eq. (19) também é conhecida como a equação de Young-Laplace.

Deste modo, o modelo de interface singular descreve a DI como uma camada descontínua e livre, a qual se deforma e desloca em função do tempo. Em soluções analíticas, este modelo é comumente empregado em problemas simples, a exemplo do escoamento de Poiseuille para dois componentes (problema analisado na Sec. 6.2). Na área das representações numéricas, diversos métodos utilizam o modelo de interface singular, com destaque para os métodos de volume-de-fluido (VOF, volume-of-fluid), fronteiras imersas, *level-set* e *front-tracking* (PAN *et al.*, 2019). Entretanto, o modelo de interface singular possui algumas limitações que resultam na incapacidade de representar (JAMET, 2010; PHILIPPI *et al.*, 2012):

- sistemas multifásicos líquido-vapor próximo ao ponto crítico, onde a interface de transição encontra-se com espessura próxima ao comprimento de referência do processo;
- coalescência entre duas bolhas, que resulta numa singularidade no ponto de encontro das interfaces. A Figura 4 a) ilustra o processo de coalescência numericamente simulado por Huang, Sukop e Lu (2015) utilizando um modelo de interface difusa pelo método LBM;
- nucleação de bolhas através de fluidos aquecidos e segregação de fluidos a partir de uma mistura inicialmente homogênea, onde ocorrem o surgimento de bolhas e, conse-

quentemente, a criação de interfaces. A Figura 4 b) ilustra o processo de segregação simulado numericamente por Philippi *et al.* (2012) utilizando um modelo de interface difusa pelo método LBM.

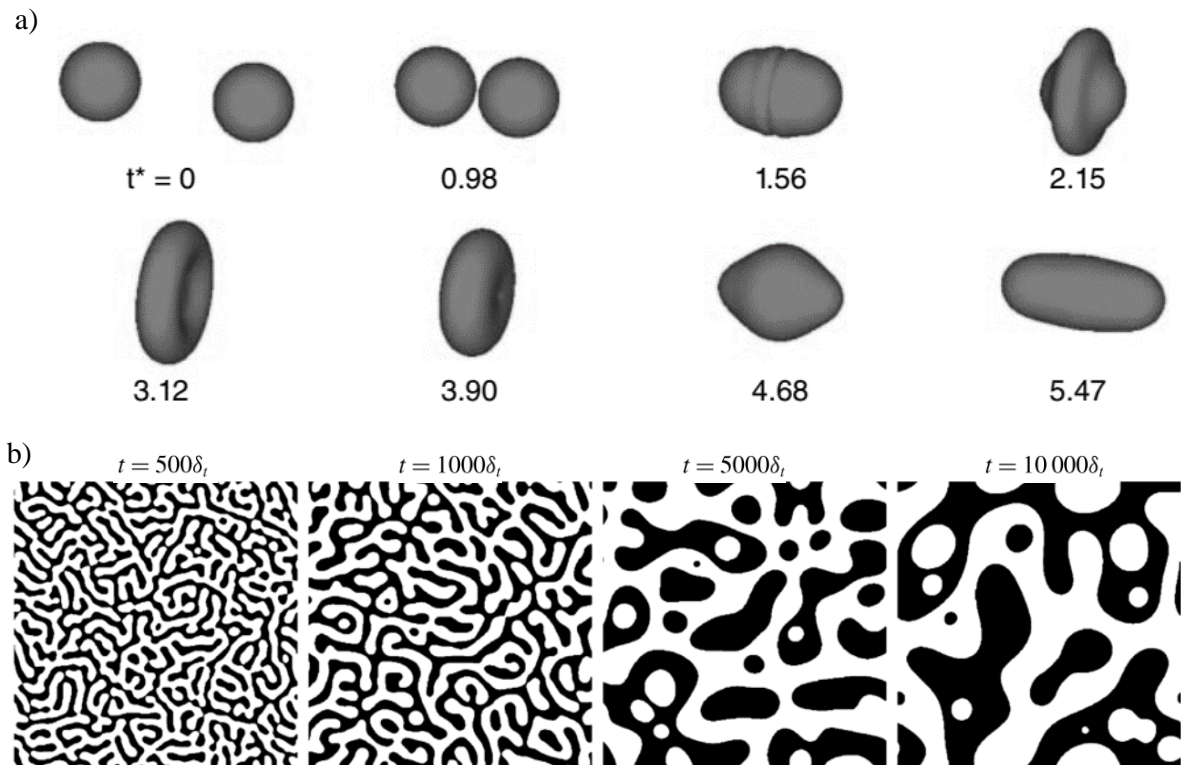


Figura 4 – Evolução temporal de sistemas multicomponentes: a) coalescência de bolhas (Adaptado de: Huang, Sukop e Lu (2015)); b) segregação de fluidos (Adaptado de: Philippi *et al.* (2012))

2.3.2 Modelo de Interface Difusa

Dadas as limitações observadas na representação descontínua do modelo de interface singular, o modelo de interface contínua torna-se interessante do ponto de vista físico para representações mais completas dos problemas multicomponentes. Historicamente, o modelo de interface difusa teve sua origem em abordagens termodinâmicas, inicialmente com os trabalhos de Rayleigh (1892) e Waals (1894) que descreveram uma interface contínua de transição em sistemas multifásicos sobre condições de equilíbrio (WAALS, 1894 apud WAALS, 1979). Korteweg (1901) estendeu a modelagem de interface difusa propondo a representação da interface em termos de gradientes de densidade da mistura, derivando o tensor de capilaridade, também denominado de tensor de Korteweg (KORTEWEG, 1901 apud ANDERSON; MCFADDEN; WHEELER, 1998). Desde então, outros trabalhos notáveis apresentaram modelagens complexas e refinadas com o objetivo de estender a capacidade de representação física da DI, tendo como destaque os trabalhos de Cahn e Hilliard (1958), Hohenberg e Halperin (1977), Wang

et al. (1993), Jasnow e Vinals (1996) e Guo e Lin (2015). Contudo, a modelagem de DI desenvolvida na presente seção segue a base fundamentada pelos trabalhos de Waals (1894) e Korteweg (1901).

Como proposto por Waals (1894) a abordagem do modelo de interface difusa é baseada na energia livre de Helmholtz (ψ) por unidade de volume:

$$\psi = \psi^0(\rho, T) + \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \quad (20)$$

onde $\psi^0(\rho, T)$ representa a energia livre por unidade de volume de um sistema homogêneo em função da densidade e temperatura da mistura, e κ é um parâmetro relacionado ao potencial de interação das partículas. Utilizando as relações termodinâmicas entre a energia livre (ψ) e os termos de energia interna (e) e pressão termodinâmica (P_e), tem-se

$$e = \frac{\psi}{\rho} + Ts, \quad (21)$$

$$P_e = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \psi. \quad (22)$$

Aplicando a derivada material da energia interna e utilizando as Eqs. (20-22), obtém-se por manipulações algébricas (para detalhes deste processo ver Jamet (2010) e Siebert (2013)):

$$\rho \frac{de}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \frac{P_e}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \kappa \nabla \rho \cdot \frac{d(\nabla \rho)}{dt}. \quad (23)$$

Utilizando as Eqs. (3) e (4) na substituição dos termos $\frac{de}{dt}$ e $\frac{ds}{dt}$, obtém-se

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{\Pi} : \nabla \mathbf{u} = -T \nabla \cdot \mathbf{q}_s + T \Lambda_s + P_e \nabla \cdot \mathbf{u} + \kappa \nabla \rho \cdot \frac{d(\nabla \rho)}{dt}, \quad (24)$$

onde o último termo do lado direito pode ser representado na forma expandida por

$$\kappa \nabla \rho \cdot \frac{d(\nabla \rho)}{dt} = \nabla \cdot \left[\kappa \nabla \rho \frac{d\rho}{dt} \right] - \frac{d\rho}{dt} \nabla \cdot (\kappa \nabla \rho) - \kappa \nabla \rho \nabla \rho : \nabla \mathbf{u}. \quad (25)$$

Isolando o termo de geração de entropia na Eq. (24) e substituindo na Eq. (25), tem-se

$$\begin{aligned} \Lambda_s = & \frac{1}{T} [\mathbf{\Pi} + (P_e - \kappa \rho \nabla^2 \rho) \mathbf{I} + \kappa \nabla \rho \nabla \rho] : \nabla \mathbf{u} \\ & + \nabla \cdot \left[\mathbf{q}_s - \frac{1}{T} \left(\mathbf{q} + \kappa \nabla \rho \frac{d\rho}{dt} \right) \right] - \frac{1}{T^2} \left(\mathbf{q} + \kappa \nabla \rho \frac{d\rho}{dt} \right) \cdot \nabla T, \end{aligned} \quad (26)$$

para garantir que o termo de geração da entropia seja sempre $\Lambda_s \geq 0$ em qualquer tipo de escoamento, satisfazendo a segunda lei da termodinâmica (JAMET, 2010), os termos \mathbf{q} e $\mathbf{\Pi}$ são reescritos pela Eq.(26) com base nas formas derivativas para o escoamento de um único fluido (Eq. 8), resultando em

$$\mathbf{\Pi} = \underbrace{(-P_e + \kappa\rho\nabla^2\rho)\mathbf{I} - \kappa\nabla\rho\nabla\rho}_{\text{Forças Capilares}} + \underbrace{\left[\mu(\nabla\mathbf{u} + \nabla^T\mathbf{u}) - \frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{I}\right]}_{\text{Forças Viscosas}}, \quad (27)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa\nabla\rho\frac{d\rho}{dt} - k\nabla T, \quad (28)$$

onde $\kappa\nabla\rho\nabla\rho$ é o Korteweg tensor e a pressão termodinâmica P_e é dada por

$$P_e = p - \frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2. \quad (29)$$

Como destacado na Eq. (27), os termos do lado esquerdo da equação representam as forças capilares, resultante dos gradientes de densidade da mistura. Enquanto do lado direito tem-se as forças viscosas, onde μ representa a viscosidade dinâmica da mistura.

Portanto, a descrição termodinâmica da interface permite uma formulação da DI na abordagem contínua, resultando numa descrição da mistura que não necessita de condições de contorno na interface. Numericamente o modelo de interface difusa é aplicado em diversos métodos, com destaque para as diferentes formulações LB de gradiente de cor, pseudo-potencial e energia livre (HUANG; SUKOP; LU, 2015). Destaca-se que, a utilização da interface difusa em conjunto com as abordagens mesoscópicas do método *lattice* Boltzmann, resultam na combinação de capacidades de representação dos fenômenos da escala na interface de transição entre os fluidos.

Por fim, na comparação com o modelo de interface singular, a interface difusa estende as capacidades de representação física, permitindo a representação de problemas de transição de fase próximos aos pontos críticos de temperatura e pressão, segregação de fluidos, assim como os processos de nucleação e coalescência de bolhas ilustrados Figura 4. Contudo, o modelo de interface difusa acaba tendo um alto custos computacional em problemas onde o comprimento de referência é muito maior que o comprimento da interface.

2.4 Deslocamento fluido-fluido em meios porosos

No escoamento de sistemas multicomponentes de fluidos imiscíveis, a presença de um meio poroso caracterizado por uma matriz sólida, rígida e com espaços internos vazios interconectados (denominados de poros), afeta diretamente a interação dos fluidos. Como destacado por Lenormand, Zarcone e Sarr (1983), o mecanismo de interação dos fluidos dentro dos poros

é influenciado pela pressão capilar, a qual é proporcional ao diâmetro do poro e a tensão interfacial entre os fluidos. Sendo na literatura este tipo de problema referido como deslocamento fluido-fluido em meio poroso.

Em representações voltadas para etapas específicas de recuperação do petróleo, o problema de deslocamento de fluido-fluido em meio poroso é comumente caracterizado pela injeção de um fluido que tem como objetivo deslocar outro que se encontra inicialmente preenchendo o meio poroso. Ao decorrer do tempo, a evolução da DI de interface imiscível é afetada pela interação dos fluidos com a estrutura sólida do meio. Este deslocamento imiscível envolve a competição de forças capilares da interação fluido-fluido com forças viscosas resultantes do escoamento de cada fluido, sendo que o balanço entre estas forças influencia diretamente o comportamento do deslocamento. Ressalta-se que as forças capilares presentes no processo são descritas na modelagem de interface difusa da DI pelos termos de gradiente de densidade e pelo parâmetro κ , ambos presentes no tensor tensão (Eq. 27) que inclui o tensor de Korteweg (também denominado de tensor de capilaridade), no balanço da quantidade de movimento.

Como observado por Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) o processo pode ser qualificado em três diferentes estados de deslocamento, sendo eles *viscous fingering*, *capillary fingering* e deslocamento estável, ilustrados na Figura 5. Do ponto de vista de competição das forças, os estados podem ser descritos por:

- *capillary fingering* - escoamentos onde as forças capilares predominam sobre as forças viscosas, resultando em instabilidades do deslocamento e, conseqüentemente, na formação de múltiplos *fingers* que se espalham através dos poros em todas as direções, até mesmo contra a direção do deslocamento, formando regiões de circulação que armazenam o fluido deslocado no meio poroso (Figura 5 (b)).
- *viscous fingering* - escoamentos onde as forças viscosas predominam sobre as forças capilares são possíveis dois estados de deslocamento: *viscous fingering* e deslocamento estável. Quando a viscosidade do fluido injetado é menor que a do deslocado, tendem a ocorrer instabilidades que resultam na formação de *fingers* que avançam apenas na direção do escoamento, assim caracterizando o comportamento de *viscous fingering* (Figura 5 (a)).
- deslocamento estável - com forças viscosas predominando sobre as forças capilares e a viscosidade do fluido injetado maior que a do deslocado, o deslocamento tende a formação de uma frente estável que avança no sentido do escoamento (Figura 5 (c)).

Baseado na competição de forças Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) propuseram um diagrama de tendências dos estados de deslocamento utilizando os parâmetros adimensionais de número de capilaridade (Ca) e razão de viscosidade (M_v) entre os fluidos, como ilustrado na Figura 5. O número de capilaridade e razão de viscosidade na presente formulação

são definidos por

$$Ca = \frac{U_i \gamma}{\nu_i} \quad \text{e} \quad M_v = \frac{\nu_i}{\nu_d}, \quad (30)$$

respectivamente, onde U é uma velocidade de referência, γ é a tensão interfacial resultante das forças capilares, e os subíndices i d indicam os fluidos injetado e deslocado, respectivamente.

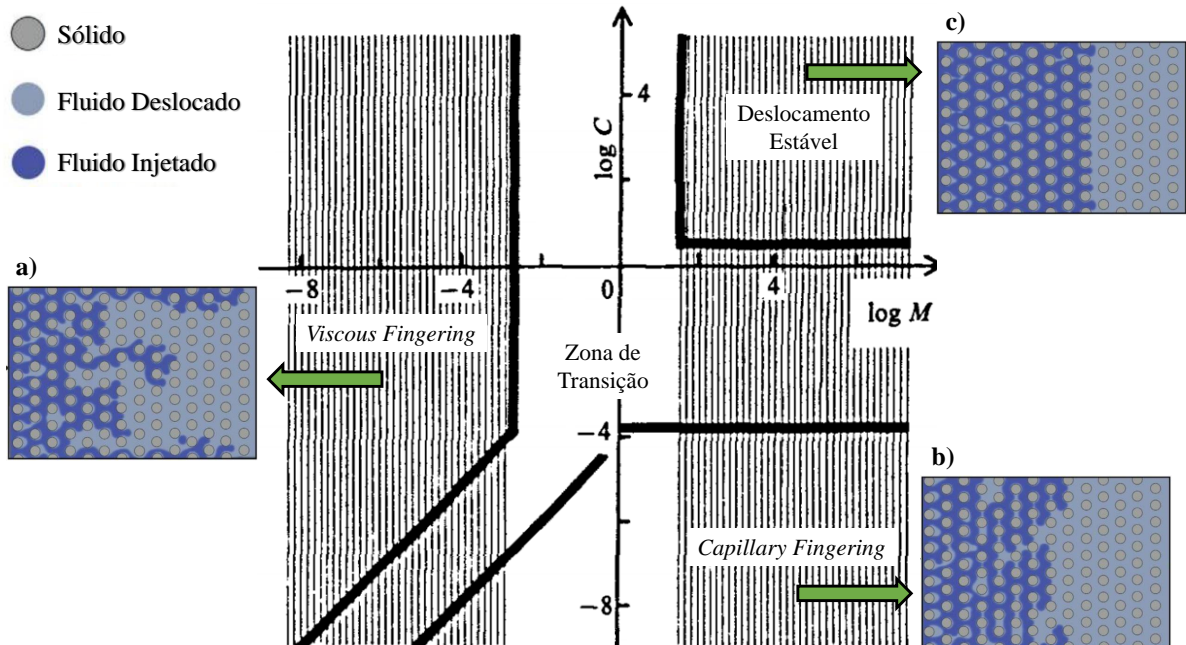


Figura 5 – Diagrama de estados de deslocamento: a) *viscous fingering*; b) *capillary fingering*; c) deslocamento estável. Adaptado de Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) e Tsuji, Jiang e Christensen (2016).

No desenvolvimento de uma análise matemática do problema algumas hipóteses de simplificação para a mistura e os fluidos podem ser consideradas, sendo:

- escoamento incompressível (ρ_i e ρ_d constantes) para as fases de massa de cada componente, ocorrendo variações de densidade apenas na interface do componente, *i.e.*, interface difusa;
- escoamento isotérmico (Temperatura constante);
- ambos fluidos newtonianos (ν_i e ν_d constantes);
- ação de força gravitacional desprezível;
- molhabilidade neutra nas superfícies sólidas.

Com base nas hipóteses admitidas e seguindo a análise proposta por Hilfer e Øren (1996), as equações de balanço de massa e quantidade de movimento da mistura podem ser separadas para cada componente em

$$\underbrace{\nabla \cdot \mathbf{u}^{(p)}}_{\text{Balanço de Massa}} = 0, \quad (31)$$

$$\underbrace{\rho^{(p)} \frac{\partial \mathbf{u}^{(p)}}{\partial t} + \rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{(p)}}_{\text{Balanço de Quantidade de Movimento}} = -\nabla p^{(p)} + \rho^{(p)} \nu^{(p)} \nabla^2 \mathbf{u}^{(p)} + F_C^{(p)}, \quad (32)$$

onde o sobrescrito (p) indica o componente e F_C representa as forças capilares que ocorrem na interface.

No processo de adimensionalização das equações de balanço para análise das escalas que envolvem o problema, os parâmetros adimensionais são definidos por

$$\hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{L_{ref}}, \quad \hat{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{U_i}, \quad \hat{t} = t \frac{U_i}{L_{ref}}, \quad \hat{p} = p \frac{L_{ref}}{\gamma}, \quad \hat{F}_c = F_c \frac{L_{ref}^2}{\gamma}, \quad (33)$$

sendo L_{ref} um comprimento microscópico de referência da escala do poro e γ/L_{ref} a pressão de referência proporcional a tensão interfacial dos fluidos. A forma adimensional da equação de balanço da quantidade de movimento (Eq. 32) é dada por

$$Re \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(i)}}{\partial \hat{t}} + (\hat{\mathbf{u}}^{(i)} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{u}}^{(i)} \right) = -\frac{1}{Ca} \left(\nabla \hat{p}^{(i)} + \hat{F}_c^i \right) + \nabla^2 \hat{\mathbf{u}}^{(i)}, \quad (34)$$

$$Re M_\nu \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(d)}}{\partial \hat{t}} + (\hat{\mathbf{u}}^{(d)} \cdot \nabla) \hat{\mathbf{u}}^{(d)} \right) = -\frac{M_\nu}{Ca} \left(\nabla \hat{p}^{(d)} + \hat{F}_c^d \right) + \nabla^2 \hat{\mathbf{u}}^{(d)}, \quad (35)$$

onde $Re = U_i L_{ref} / \nu^{(i)}$ é o número de Reynolds, que representa a relação entre forças inerciais e viscosas do escoamento. Enquanto, $M_\nu = \nu_i / \nu_d$ descreve a razão de viscosidade entre os fluidos.

Segundo Hilfer e Øren (1996) e Muggeridge *et al.* (2014b), o processo de injeção de fluidos nos reservatórios de petróleo ocorre em escalas de velocidade relativamente baixas, onde as forças inerciais podem ser desprezadas, assim caracterizando um regime de Darcy do escoamento através do meio poroso. Deste modo, as Eqs. (34) e (35) podem ser simplificadas para

$$\frac{1}{Ca} \left(\nabla \hat{p}^{(i)} + \hat{F}_c^i \right) = \nabla^2 \hat{\mathbf{u}}^{(i)}, \quad (36)$$

$$\frac{M_\nu}{Ca} \left(\nabla \hat{p}^{(d)} + \hat{F}_c^d \right) = \nabla^2 \hat{\mathbf{u}}^{(d)}, \quad (37)$$

sendo que, em ambas equações, os termos do lado esquerdo representam as forças capilares e os do lado direito as forças viscosas no processo de deslocamento. Por fim, as Eqs. (31), (36) e (37) retratam o presente problema em acordo com as observações de balanço de forças descritas por Lenormand, Touboul e Zarcone (1988).

3 MODELAGEM LATTICE BOLTZMANN

No presente capítulo trata-se da modelagem LB para a descrição hidrodinâmica de sistemas multicomponente. Neste sentido, analisa-se a representação macroscópica da equação contínua de Boltzmann e de suas abordagens discretas com o foco de observar erros e simplificações inerentes à equação de Boltzmann e aos processos de discretização que buscam representar as equações hidrodinâmicas.

3.1 Equação de Boltzmann

Como demonstrado por He e Luo (1997) e Abe (1997), o método de *Lattice-Boltzmann* consiste de uma forma discreta no espaço de velocidades e no espaço-tempo da equação de Boltzmann. Tal equação, derivada pelo físico austríaco Ludwig Boltzmann (1844-1906) (BOLTZMANN, 1898), é representada na forma dimensional por

$$\frac{df^{*(p)}}{dt^*} = \frac{\partial f^{*(p)}}{\partial t^*} + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}^*} f^{*(p)} + \boldsymbol{g}^* \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}^*} f^{*(p)} = \Omega^{*(ps)}, \quad (38)$$

onde f é a função distribuição, $\boldsymbol{\xi}$ o vetor velocidade da partícula, \boldsymbol{g} a força externa por unidade de massa e Ω o operador de colisão. O sobrescrito $*$ indica a forma dimensional do parâmetro e os sobrescritos (p) e (ps) representam as funções dependentes do componente p e das interações entre os componentes p e s , respectivamente, isto em um sistema composto por r componentes.

Do ponto de vista físico, a equação de Boltzmann representa a evolução temporal da função distribuição $f^{*(p)}(\boldsymbol{x}^*, \boldsymbol{\xi}^*, t^*)$, a qual retrata a probabilidade de um sistema partículas encontrar-se numa posição \boldsymbol{x}^* com velocidade $\boldsymbol{\xi}^*$ e num dado tempo t , onde o termo $\Omega^{*(ps)}$ representa o processo de colisão entre as partículas do sistema. No entanto, para derivação da equação de Boltzmann se fazem necessárias as seguintes hipóteses de simplificação: somente colisões binárias entre as partículas (gás rarefeito); não correlação entre as velocidades de pré e pós-colisão das partículas; força externa desprezível em comparação com forças de interação molecular durante o processo de colisão das partículas; e $f^{*(p)}$ não varia para distâncias comparáveis com o tamanho da partícula no início do processo de colisão (partícula sem volume). Mais detalhes do processo de derivação e das hipóteses de simplificação da equação Boltzmann podem ser vistos Kremer (2010).

3.1.1 Adimensionalização

Com o objetivo de simplificar o seguimento das análises, eliminando considerações de massa das partículas, a equação de Boltzmann é adimensionalizada. Os parâmetros adimensi-

onalizados são considerados em função de um comprimento de referência ℓ , de uma velocidade molecular média ξ_{med} e de uma densidade de referência ρ_{ref} :

$$\mathbf{x} = \frac{\mathbf{x}^*}{\ell}, \quad t = t^* \frac{\xi_{med}}{\ell}, \quad \boldsymbol{\xi} = \frac{\boldsymbol{\xi}^*}{\xi_{med}}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{g}^* \frac{\ell}{\xi_{med}^2}, \quad f^{(p)} = f^{*(p)} \frac{\xi_{med}^{-D}}{\rho_{ref}}, \quad \Omega^{(ps)} = \Omega^{*(ps)} \frac{\xi_{med}^{-(D+1)} \ell}{\rho_{ref}}, \quad (39)$$

sendo a velocidade molecular média descrita por $\xi_{med} = \sqrt{k_b T_{ref}/m}$, onde k_b é a constante de Boltzmann, T_{ref} a temperatura de referência e m a massa da partícula. Na forma adimensional representa-se a equação de Boltzmann por

$$\frac{\partial f^{(p)}}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f^{(p)} + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f^{(p)} = \Omega^{(ps)}. \quad (40)$$

Para uma interpretação de escala dos termos adimensionais da equação Boltzmann, o processo de adimensionalização deve ser ajustado. Atuando numa escala de colisão das partículas o termo de colisão pode ser adimensionalizado considerando como comprimento de referência o livre caminho médio (ℓ_c) de colisão das partículas (KREMER, 2010):

$$\Omega^{(ps)} = \Omega^{*(ps)} \frac{\xi_{med}^{-(D+1)} \ell_c}{\rho_{ref}}, \quad (41)$$

onde $\xi_{med} \approx \ell_c/t_c$, sendo t_c o tempo médio de colisão das partículas. Adimensionalizando a equação de Boltzmann com base nos termos da Eq.(39) e substituindo o termo de colisão adimensional pela Eq.(41), tem-se

$$\frac{Kn_t}{Kn} \left(\frac{\partial f^{(p)}}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f^{(p)} + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f^{(p)} \right) = \frac{1}{Kn} \Omega^{(ps)}, \quad (42)$$

onde $Kn = \ell_c/\ell$ é o número de Knudsen, que representa a relação entre o livre caminho médio das partículas e o comprimento de referência do problema, e $Kn_t = \frac{t_c \xi_{med}}{\ell}$ é a relação entre o tempo médio de colisão molecular e o tempo de referência do problema. A razão Kn_t e Kn pode ser representada pelo número de Strouhal $Sr = \frac{\ell_c}{t_c \xi_{med}} = \frac{Kn}{Kn_t}$. Contudo, pela aproximação de $\xi_{med} \approx \ell_c/t_c$ tem-se $\frac{Kn_t}{Kn} = \frac{1}{Sr} \approx 1$.

Com base nas hipóteses de simplificação da equação de Boltzmann, o número de Knudsen (Kn) pode ser interpretado como um nível de rarefação do gás descrito pela função distribuição. De modo que, para $Kn \gg 1$ o nível de rarefação é elevado e o termo colisão torna-se desprezível na evolução da função distribuição. Enquanto, para $Kn \ll 1$ o efeito de rarefação é baixo, tornando-se um gás denso de partículas sem volume e com processos de colisão binária, e conseqüentemente, o termo de colisão apresenta grande relevância na evolução da função distribuição. Sendo nos casos de $Kn \ll 1$ admitido a representação de um fluido denso, des-

crito por momentos de partículas (*i.e.* moléculas) que se deslocam e colidem ao decorrer do tempo.

3.1.2 Termo de Colisão

Fundamental em representações onde $Kn \ll 1$, o termo de colisão apresentado na Eq. (40) descreve os processos de interação entre as partículas do sistema, tanto entre partículas de um mesmo componente como de diferentes componentes. Derivado através da teoria de hierarquia BBGKY, o termo é representado por

$$\Omega^{(ps)} = \sum_{s=1}^r \left[\nabla_{\xi} \cdot \int \int \mathbf{g}^{(ps)} f^{(2(ps))}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) d\mathbf{x}_1 d\boldsymbol{\xi}_1 \right], \quad (43)$$

sendo responsável por alterar a função distribuição ao longo do tempo, alterações que são baseadas nas trocas de quantidade de movimento entre as partículas. Representado por uma equação integro-diferencial de grande complexidade (como descrito na Eq. 43), aproximações que visam sua simplificação são comumente utilizadas. Neste sentido, a sua integração sobre o domínio espacial pode ser simplificada em duas partes, interações de curto alcance $\{\mathcal{D}_1 : |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}| < d_{ef}\}$ e longo alcance $\{\mathcal{D}_2 : |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}| \geq d_{ef}\}$, onde d_{ef} é o diâmetro efetivo das partículas (HE; DOOLEN, 2002):

$$\begin{aligned} \Omega^{(ps)} &= \sum_{s=1}^r \left[\underbrace{\nabla_{\xi} \cdot \int \int_{\mathcal{D}_1} \mathbf{g}^{(ps)} f^{(2(ps))} d\mathbf{x}_1 d\boldsymbol{\xi}_1}_{\Omega_{rep}^{(ps)}} + \underbrace{\nabla_{\xi} \cdot \int \int_{\mathcal{D}_2} \mathbf{g}^{(ps)} f^{(2(ps))} d\mathbf{x}_1 d\boldsymbol{\xi}_1}_{\Omega_{att}^{(ps)}} \right] \quad (44) \\ &= \sum_{s=1}^r \left(\Omega_{rep}^{(ps)} + \Omega_{att}^{(ps)} \right). \end{aligned}$$

sendo os termos $\Omega_{rep}^{(ps)}$ e $\Omega_{att}^{(ps)}$ as partes que descrevem interações repulsivas e atrativas, respectivamente, das partículas no processo de colisão. Os termos f^2 , \mathbf{x}_1 e $\boldsymbol{\xi}_1$ resultam do processo de dedução da equação de Boltzmann pela teoria de hierarquia BBGKY, sendo f^2 a probabilidade de encontrar dois sistemas partículas nas posições \mathbf{x} e \mathbf{x}_1 , com velocidades $\boldsymbol{\xi}$ e $\boldsymbol{\xi}_1$ num dado tempo t . Para mais detalhes do processo de dedução pela teoria de hierarquia BBGKY, ver Kremer (2010).

O termo repulsivo no processo de colisão pode ser simplificado pelo modelo de colisão BGK (BHATNAGAR; GROSS; KROOK, 1954) em conjunto com a correção de Enskog para

gases densos (CHAPMAN; COWLING, 1990), sendo representado por

$$\Omega_{rep}^{(ps)} = - \underbrace{\frac{f^{(p)} - f_{eq}^{(p)}(\rho^{(p)}, \mathbf{u})}{\tau}}_{\text{Modelo BGK}} + \underbrace{\nabla_x \left(\frac{b\rho^2 k_b T}{1 - b\rho} \right) \cdot \frac{\chi^{(p)}}{\rho} \nabla_\xi f^{(p)}}_{\text{Correção de Enskog}}, \quad (45)$$

onde $f_{eq}^{(p)}$ é a função distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann e τ o tempo de relaxação é uma função do estado termodinâmico da mistura, *i.e.*, $\tau(\chi^{(p)}, \chi^{(s)}, \dots, \chi^{(r)}, \theta^{(p)}, \theta^{(s)}, \dots, \theta^{(r)})$, sendo $\chi^{(p)} = \rho^{(p)}/\rho$ a fração mássica e θ a temperatura normalizada. Contudo, a inclusão do termo da correção de Enskog na Eq. (45) elimina a hipótese de partículas sem volume, sendo b o volume efetivo ocupado pela partícula, *i.e.*, quando $b = 0$ o modelo reassume a hipótese de partícula sem volume. Para detalhes de dedução da correção de Enskog através do termo de colisão, ver Kremer (2010)

As interações atrativas de longo alcance descritas na Eq. (44) podem ser simplificadas utilizando a hipótese de não correlação entre as velocidades de pré e pós-colisão das partículas, juntamente com teoria do campo médio (HE; DOOLEN, 2002). Assim, o segundo termo do lado direito da Eq. (44) é reescrito utilizando $\mathbf{g}^{(ps)} = \nabla_x V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)}$:

$$\Omega_{att}^{(ps)} = \nabla_\xi \cdot \int \int_{\mathcal{D}_2} \mathbf{g}^{(ps)} f^{(2(ps))} d\mathbf{x}_1 d\xi_1 = \int \int_{\mathcal{D}_2} \nabla_x V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)} \cdot \nabla_\xi f^{(2(ps))} d\mathbf{x}_1 d\xi_1 \quad (46)$$

onde $V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)}$ representa a energia potencial por unidade de massa, sendo um parâmetro independente da velocidade ξ das partículas. Ressaltando que, o potencial de energia atua entre as partículas dos componentes p e s na distância de longo alcance \mathcal{D}_2 . Empregando a hipótese de não correlação entre as velocidades de pré e pós-colisão das partículas à função distribuição, tem-se a simplificação

$$f^{(2(ps))}(\mathbf{x}, \xi, \mathbf{x}_1, \xi_1, t) = \underbrace{f^{(p)}(\mathbf{x}, \xi, t)}_{f^{(p)}} \underbrace{f^{(s)}(\mathbf{x}_1, \xi_1, t)}_{f^{(s)}} = f^{(p)} f^{(s)}, \quad (47)$$

substituindo na Eq. (46), tem-se

$$\begin{aligned} \int \int_{\mathcal{D}_2} \nabla_x V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)} \cdot \nabla_\xi \left(f^{(p)} f^{(s)} \right) d\mathbf{x}_1 d\xi_1 &= \int_{\mathcal{D}_2} \nabla_\xi f^{(p)} \cdot \nabla_x V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)} \underbrace{\int f^{(s)} d\xi_1}_{\rho(\mathbf{x}_1)} d\mathbf{x}_1 \\ &= \nabla_\xi f^{(ps)} \cdot \int_{\mathcal{D}_2} \nabla_x \left(V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)} \rho^{(s)}(\mathbf{x}_1) \right) d\mathbf{x}_1, \end{aligned} \quad (48)$$

expandindo o termo $\rho(\mathbf{x}_1)$ entorno de \mathbf{x} para $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}$, tem-se

$$\rho(\mathbf{x}_1) = \rho(\mathbf{x}) + \mathbf{x}_0 \cdot \nabla \rho + \frac{1}{2} \mathbf{x}_0 \mathbf{x}_0 : \nabla \nabla \rho + \frac{1}{6} \mathbf{x}_0 \mathbf{x}_0 \mathbf{x}_0 : \nabla \nabla \nabla \rho + \mathcal{O}(\mathbf{x}_0^4). \quad (49)$$

Desconsiderando os termos maiores que quarta ordem e substituindo a expansão na Eq. (48), tem-se como resultado a integração da energia potencial em função de $d\mathbf{x}_0 = d\mathbf{x}_1$. Assumindo um comportamento gaussiano de $V_{\mathcal{D}_2}$, os momentos de ordem impar resultante da integração por $d\mathbf{x}_0$ são nulos, assim como, o momento de segunda ordem resulta em componentes não diagonais nulos e componente diagonais idênticas. Portanto, as forças atrativas de longo alcance resultam em

$$\Omega_{att}^{(ps)} = \mathbf{g}^{(ps)} \cdot \nabla_{\xi} f^{(p)} = \nabla_x \left(-2a^{(ps)} \rho^{(s)} + \kappa^{(ps)} \nabla^2 \rho^{(s)} \right) \cdot \nabla_{\xi} f^{(p)}, \quad (50)$$

sendo a e κ parâmetros que representam o potencial da interação de longo alcance e descritos respectivamente por

$$a^{(ps)} = -\frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}_2} V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)} d\mathbf{x}_0, \quad (51)$$

$$\kappa^{(ps)} = -\frac{1}{2D} \int_{\mathcal{D}_2} x_0^2 V_{\mathcal{D}_2}^{(ps)} d\mathbf{x}_0. \quad (52)$$

Por fim, na forma final o termo de colisão simplificado fica descrito por

$$\Omega^{(ps)} = - \underbrace{\frac{f^{(p)} - f_{eq}^{(p)}}{\tau}}_{\text{Modelo BGK}} + \nabla_{\xi} f^{(p)} \cdot \left(\underbrace{\frac{\chi^{(p)}}{\rho} \nabla_x \left(\frac{b\rho^2 k_b T}{1 - b\rho} \right)}_{\text{Correção de Enskog}} + \sum_{s=1}^r \nabla_x \left(-2a^{(ps)} \rho^{(s)} + \kappa^{(ps)} \nabla^2 \rho^{(s)} \right) \right). \quad (53)$$

3.1.3 Função Distribuição de Equilíbrio e Propriedades Macroscópicas

Presente no termo de colisão proposto por BGK, a função distribuição de equilíbrio pode ser derivada através da consideração de um estado de equilíbrio da Eq. (43). Baseado na consideração de colisões elásticas no processo de interação das partículas, as propriedades de densidade, quantidade de movimento e energia devem ser conservadas pelo operador de colisão (KREMER, 2010). Assim, a função distribuição de equilíbrio na sua forma adimensional é descrita por

$$f_{eq}^{(p)} = \rho^{(p)} \left(\frac{1}{2\pi(\Theta + 1)} \right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{(\mathbf{c})^2}{2(\Theta + 1)}}, \quad (54)$$

onde $\Theta = \theta - 1$ é o desvio de temperatura, $\theta = T/T_{ref}$ a temperatura normalizada e $\mathbf{c} = (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})$ representa a velocidade molecular peculiar.

Dado a capacidade de recuperação de variáveis macroscópicas pela integração da função distribuição em momentos do espaço de velocidades, tem-se pela integração da função distribuição e da função distribuição equilíbrio nos momentos 1, $\boldsymbol{\xi}$ e $\frac{1}{2}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2$, a recuperação

das propriedades de equilíbrio de densidade, quantidade de movimento e energia:

$$\rho = \sum_{p=1}^r \rho^{(p)} = \sum_{p=1}^r \int f_{eq}^{(p)} d\mathbf{c} = \sum_{p=1}^r \int f^{(p)} d\mathbf{c}, \quad (55)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{p=1}^r \rho^{(p)} \mathbf{u}^{(p)} = \sum_{p=1}^r \int \boldsymbol{\xi} f^{(p)} d\mathbf{c}, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{p=1}^r \rho^{(p)} \mathbf{u} = \sum_{p=1}^r \int \boldsymbol{\xi} f_{eq}^{(p)} d\mathbf{c}, \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \rho \epsilon &= \sum_{p=1}^r \frac{D}{2} (\rho^{(p)} (\Theta^{(p)} + 1)) = \sum_{p=1}^r \int \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}^{(p)})^2 f^{(p)} d\mathbf{c}, \\ &= \sum_{p=1}^r \frac{D}{2} (\rho^{(p)} (\Theta + 1)) = \sum_{p=1}^r \int \frac{1}{2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 f_{eq}^{(p)} d\mathbf{c}. \end{aligned} \quad (57)$$

Integrando a função distribuição em momentos de segunda ou maior ordem são obtidos tensores que envolvem termos de não equilíbrio (termos não recuperados pela integração da função distribuição equilíbrio). As Eqs. (58), (59) e (60) exemplificam tais tensores:

$$\mathbf{P} = \sum_{p=1}^r \int \mathbf{c} \mathbf{c} f^{(p)} d\mathbf{c}, \quad (58)$$

$$\mathbf{Q} = \sum_{p=1}^r \int \mathbf{c} \mathbf{c} \mathbf{c} f^{(p)} d\mathbf{c}, \quad (59)$$

$$\mathbf{R} = \sum_{p=1}^r \int \mathbf{c} \mathbf{c} \mathbf{c} \mathbf{c} f^{(p)} d\mathbf{c}, \quad (60)$$

onde \mathbf{P} é o tensor momento de segunda-ordem, \mathbf{Q} o tensor momento de terceira-ordem, e \mathbf{R} o tensor momento de quarta-ordem.

3.1.4 Projeção da Função Distribuição em Bases de Hermite

Baseado na capacidade de descrição de momentos da função distribuição Grad (1949) propôs a representação da função distribuição como uma expansão em séries de tensores polinômios de Hermite:

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = w(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathcal{A}^{(n)}(\mathbf{x}, t) : \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}), \quad (61)$$

onde $f = \sum_p f^{(p)}$, $w(\boldsymbol{\xi})$ é a função peso, $\mathcal{A}^{(n)}$ o coeficiente de expansão e $\mathcal{H}^{(n)}$ o polinômio de Hermite. Ambos $\mathcal{A}^{(n)}$ e $\mathcal{H}^{(n)}$ são tensores de ordem n e seus produtos são contrações

completas (produtos escalares tensoriais). No Apêndice B são abordadas as definições que envolvem polinômio de Hermite, assim como suas relações e propriedades.

Deste modo, os polinômios de Hermite expandidos até sua 4ª ordem são dados por

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{(0)}(\boldsymbol{\xi}) &= 1, & \mathcal{H}^{(1)}(\boldsymbol{\xi}) &= \boldsymbol{\xi}, & \mathcal{H}^{(2)}(\boldsymbol{\xi}) &= \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi} - I, \\ \mathcal{H}^{(3)}(\boldsymbol{\xi}) &= \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi} - \tilde{3}\boldsymbol{\xi}I, & \mathcal{H}^{(4)}(\boldsymbol{\xi}) &= \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi} - \tilde{6}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}I + \tilde{3}II.\end{aligned}\quad (62)$$

sendo \tilde{n} um índice cíclico de permutação com n formas diferentes, por exemplo $\xi_{\alpha_1} + \xi_{\alpha_2} = \tilde{2}\boldsymbol{\xi}$. Através da propriedade de ortogonalidade do polinômio de Hermite pode-se calcular o coeficiente expansão por

$$\mathcal{A}^{(n)}(\boldsymbol{x}, t) = \int f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (63)$$

os quais, calculados até a 4ª ordem, produzem:

$$\begin{aligned}\mathcal{A}^{(0)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho, & \mathcal{A}^{(1)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}, & \mathcal{A}^{(2)}(\boldsymbol{x}, t) &= \boldsymbol{P} + \rho(\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} - I), \\ \mathcal{A}^{(3)}(\boldsymbol{x}, t) &= \boldsymbol{Q} + \tilde{3}\boldsymbol{u}\boldsymbol{P} + \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \tilde{3}\rho\boldsymbol{u}I, \\ \mathcal{A}^{(4)}(\boldsymbol{x}, t) &= \boldsymbol{R} + \tilde{4}\boldsymbol{u}\boldsymbol{Q} + \tilde{6}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{P} + \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} - \tilde{6}(\boldsymbol{P}I - \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}I) + \tilde{3}\rho II.\end{aligned}\quad (64)$$

Estendendo a mesma abordagem para a função distribuição de equilíbrio, onde

$$\mathcal{A}_{eq}^{(n)}(\boldsymbol{x}, t) = \int f_{eq}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (65)$$

para $f_{eq} = \sum_p f_{eq}^{(p)}$, tem-se até a 4ª ordem do coeficiente de expansão equilíbrio

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{eq}^{(0)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho, & \mathcal{A}_{eq}^{(1)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}, & \mathcal{A}_{eq}^{(2)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \rho\Theta I, \\ \mathcal{A}_{eq}^{(3)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \tilde{3}\rho\boldsymbol{u}\Theta I, \\ \mathcal{A}_{eq}^{(4)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \tilde{6}\rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\Theta I + \tilde{3}\rho\Theta^2 II.\end{aligned}\quad (66)$$

Escrevendo em função de θ , tem-se

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{eq}^{(0)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho, & \mathcal{A}_{eq}^{(1)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}, & \mathcal{A}_{eq}^{(2)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \rho(\theta - 1) I, \\ \mathcal{A}_{eq}^{(3)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \tilde{3}\rho\boldsymbol{u}(\theta - 1) I, \\ \mathcal{A}_{eq}^{(4)}(\boldsymbol{x}, t) &= \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u} + \tilde{6}\rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}(\theta - 1) I + \tilde{3}\rho(\theta - 1)^2 II.\end{aligned}\quad (67)$$

3.1.5 Equações Macroscópicas de Equilíbrio (Equações de Euler)

Com as simplificações do operador de colisão definidas e as funções distribuição representadas na sua forma expandida, a equação de Boltzmann por integração sobre espaço de velocidades pode ser empregada na representação de equações que descrevem fenômenos de transporte.

Recuperando as equações macroscópicas para um estado de equilíbrio, *i.e.*, $f \approx f_{eq}$, a Eq. (40) é integrada (considerando as simplificações do modelo de colisão apresentadas na Sec. 3.1.2) sobre os momentos de Hermite, sendo representada por

$$\int (\partial_t + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}}) f_{eq} \mathcal{H}^{(n)} d\boldsymbol{\xi} = \int \sum_{p=1}^r \left(-\frac{(f_{eq}^{(p)} - f_{eq}^{(p)})}{\tau} \right) \mathcal{H}^{(n)} d\boldsymbol{\xi}, \quad (68)$$

$$\partial_t \left(\mathcal{A}_{eq}^{(n)} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathcal{A}_{eq}^{(n+1)} \right) + \tilde{n} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathcal{A}_{eq}^{(n-1)} \mathbf{I} \right) - \tilde{n} \mathbf{g} \cdot \left(\mathcal{A}_{eq}^{(n-1)} \mathbf{I} \right) = 0, \quad (69)$$

onde os termos de força, referentes aos termos de correção de Enskog (Eq. 45) e de potencial intermolecular entre componentes (Eq. 50) permanecem dentro de $\mathbf{g} = \sum_p \mathbf{g}^{(ps)}$. Aplicando a Eq. (69) até a ordem $n = 2$, tem-se

$$\begin{aligned} n = 0 &\rightarrow \partial_t \rho + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ n = 1 &\rightarrow \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \rho (\Theta + 1) \mathbf{I}) = \rho \mathbf{g}, \\ n = 2 &\rightarrow \partial_t (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \rho \Theta \mathbf{I}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u} + \tilde{3} \rho \mathbf{u} \Theta \mathbf{I}) + \tilde{2} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{I} = \tilde{2} \mathbf{g} \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{I}, \end{aligned} \quad (70)$$

fazendo o traço em $n = 2$ e dividindo por $1/2$, após algumas manipulações algébricas, chega-se a:

$$n = 2 \rightarrow \frac{1}{2} Tr() \rightarrow \partial_t (\rho \epsilon) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \epsilon \mathbf{u}) + \rho (\Theta + 1) \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (71)$$

Considerando a pressão do fluido $p = \rho (\Theta + 1)$, as Eqs. (70) e (71) recuperam as equações de Euler para a representação de um fluido invíscido e compressível.

3.1.6 Equações de Navier-Stokes e Além - Análise de Chapman-Enskog

Numa análise mais ampla, a metodologia de Chapman-Enskog pode ser empregada com o objetivo de estender a capacidade de representação da equação de Boltzmann. Sendo que esta metodologia consiste de uma expansão assintótica em termos de Knudsen da função

distribuição e da derivada parcial no tempo:

$$f = f_{(0)} + Knf_{(1)} + Kn^2f_{(2)} + \dots, \quad (72)$$

$$\partial_t = \partial_t^{(0)} + Kn\partial_t^{(1)} + Kn^2\partial_t^{(2)} + \dots. \quad (73)$$

Substituindo as Eqs.(72) e (73) na Eq.(42), somando sobre todos os componentes, considerando o termo de colisão representado pela Eq.(45) e separando os termos em ordem de Knudsen (SHAN; YUAN; CHEN, 2006), obtém-se

$$\begin{aligned} (Kn^{(-1)}) : \quad f_{(0)} &= \sum_p f_{eq}^{(p)}, \\ (Kn^{(0)}) : \quad f_{(1)} &= -\tau \left(\partial_t^{(0)} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + g \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \right) f_{(0)}, \\ (Kn^{(1)}) : \quad f_{(2)} &= -\tau \left(\partial_t^{(1)} f_{(0)} + \left(\partial_t^{(0)} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} + g \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \right) f_{(1)} \right), \\ (Kn^{(n)}) : \quad f_{(k+1)} &= -\tau \left(\sum_{m=0}^k \partial_t^{(k-m)} f_{(m)}^{(p)} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_{(k)}^{(p)} + g \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f_{(k)} \right). \end{aligned} \quad (74)$$

Dado a relação de escala $Kn^{(-1)}$ obtida na Eq.(74), pode se definir a parte não-equilíbrio da função distribuição como

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = f_{(eq)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + f_{(neq)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t), \quad (75)$$

onde

$$f_{(neq)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = f_{(1)} + f_{(2)} + f_{(3)} + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} f_{(k)}. \quad (76)$$

Projetando a função de não-equilíbrio em bases de Hermite, tem-se

$$f_{neq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \sum_{k=1}^{\infty} f_{(k)} = \sum_{k=1}^{\infty} \left(w(\boldsymbol{\xi}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathcal{A}_{(k)}^{(n)}(\mathbf{x}, t) : \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) \right), \quad (77)$$

onde o coeficiente de expansão é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{k+1}^{(n)} &= -\tau \left(\sum_{m=0}^k \partial_t^{(k-m)} \left(\mathcal{A}_m^{(n)} \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathcal{A}_k^{(n+1)} \right) \right. \\ &\quad \left. + \tilde{n} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathcal{A}_k^{(n-1)} \mathbf{I} \right) - \tilde{n} \mathbf{g} \cdot \left(\mathcal{A}_k^{(n-1)} \mathbf{I} \right) \right). \end{aligned} \quad (78)$$

No objetivo de recuperar as equações de Navier-Stokes, a função distribuição (Eq. 72) é truncada na ordem de $Kn^{(1)}$, resultando em $f_{neq} \approx f_{(1)}$. Calculando os coeficientes para $a_1^{(n)}$,

têm-se

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_1^{(0)} &= 0, \\
\mathcal{A}_1^{(1)} &= 0, \\
\mathcal{A}_1^{(2)} &= -\tau\rho\theta \left(\tilde{2}\nabla\mathbf{u} - \frac{2}{D}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \right), \\
\mathcal{A}_1^{(3)} &= -\tau\rho\theta \left(\tilde{3}\mathbf{u} \left(\tilde{2}\nabla\mathbf{u} - \frac{2}{D}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \right) + \tilde{3}\nabla\theta\mathbf{I} \right),
\end{aligned} \tag{79}$$

para detalhes algébricos do processo ver Peng (2011).

Integrando a Eq.(40) sobre os momentos de Hermite, obtém-se

$$\int (\partial_t + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_x + \mathbf{g} \cdot \nabla_\xi) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} = \int \sum_p \left(-\frac{(f^{(p)} - f_{eq}^{(p)})}{\tau} \right) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \tag{80}$$

$$-\frac{(\mathcal{A}^{(n)} - \mathcal{A}_{eq}^{(n)})}{\tau} = \partial_t (\mathcal{A}^{(n)}) + \nabla_x \cdot (\mathcal{A}^{(n+1)}) + \tilde{n}\nabla_x \cdot (\mathcal{A}^{(n-1)}\mathbf{I}) - \tilde{n}\mathbf{g} \cdot (\mathcal{A}^{(n-1)}\mathbf{I}), \tag{81}$$

onde $\mathcal{A}^{(n)} = \mathcal{A}_{eq}^{(n)} + \mathcal{A}_1^{(n)}$. Extendendo a Eq.(81) até $n = 2$, obtém-se as equações macroscópicas de Navier-Stokes:

$$\begin{aligned}
n = 0 &\rightarrow \partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0 \\
n = 1 &\rightarrow \partial_t(\rho\mathbf{u}) + \nabla_x \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u} + p\mathbf{I} - \mu\boldsymbol{\Lambda}) = \rho\mathbf{g} \\
n = 2 &\rightarrow \frac{1}{2}Tr() \rightarrow \partial_t(\rho\epsilon) + \nabla_x \cdot (\rho\epsilon\mathbf{u}) + (p\mathbf{I} - \mu\boldsymbol{\Lambda}) : \nabla_x\mathbf{u} + \\
&\quad -\nabla \cdot (k\nabla\theta) = 0
\end{aligned} \tag{82}$$

onde $\boldsymbol{\Lambda} = \left(\tilde{2}\nabla\mathbf{u} - \frac{2}{D}(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} \right)$ é o tensor taxa de deformação, $\mu = \tau\theta\rho$ a viscosidade dinâmica, e $k = \frac{D+2}{2}\tau\theta\rho$ a condutividade térmica.

Estendendo a representação da função distribuição para maiores ordens de Knudsen, a equação de Boltzmann alcança através da análise de Chapman-Enskog representações além das equações de Navier-Stokes, como exemplo as equações Burnett (STRUCHTRUP, 2005).

3.2 Equação de Boltzmann Discreta no Espaço de Velocidades

O processo de discretização da equação de Boltzmann no espaço de velocidades é um importante passo na representação numérica das equações macroscópicas desejadas, sendo que este processo de discretização está diretamente relacionado com a recuperação das diferentes ordens do coeficiente de expansão (Eq.63). No espaço contínuo recupera-se de $\mathcal{A}^{(0)}$ até $\mathcal{A}^{(\infty)}$, enquanto na forma discreta recupera-se $\mathcal{A}^{(0)}$ até $\mathcal{A}^{(N)}$ de acordo com o nível (N) de discretização. Diferentes metodologias podem ser utilizados no processo de discretização

do espaço de velocidades, como exemplo as metodologias apresentadas em Abe (1997), He e Luo (1997), Shan, Yuan e Chen (2006) e Philippi *et al.* (2006). No presente trabalho utiliza-se a metodologia desenvolvida por Philippi *et al.* (2006), denominado de método das abscissas prescritas, onde o procedimento de quadratura e a projeção em polinômios de Hermite das funções distribuição no espaço de funções ortogonais (espaço Hilbert) são empregados na conversão da função f contínua no espaço de velocidades em representações discretas por números reais (Figura 6). Para detalhes do método de quadratura e projeção em polinômios de Hermite, ver Krüger *et al.* (2017) e Philippi *et al.* (2006).

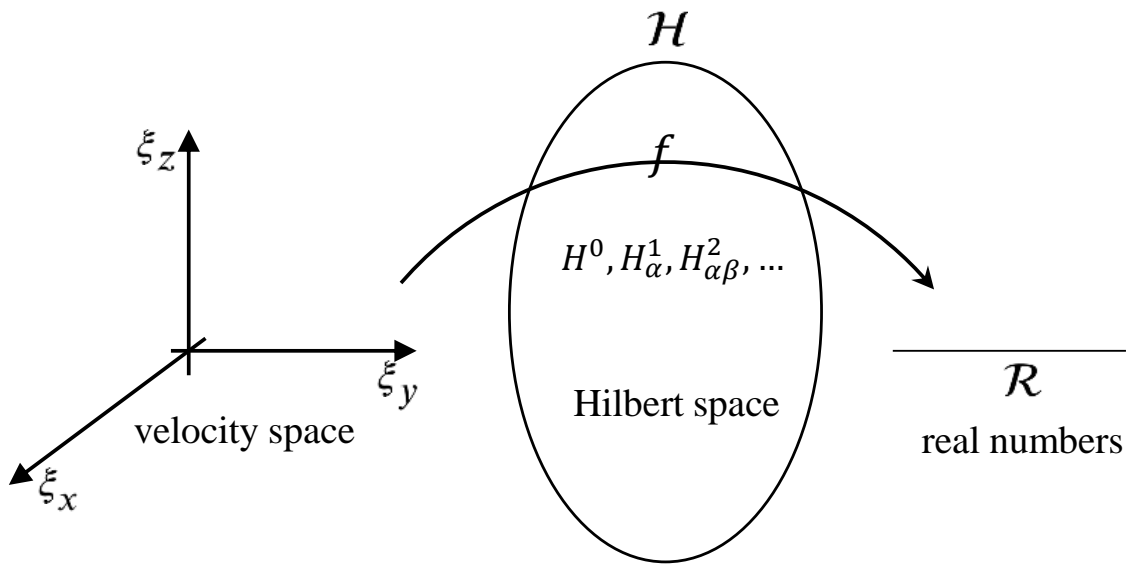


Figura 6 – Conversão da função distribuição contínua em discreta, no espaço de Hilbert .

A principal função que caracteriza o método das abscissas prescritas é representada pela aplicação do procedimento de quadratura na função distribuição de equilíbrio truncada na ordem N dos polinômios de Hermite, dada por

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\xi}}{(2\pi)^{D/2}} [\mathcal{H}^{(n)}(\xi)]^2 d\xi = \sum_{i=0}^{N_b-1} W_i [\mathcal{H}^{(n)}(\xi_i)]^2, \quad (83)$$

onde $n = 0$ vai até a ordem N da função distribuição truncada, N_b é o número de pontos de discretização, ξ_i é o vetor velocidade discreto, W_i é o fator de ponderação de cada ponto discreto i , e $[\mathcal{H}^{(n)}(\xi_i)]^2$ é uma notação representativa para um tensor onde cada componente está elevado ao quadrado.

Na forma discreta do espaço de velocidades, a função distribuição de equilíbrio é truncada na ordem N de representação do *lattice*, sendo descrita por

$$f_{i,eq}(\mathbf{x}, t) = W_i \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} \mathcal{A}_{eq}^{(n)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\xi_i) \quad (84)$$

onde os polinômios de Hermite na forma discreta são dados por

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{(0)}(\xi_i) &= 1, & \mathcal{H}^{(1)}(\xi_i) &= \frac{e_i}{c_s}, & \mathcal{H}^{(2)}(\xi_i) &= \frac{e_i e_i - c_s^2 I}{c_s^2} \\ \mathcal{H}^{(3)}(\xi_i) &= \frac{e_i e_i e_i - c_s^2 \tilde{3} e_i I}{c_s^3}, & \mathcal{H}^{(4)}(\xi_i) &= \frac{e_i e_i e_i e_i - \tilde{6} c_s^2 e_i e_i I + \tilde{3} c_s^4 I I}{c_s^4},\end{aligned}\quad (85)$$

sendo $\xi_i = e_i/c_s$, onde e_i é o vetor unitário de rede e c_s a velocidade do som (parâmetro adimensional). O coeficiente de expansão obtido através da forma discreta do polinômio de Hermite é dado por

$$\mathcal{A}_{eq}^{(n)}(\mathbf{x}, t) = \sum_i^{N_b-1} f_{i,eq}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\xi_i). \quad (86)$$

Calculando até a quarta ordem, tem-se

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_{eq}^{(0)}(\mathbf{x}, t) &= \rho, & \mathcal{A}_{eq}^{(1)}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\rho \mathbf{u}}{c_s}, & \mathcal{A}_{eq}^{(2)}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \rho \Theta c_s^2 \mathbf{I}}{c_s^2}, \\ \mathcal{A}_{eq}^{(3)}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\rho \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u} + \tilde{3} \rho \mathbf{u} \Theta c_s^2 \mathbf{I}}{c_s^3}, \\ \mathcal{A}_{eq}^{(4)}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\rho \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u} + \tilde{6} \rho \mathbf{u} \mathbf{u} \Theta c_s^2 \mathbf{I} + \tilde{3} \rho \Theta^2 c_s^4 \mathbf{I} \mathbf{I}}{c_s^4}.\end{aligned}\quad (87)$$

O método das abscissa prescritas, descrito pela Eq. (83), permite a discretização do espaço de velocidades em retículos, também chamados de *lattices*, com diferentes números de velocidades (N_b), ordens (N) e dimensões (D).

A escolha do *lattice* utilizado deve ter parâmetros N_b , N e D devidamente ajustados para recuperar os coeficientes de expansão necessários às equações macroscópicas desejadas. Na Figura 7 podem ser observados *lattices* de ordem $N = 2$ de diferentes dimensões e com números de velocidades adequadas para recuperar as equações de Navier-Stokes de balanço de massa e quantidade de movimento.

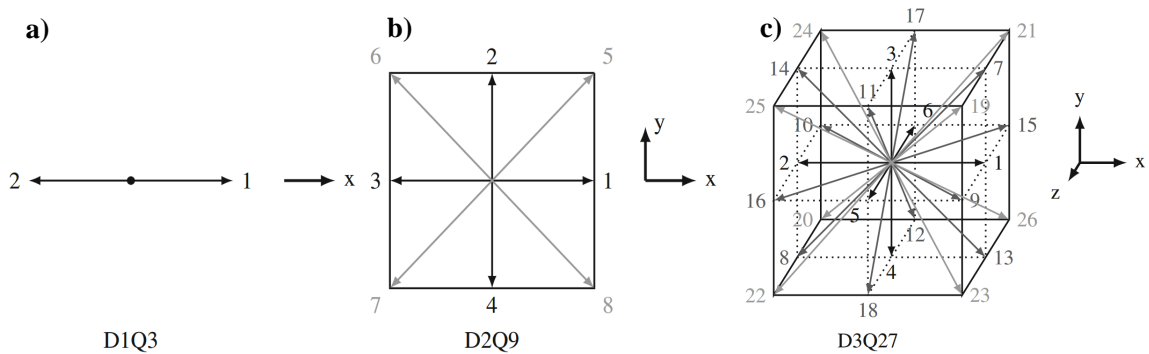


Figura 7 – Lattices: a) unidimensional com três velocidade (D1Q3); b) bidimensional com nove velocidades (D2Q9); c) tridimensional com vinte e sete velocidades (D3Q27) (Adaptado de: Krüger *et al.* (2017)).

Na representação de problemas com transferência de calor, lattices de ordens $N = 3$ e $N = 4$ recuperam parcialmente e completamente, respectivamente, as equações de Navier-Stokes-Fourier para o balanço de energia (PHILIPPI *et al.*, 2006). Contudo, os *lattices* de ordem $N > 2$, denominados de *lattices-multispeed*, atualmente possuem desafios em suas adaptações às condições de contorno para a implementação numérica. Na Figura 8 *lattices* bidimensionais de ordens $N = 3$ e $N = 4$ são ilustrados.

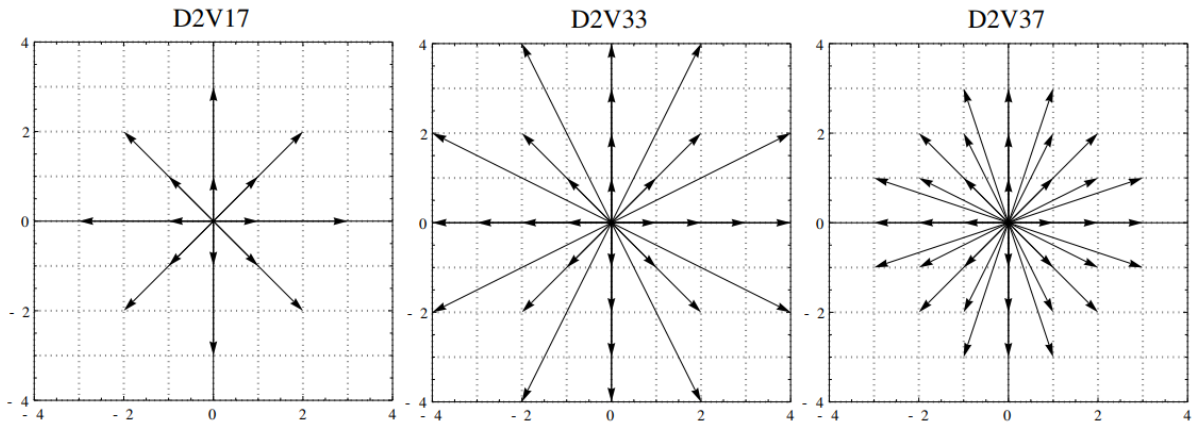


Figura 8 – Geometria dos *lattices-multispeed* D2V17 ($N = 3$), D2V33 ($N = 3$), D2V37 ($N = 4$) (Fonte: Siebert (2013)).

No presente trabalho é utilizado o *lattice* de segunda ordem D2Q9, o qual possui nove pontos de discretização ($N_b = 9$) num espaço bidimensional. Tal *lattice* é capaz representar adequadamente as equações de Navier-Stokes para a conservação da massa e quantidade de movimento, tendo a função distribuição de equilíbrio descrita na forma

$$f_{eq,i}(\mathbf{x}, t) = W_i \rho \left(1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I}) : (\mathbf{u} \mathbf{u} + \rho \Theta c_s^2 \mathbf{I})}{2c_s^4} \right), \quad (88)$$

recuperando as variáveis macroscópicas na abordagem discreta pelos somatórios

$$\rho = \sum_{i=0}^{N_b-1} f_i, \quad (89)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^{N_b-1} \mathbf{e}_i f_i, \quad (90)$$

$$\Theta = \theta - 1 = \frac{1}{2\rho c_s^2} \left(\sum_{i=0}^{N_b-1} (\mathbf{e}_i - \mathbf{u})(\mathbf{e}_i - \mathbf{u}) f_i \right) - 1. \quad (91)$$

Como resultado do processo de discretização a equação de Boltzmann é representada na forma adimensional por

$$\frac{\partial f_i^{(p)}}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i^{(p)} + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{e}_i} f_i^{(p)} = \Omega_i^{(ps)}, \quad (92)$$

onde o procedimento de adimensionalização é reajustado em função dos parâmetros discretos do espaço velocidades. Os parâmetros adimensionais na forma discreta do espaço de velocidades são dados por:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \frac{\mathbf{x}^*}{\ell}, \quad t = t^* \frac{\xi_{med}}{\ell c_s}, \quad \mathbf{e}_i = \frac{\boldsymbol{\xi}^* c_s}{\xi_{med}}, \quad \mathbf{g} = \mathbf{g}^* \frac{\ell c_s^2}{\xi_{med}^2}, \\ f_i^{(p)} &= f^{*(p)} \frac{\xi_{med}^{-D}}{\rho_{ref} c_s^D}, \quad \Omega_i^{(ps)} = \Omega^{*(ps)} \frac{\xi_{med}^{-(D+1)} \ell}{\rho_{ref} c_s^{(D+1)}}. \end{aligned} \quad (93)$$

Numa interpretação do processo de adimensionalização do operador colisão BGK, Wissocq e Sagaut (2021) consideram como o adimensional do tempo de relaxação o próprio número de Knudsen na escala discreta:

$$\frac{\partial f_i^{(p)}}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i^{(p)} + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{e}_i} f_i^{(p)} = \frac{1}{Kn} \left(f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - f_{i,eq}^{(p)}(\mathbf{x}, t) \right), \quad (94)$$

onde

$$\tau = \frac{\tau^*(\chi^{(p)}) \xi_{med}}{\ell c_s^2} = Kn, \quad (95)$$

de modo que a Eq. (94) recupera a forma de escala descrita na Eq. (42).

O processo de recuperação das equações macroscópicas partindo da Eq. (92) segue o mesmo processo desenvolvido na Sec. 3.1.6, porém com as limitações dos coeficientes de expansão recuperados pelo *lattice* em questão.

Enfim, com o processo de discretização estabelecido, o diagrama destacado na Figura 9 ilustra as relações entre as diferentes formas da equação de Boltzmann para a recuperação das equações hidrodinâmicas macroscópicas. Como analisado na Sec. 3.1.6, a recuperação das equações macroscópicas pela equação contínua de Boltzmann depende do número de Knudsen tendendo à zero. Consequentemente, com a discretização pela Eq. (83) a equação de Boltzmann discreta no espaço de velocidades carrega a dependência do número de Knudsen e também torna-se dependente da ordem N de discretização do espaço para recuperação das equações desejadas.

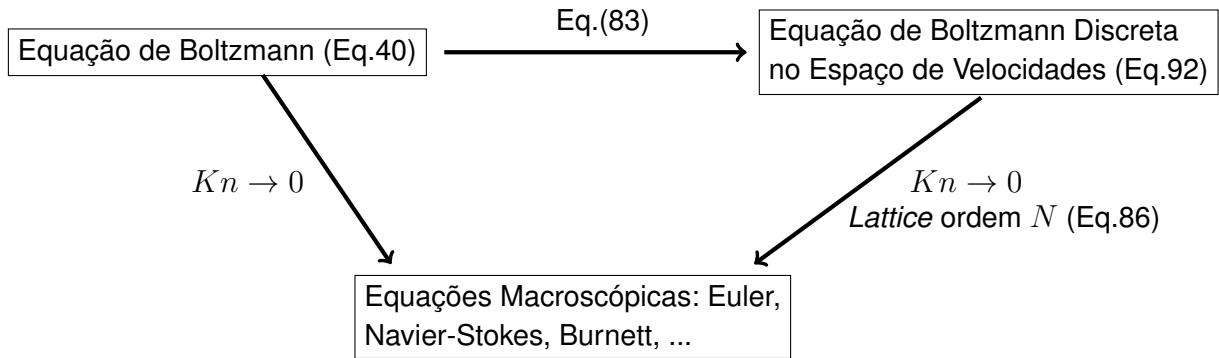


Figura 9 – Diagrama de relação entre a equação de Boltzmann discreta no espaço de velocidades e as equações hidrodinâmicas macroscópicas.

3.3 Equação *Lattice* Boltzmann

Com a equação de Boltzmann discretizada no espaço de velocidades, o último passo na abordagem *lattice* Boltzmann é a discretização do espaço-tempo. O denominado método de *lattice* Boltzmann é baseado num esquema de colisão-propagação, onde os vetores de rede (e_i) e o espaço físico estão acoplados, de maneira que, a cada passo de tempo as populações de partículas se propagam para os *lattices* vizinhos. Dada a equação de Boltzmann discreta no espaço de velocidades na forma

$$\frac{df_i^{(p)}}{dt} = \frac{\partial f_i^{(p)}}{\partial t} + e_i \cdot \nabla_x f_i^{(p)} = \Omega_i^{(ps)} - \mathbf{g} \cdot \nabla_{e_i} f_i^{(p)}, \quad (96)$$

a discretização do espaço-tempo é dada por uma expansão em séries de Taylor do termo $f_i^{(p)}(\mathbf{x} + e_i \delta_t, t + \delta_t)$ de uma diferença *forward* de $\frac{df_i^{(p)}}{dt}$, que é algebricamente representada por

$$\begin{aligned} f_i^{(p)}(\mathbf{x} + e_i \delta_t, t + \delta_t) &= f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \delta_t D_t f_i^{(p)} + \frac{\delta_t^2}{2} D_t^2 f_i^{(p)} + \frac{\delta_t^3}{6} D_t^3 f_i^{(p)} + \dots, \\ &= f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\delta_t^j}{j!} D_t^j f_i^{(p)} \end{aligned} \quad (97)$$

onde δ_t é o passo de tempo e D_t a derivada advectiva dada por

$$D_t() = \partial_t() + e_i \cdot \nabla_x(), \quad (98)$$

sendo que no presente caso a derivada advectiva de $f_i^{(p)}$ é equivalente a derivada total. Definido e_i no processo de discretização como um vetor unitário de rede (resultante do procedimento de adimensionalização adotado), o acoplamento dos vetores de rede com a discretização do espaço tempo resulta em $\delta_t = \frac{\delta_t^* \xi_{med}}{\ell_{cs}} = \frac{Kn \delta_t^*}{\tau} = 1$, visto que δ_t carrega uma relação de

dependência com número de Knudsen. A partir deste ponto, as ordens de truncamento no lado direito da Eq. (97) representam as ordens de discretização do espaço-tempo.

3.3.1 Discretização de Primeira e Segunda Ordem

Truncando a Eq.(97) no termos de segunda ordem, *i.e.*,

$$f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \delta_t D_t f_i^{(p)} + \frac{\delta_t^2}{2} D_t^2 f_i^{(p)} + \mathcal{O}(\delta_t^3) \quad (99)$$

e substituindo o termo $D_t f_i = \left(\Omega_i^{(ps)} + F_i^{(p)} \right)$, onde $F_i^{(p)} = -\mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{e}_i} f_i^{(p)}$ é o termo de força, tem-se

$$f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \delta_t \left(\Omega_i^{(ps)} + F_i^{(p)} \right) + \frac{\delta_t^2}{2} D_t \left(\Omega_i^{(ps)} + F_i^{(p)} \right) + \mathcal{O}(\delta_t^3), \quad (100)$$

aplicando uma diferença *forward* de primeira ordem no termo $D_t \left(\Omega_i^{(ps)} + F_i^{(p)} \right)$, obtém-se

$$\begin{aligned} f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = & f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta_t}{2} \left[\Omega_i^{(ps)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) + \Omega_i^{(ps)}(\mathbf{x}, t) \right] \\ & + \frac{\delta_t}{2} \left[F_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) + F_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) \right] + \mathcal{O}(\delta_t^3). \end{aligned} \quad (101)$$

Na discretização do termo $D_t \left(\Omega_i^{(ps)} + F_i^{(p)} \right)$ podem ser utilizados diferentes esquemas com o objetivo de melhorar a precisão do processo de discretização do termo derivativo, *i.e.*, diferenças centrais, *forward* ou *backward* em diferentes ordens. Contudo, a utilização de diferenças centrais ou *backward* resultam na dependência de funções distribuição de passos de tempo anteriores (e.g., $f_i^{(p)}(\mathbf{x} - \mathbf{e}_i \delta_t, t - \delta_t)$), que resultam no aumento dos custos de armazenamento computacional para simulações numéricas.

Como na Eq. (101) $f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t)$ é o valor a ser determinado e dependente de $\Omega_i^{(ps)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t)$ que é um valor desconhecido no tempo t , o esquema numérico implícito é aplicado na Eq. (101) considerando $\hat{f}_i^{(p)} = f_i^{(p)} - \left(\Omega_i^{(ps)} + F_i^{(p)} \right) / 2$, resultando em

$$\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = \hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \delta_t \Omega_i^{(ps)}(\mathbf{x}, t) + \delta_t F_i^{(p)}(\mathbf{x}, t), \quad (102)$$

substituindo operador de colisão pelo modelo BGK na forma discreta, tem-se

$$\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = \hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - \delta_t \frac{f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - f_{i,eq}^{(p)}(\mathbf{x}, t)}{\tau} + \delta_t F_i^{(p)}(\mathbf{x}, t), \quad (103)$$

substituindo $f_i^{(p)}$ presente no operador de colisão e colocando a Eq. (103) apenas em função de $\hat{f}_i^{(p)}$, obtém-se a forma final da equação *lattice* Boltzmann com discretização de segunda ordem no espaço-tempo

$$\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = \hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - f_{i,eq}^{(p)}(\mathbf{x}, t)}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}}\right) \delta_t F_i^{(p)}(\mathbf{x}, t), \quad (104)$$

onde $\hat{\tau} = \frac{\tau}{\delta_t} + \frac{1}{2}$.

Quando o termo de força pode ser desconsiderado na representação do problema, a equação LB de segunda ordem (Eq. 104) recupera a equação de primeira ordem (Eq. 105). Contudo, com o termo de força e seguindo os passos de discretização apresentados nesta seção, a equação *lattice* Boltzmann de primeira ordem é dada por

$$f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - \frac{f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - f_{i,eq}^{(p)}(\mathbf{x}, t)}{\tau} + \delta_t F_i^{(p)}(\mathbf{x}, t). \quad (105)$$

Ordens de discretização do espaço-tempo maiores que a segunda ordem, assim como no caso de utilização de diferentes formas da discretização do termo derivativo na discretização, resultam na dependência de funções distribuição de passos de tempo anteriores, os quais produzem um alto custo de armazenamento computacional. Deste modo o presente trabalho restringe-se apenas às análises dos esquemas de primeira e segunda ordem.

3.3.2 Análise de Chapman-Enskog

O procedimento da análise de Chapman-Enskog da equação LB difere em alguns aspectos da análise desenvolvida na Sec. 3.1.6. De modo que, torna-se necessário a aplicação de uma expansão em séries de Taylor no termo $f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t)$ para a recuperação da equação na forma derivativa, a qual fica representada por

$$\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - \hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\delta_t^j}{j!} D_t^j \hat{f}_i^{(p)} = - \left(\frac{\hat{f}_i^{(p)} - \hat{f}_{eq,i}^{(p)}}{\hat{\tau}} \right) + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)}, \quad (106)$$

Reinterpretando a Eq. (106) na forma adimensional de escala apresentada na Sec. 3.1.1, reescreve-se na forma

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{Kn_t^j}{Kn} \frac{1}{j!} D_t^j \hat{f}_i^{(p)} = - \frac{1}{Kn} \left(\frac{\hat{f}_i^{(p)} - \hat{f}_{eq,i}^{(p)}}{\hat{\tau}} \right) + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)}, \quad (107)$$

considerando $Kn_t \approx Kn$, tem-se

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{Kn^{(j-1)}}{j!} D_t^j \hat{f}_i^{(p)} = -\frac{1}{Kn} \left(\frac{\hat{f}_i^{(p)} - \hat{f}_{eq,i}^{(p)}}{\hat{\tau}} \right) + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)}. \quad (108)$$

Com os termos representados em suas devidas escalas, aplicam-se as expansões assintóticas da função distribuição e da derivada no tempo (Eqs. 72 e 73), e separa-se os termos em ordem de Knudsen até $Kn^{(1)}$:

$$\begin{aligned} (Kn^{(-1)}) : \quad & \hat{f}_{i(0)}^{(p)} = f_{eq,i}^{(p)}, \\ (Kn^{(0)}) : \quad & \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \hat{f}_{i(0)}^{(p)} = -\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)}}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)}, \\ (Kn^{(1)}) : \quad & \partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \hat{f}_{i(1)}^{(p)} + \frac{\left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right)^2 \hat{f}_{i(0)}^{(p)}}{2} = -\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)}}{\hat{\tau}}, \end{aligned} \quad (109)$$

ou

$$(Kn^{(1)}) : \quad \partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\hat{f}_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i}{2} \right) = -\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)}}{\hat{\tau}},$$

sendo $\hat{\tau}$ uma função local das propriedades dos componentes, *i.e.*, de valor igual na posição \mathbf{x} para qualquer componente p de $f_i^{(p)}$. A Eq. (109) pode ser facilmente estendida para a mistura na forma

$$\begin{aligned} (Kn^{(-1)}) : \quad & \hat{f}_{i(0)} = \sum_p f_{eq,i}^{(p)}, \\ (Kn^{(0)}) : \quad & \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \hat{f}_{i(0)} = -\frac{\hat{f}_{i(1)}}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \sum_p F_i^{(p)}, \\ (Kn^{(1)}) : \quad & \partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \hat{f}_{i(1)} + \frac{\left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right)^2 \hat{f}_{i(0)}}{2} = -\frac{\hat{f}_{i(2)}}{\hat{\tau}}, \end{aligned} \quad (110)$$

ou

$$(Kn^{(1)}) : \quad \partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\hat{f}_{i(1)} + \frac{F_i}{2} \right) = -\frac{\hat{f}_{i(2)}}{\hat{\tau}}.$$

Similarmente ao desenvolvido na Sec. 3.1.6, somando os termos de diferentes ordens de Knudsen sobre todas as direções do *lattice* e em diferentes ordens de momento, recuperam-se as equações macroscópicas de balanço de massa, quantidade de movimento e energia. Contudo, tal procedimento de análise será detalhado na sequência deste trabalho, em específico na Sec. 4.3.6, com foco nas equações macroscópicas recuperadas e erros de aproximação que envolvem o processo. Detalhes complementares da análise Chapman-Enskog na equação

lattice Boltzmann podem ser observados em Guo e Shu (2013), Huang, Sukop e Lu (2015), Krüger *et al.* (2017) e Farag *et al.* (2020).

Por fim, as relações de recuperação das equações macroscópicas pela equação LB e as diferentes formas da equação de Boltzmann são ilustradas no diagrama esquemático da Figura 10. Observa-se que a equação LB carrega as dependências de Knudsen tendendo à zero, a ordem do *Lattice*, e adiciona-se a dependência do passo de tempo tendendo à zero. Entretanto, devido ao acoplamento do espaço-tempo as relações $Kn \rightarrow 0$ e $\delta_t \rightarrow 0$ são diretamente proporcionais no método. Complementarmente, a relação Kn e δ_t em casos onde ocorre o escoamento de fluidos, *i.e.*, $|\mathbf{u}| \neq 0$, pode ser atrelada ao número de Mach do escoamento, representado no LBM por

$$Ma = \frac{U_{ref}}{c_s}, \quad (111)$$

de modo que, quanto menor Ma menor será Kn e δ_t .

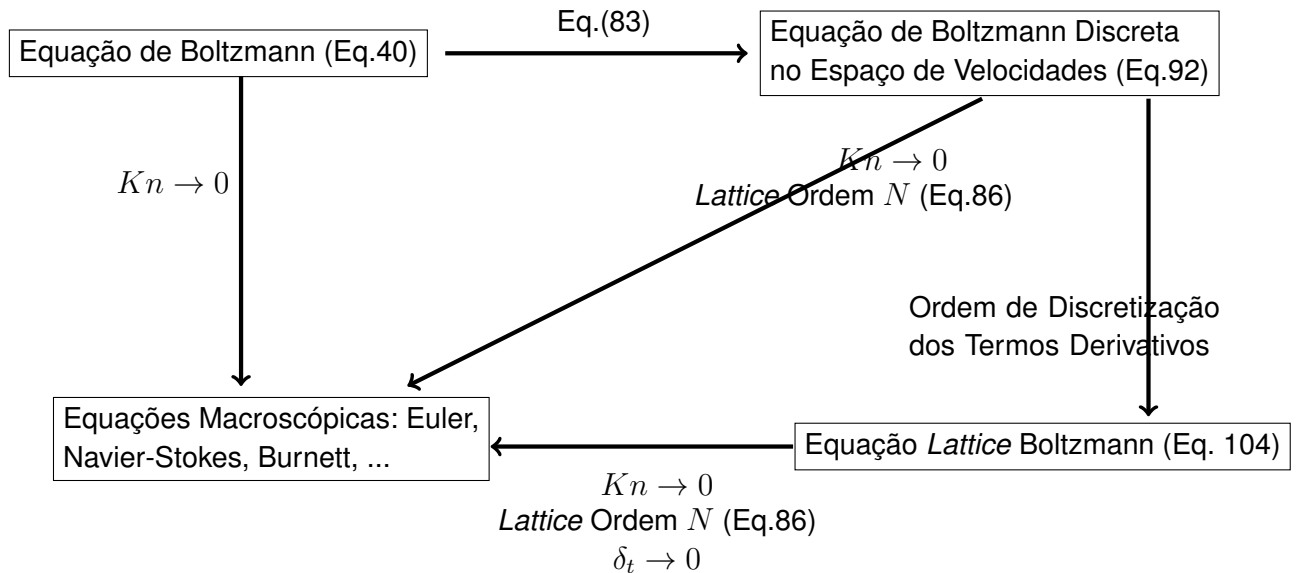


Figura 10 – Diagrama de relação entre as formas da equação de Boltzmann e as equações macroscópicas de Hidrodinâmica.

4 MODELO LB MULTICOMPONENTE

Neste capítulo desenvolve-se a formulação matemática do presente modelo multicomponente, o qual baseia-se num aprimoramento do modelo pseudo-potencial desenvolvido por Shan e Chen (1993). Tendo como base inicial o modelo pseudo-potencial e utilizando os conceitos da abordagem LB desenvolvida na Capítulo 3, o desenvolvimento do presente modelo segue a implementação de esquemas de discretização de alta ordem e extensão/adaptações de modelagens, as quais eliminam erros de modelagem discreta e de representação física característicos da abordagem pseudo-potencial. Adicionalmente, as modificações implementadas buscam alcançar um modelo multicomponente termodinamicamente consistente com as hipóteses e simplificações admitidas na formulação de interface difusa. Para isto, utiliza-se como referência a abordagem LB termodinamicamente consistente apresentada por Philippi *et al.* (2012) para representação de segregação em misturas não-ideais.

No desenvolvimento do capítulo, inicialmente revisa-se o modelo cinético descrito por Philippi *et al.* (2012) e o modelo LB pseudo-potencial, ambos com foco nas suas equações macroscópicas recuperadas. Na sequência, a modelagem multicomponente, tendo como ponto de partida o modelo pseudo-potencial, é desenvolvida com foco: na representação do tempo de relaxação e do termo de força; na discretização do espaço-tempo; e na descrição de um termo de colisão baseado em momentos que satisfaçam a hipótese de Stokes. Por fim, a formulação matemática do modelo numérico desenvolvido é comparado com os modelos pseudo-potencial e de Philippi *et al.* (2012).

4.1 Modelo Cinético Multicomponente

Com o objetivo de representar um modelo cinético multicomponente para fluidos imiscíveis que seja termodinamicamente consistente com o modelo de interface difusa, no presente trabalho utiliza-se como referência o modelo cinético descrito por Philippi *et al.* (2012) para representação de misturas não-ideais, onde o termo não-ideal refere-se a presença do termo de correção de Enskog. A equação cinética do modelo é descrita por

$$\partial_t f_i^{(p)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i^{(p)} = -\frac{f_i^{(p)} - f_{eq,i}^{(p)}(\rho^{(p)}, \mathbf{u})}{\tau} + \nabla_{\mathbf{e}_i} f_i^{(p)} \cdot \left(\mathbf{g}^e - \frac{\chi^{(p)}}{\rho} \nabla_{\mathbf{x}} \frac{b\rho^2 c_s^2}{1 - b\rho} + \sum_{s=1}^r \mathbf{g}^{(ps)} \right), \quad (112)$$

com os termos de colisão repulsivos e atrativos descritos pelas Eqs. (45) e (50), respectivamente. Considerando a representação de um modelo isotérmico, o termo Θ é nulo e a função distribuição de equilíbrio é dada por

$$f_{eq,i}^{(p)}(\mathbf{x}, t) = W_i \rho^{(p)} \left(1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{\mathbf{u}\mathbf{u} : (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I})}{2c_s^4} \right), \quad (113)$$

onda as propriedades são recuperadas por

$$\rho^{(p)} = \sum_{i=0}^{N_b-1} f_i^{(p)}, \quad (114)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{u}^{(p)} = \sum_p \sum_{i=0}^{N_b-1} e_i f_i^{(p)}. \quad (115)$$

Na discretização do espaço de velocidade considerado-se uma aproximação de segunda-ordem ($N = 2$) de nove pontos, obtendo-se o conjunto bidimensional de vetores de rede D2Q9, onde

$$\begin{aligned} e_{i=0} &= (0,0), \\ e_{i=1,2,3,4} &= \left(\cos \frac{i-1}{2} \pi, \sin \frac{i-1}{2} \pi \right), \\ e_{i=5,6,7,8} &= \sqrt{2} \left(\cos \frac{i-5}{2} \pi + \frac{\pi}{4}, \sin \frac{i-5}{2} \pi + \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \quad (116)$$

Os fatores de ponderação do *lattice* D2Q9 são dados por $W_0 = 4/9$, $W_i = 1/9$ para $i = 1,2,3,4$; e $W_i = 1/36$ para $i = 5,6,7,8$; e a velocidade do som por $c_s = 1/\sqrt{3}$.

Aplicando uma análise de Chapman-Enskog na Eq. (112) (seguindo o processo apresentado na Sec.3.1.6) as equações macroscópicas da mistura são recuperadas na forma

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (117)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla_x \cdot \left(\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \mathcal{P} - \rho \nu \left(\nabla_x \mathbf{u} + (\nabla_x \mathbf{u})^T - \frac{2}{D} (\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right) = \rho \mathbf{g}^e, \quad (118)$$

onde \mathcal{P} é o tensor pressão representado por

$$\mathcal{P} = P_s \mathbf{I} + \mathbf{S}, \quad (119)$$

a pressão escalar P_s é dada por

$$P_s = P_e - \frac{1}{2} \left(\nabla_x^2 (\kappa \rho^2) - \sum_{p,s} \kappa^{(ps)} \nabla_x \rho^{(p)} \cdot \nabla_x \rho^{(s)} \right), \quad \kappa = \sum_{p,s} \chi^{(p)} \chi^{(s)} \kappa^{(ps)}, \quad (120)$$

a pressão termodinâmica P_e por

$$P_e = \frac{\rho c_s^2}{1 - b\rho} - a\rho^2, \quad a = \sum_{p,s} \chi^{(p)} \chi^{(s)} a^{(ps)}, \quad (121)$$

e o tensor de Korteweg \mathbf{S} por

$$\mathbf{S} = \sum_{p,s} \kappa^{(ps)} (\nabla_x \rho^{(p)} \nabla_x \rho^{(s)}). \quad (122)$$

As equações recuperadas (Eqs. 117 e 118) estão de acordo com o modelo de interface difusa desenvolvido na Sec. 2.3.2. Contudo, o termo

$$\mathbf{\Pi}_{vol} = \frac{2}{D} (\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I}, \quad (123)$$

referente a taxa de deformação volumétrica do fluido é recuperado pelo modelo seguindo as equações de balanço da energia recuperadas pela *lattice* D2Q9. Tal procedimento de recuperação do tensor taxa de deformação volumétrica é detalhado na Sec. 4.3.6 para a equação LB discreta no espaço-tempo.

4.2 Modelo LB pseudo-potencial

O modelo de pseudo-potencial, proposto por Shan e Chen (1993), foi construído sobre o LBM para representar misturas não-ideais com base na interação de forças potenciais entre as partículas de cada componente. A equação LB do modelo pseudo-potencial para r componentes é descrita por

$$f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \frac{(f_{eq,i}^{(p)}(\rho_\sigma, \mathbf{u}_*^{(p)}) - f_i^{(p)})}{\tau^{(p)}}, \quad (124)$$

onde a velocidade deslocada $\mathbf{u}_*^{(p)}$ é obtida por

$$\mathbf{u}_*^{(p)} = \frac{\sum_s \frac{\rho^{(s)} \mathbf{u}^{(s)}}{\tau^{(s)}}}{\sum_s \frac{\rho^{(s)}}{\tau^{(s)}}} + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}. \quad (125)$$

Reescrevendo a Eq. (124), de modo que os termos $\mathbf{g}^{(p)}$ fiquem fora da função distribuição de equilíbrio, tem-se

$$f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \underbrace{\frac{(f_{eq,i}^{(p)}(\rho_\sigma, \mathbf{u}') - f_i^{(p)})}{\tau^{(p)}}}_{\Omega_{rep}^{(ps)}} + \underbrace{F_{SC,i}^{(p)}}_{\Omega_{rep}^{(ps)}} \quad (126)$$

onde o termo de força $F_{SC,i}^{(p)}$ é dado por

$$F_{SC,i}^{(p)} = W_i \rho^{(p)} \left(\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{g}^{(p)}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 I) : (\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + (\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}')^T + \tau \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)})}{2c_s^4} \right), \quad (127)$$

sendo $\mathbf{u}' = \sum_s \frac{\rho^{(s)} \mathbf{u}^{(s)}}{\tau^{(s)}} / \sum_s \frac{\rho^{(s)}}{\tau^{(s)}}$ e $\sum_i f_i^{(s)} \mathbf{e}_i = \rho^{(s)} \mathbf{u}^{(s)}$. De modo que, na forma reescrita, são separados e evidenciados na equação (Eq. 126) os termos que representam as interações de curto e longo alcance do modelo. Sendo as interações de longo alcance representados por forças repulsivas no modelos pseudo-potencial.

Destaca-se que o processo de colisão descrito pela Eq. (126) satisfaz a conservação local de massa da mistura, mas não satisfaz a conservação local da quantidade de movimento, *i.e.*,

$$\underbrace{\sum_p \sum_i \left(\underbrace{f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1)}_{f_i^{(p)'}} - \underbrace{f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t)}_{f_i^{(p)}} \right)}_{\text{Conservação da Massa Local da Mistura}} = \sum_p \sum_i \frac{(f_i^{(p)} - f_{eq,i}(\rho_\sigma, \mathbf{u}_*^{(p)}))}{\tau^{(p)}} = 0, \quad (128)$$

$$\underbrace{\sum_p \sum_i (f_i^{(p)'} - f_i^{(p)}) \mathbf{e}_i}_{\text{Não Conservação da Quantidade de Movimento Local da Mistura}} = \sum_p \sum_i \left(\frac{f_i^{(p)} - f_{eq,i}(\rho_\sigma, \mathbf{u}_*^{(p)})}{\tau^{(p)}} \right) \mathbf{e}_i = \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}, \quad (129)$$

sendo a não conservação local da quantidade de movimento no modelo de colisão (lado direito da Eq. 129) um resultado direto das considerações de forças de longo alcance (representadas pela Eq. 46) em modelagens multicomponentes. Exclusivamente, o termo de forças repulsivas do modelo de colisão, destacadas na Eq.(126), satisfaz a conservação local de quantidade de movimento da mistura. Contudo, quando considerada a conservação da quantidade de mo-

vimento global da mistura, *i.e.*, estendendo o calculo para todo o domínio fluido, tem-se

$$\underbrace{\sum_{\mathbf{x}} \sum_p \sum_i \left(f_i^{(p)'} - f_i^{(p)} \right) \mathbf{e}_i = \sum_{\mathbf{x}} \sum_p \sum_i \left(\frac{f_i^{(p)} - f_{eq,i} \left(\rho_{\sigma}, \mathbf{u}_*^{(p)} \right)}{\tau^{(p)}} \right) \mathbf{e}_i = \sum_{\mathbf{x}} \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} = 0,}_{\text{Conservação da Quantidade de Movimento Global da Mistura}} \quad (130)$$

satisfazendo a conservação da quantidade de movimento pela isotropia do modelo de força das interações de longo alcance.

Dado a não conservação local da quantidade de movimento da mistura, Shan e Doolen (1995) abordam a questão de como determinar a velocidade local resultante do fluido. Com base na média aritmética das velocidades pré e pós colisional, Shan e Doolen (1995) propõem a determinação da velocidade resultante no modelo pseudo-potencial por

$$\rho \mathbf{u} = \sum_p \sum_i f_i^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{\delta_t}{2} \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}, \quad (131)$$

onde $\rho = \sum_p \rho^{(p)} = \sum_p \sum_i f_i^{(p)}$. Contudo, a velocidade resultante não está presente na equação LB do modelo, sendo utilizada apenas como um tratamento de dados dos resultados obtidos na simulação.

O termo de aceleração $\mathbf{g}^{(p)}$, que incorpora as forças intermoleculares entre o componente p e os componentes da mistura \bar{p} , é representado por

$$\mathbf{g}^{(p)} = \mathbf{g}^e + \frac{\Psi^{(p)}}{\rho^{(p)}} \sum_{\bar{p}} G^{(p\bar{p})} \sum_i W_i(\mathbf{e}_i) \Psi^{(\bar{p})}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) \mathbf{e}_i \quad (132)$$

onde Ψ é massa virtual, \bar{p} indica um componente da mistura diferente de p , e $G^{(p\bar{p})}$, que é denominado força de interação, é um parâmetro molecular dependente apenas da interação intermolecular entre p e \bar{p} . Com base num potencial de repulsão, o parâmetro $G^{(p\bar{p})}$ é responsável pelo processo de segregação na interface e, conseqüentemente, pela imiscibilidade da mistura. Expandindo a Eq. (132) em séries de Taylor para representar a massa virtual $\Psi^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i h, t)$ em termos de $\Psi^{(p)}(\mathbf{x}, t)$ (neste desenvolvimento será utilizado a notação indicial para representação de vetores e tensores, para detalhes de notação do presente trabalho ver Apêndice A), tem-se

$$(g_{\alpha}^{(p)} - g_{\alpha}^e) = \frac{\Psi^{(p)}}{\rho^{(p)}} \sum_{\bar{p}} G^{(p\bar{p})} \left(E^{(1)} \Psi^{(\bar{p})} + E^{(2)} \partial_{\alpha} \Psi^{(\bar{p})} + \frac{1}{2} E^{(3)} \partial_{\alpha\beta} \Psi^{(\bar{p})} + \frac{1}{6} E^{(4)} \partial_{\alpha\beta\gamma} \Psi^{(\bar{p})} + \dots \right) \quad (133)$$

onde $E^{(n)}$ é um tensor de ordem n representado por

$$E^{(n)} = E_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}^{(n)} = \sum_i^d w_i e_{i, \alpha_1} e_{i, \alpha_2} \dots e_{i, \alpha_n}. \quad (134)$$

Levando em consideração a isotropia do espaço de velocidades discreto, os termos de ordem ímpar tornam-se nulos, *i.e.* $E^{(2n-1)} = 0$, e os termos de ordem par são representados por

$$E^{(2n)} = c_s^{2n} \delta_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}^{(2n)}, \quad (135)$$

onde $\delta_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}^{(2n)}$ é o delta de Kronecker generalizado de ordem $2n$, que representa a soma de todas as possíveis combinações dos produtos de delta, *e.g.*, para $E^{(4)}$ tem-se $E^{(4)} = c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma})$. Enfim, truncando a Eq. (133) nos termos de quarta ordem e substituindo os tensores, recupera-se a aproximação de campo-médio do modelo pseudo-potencial na forma

$$(g_\alpha^{(p)} - g_\alpha^e) = \frac{\Psi^{(p)}}{\rho^{(p)}} \sum_{\bar{p}} G^{(p\bar{p})} \left(c_s^2 \partial_\alpha \Psi^{(\bar{p})} + \frac{c_s^4}{2} \partial_{\alpha\beta\beta} \Psi^{(\bar{p})} \right). \quad (136)$$

4.2.1 Análise de Chapman-Enskog

As equações macroscópicas que representam o modelo pseudo-potencial podem ser obtidas através do processo de análise de Chapman-Enskog de sua equação LB. Na literatura, a análise de Chapman-Enskog apresentada por Shan e Doolen (1995) é comumente utilizada e aceita na descrição das equações de balanço de massa e quantidade de movimento do modelo pseudo-potencial. Contudo, o presente trabalho propõe uma reinterpretação da análise de Shan e Doolen (1995), levando em conta a separação em escalas Knudsen no processo e a correspondência das propriedades macroscópicas recuperadas com a discretização do espaço-tempo. A análise proposta tem o objetivo de melhor representar as equações macroscópicas que descrevem o modelo, assim como identificar erros de representação e discretização que possam ser minimizados ou removidos para o seu aprimoramento.

No Apêndice C, o processo de análise de Chapman-Enskog do modelo pseudo-potencial é detalhado e discutido para as análises de Shan e Doolen (1995) e para a análise propostas.

4.2.1.1 Abordagem de Shan e Doolen (1995)

Seguindo o procedimento de análise apresentado em Shan e Doolen (1995) e Shan e Doolen (1996), recuperam-se as equações de balanço de massa do componente e da mistura, e de balanço de quantidade de movimento do componente e da mistura, respectivamente dadas por

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho^{(p)} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}) &= -\tau^{(p)} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} + \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \nabla_x \cdot \left(c_s^2 \nabla_x \rho^{(p)} - \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} \right) + \\
&+ \nabla_x \cdot \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \left(\sum_p \left(\tau^{(p)} + \frac{1}{2} \right) \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} + \sum_p \tau^{(p)} \rho^{(p)} \frac{\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc}}{\rho} - c_s^2 \sum_p \tau^{(p)} \nabla_x \rho^{(p)} \right), \\
\partial_t \rho^{(p)} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}) &= -\nabla_x \cdot (\rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u})),
\end{aligned}$$

Balanço de massa do componente p

(137)

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0,$$

Balanço de massa da mistura

(138)

$$\begin{aligned}
\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u}) + \partial_t^{(0)} (\rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u})) + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} (\mathbf{u}' \mathbf{u}' - \mathbf{u} \mathbf{u})) &= -\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \\
&+ \nabla_x \cdot \left(\left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) (c_s^2 \rho^{(p)} (\nabla_x \mathbf{u} + (\nabla_x \mathbf{u})^T)) \right) + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e + \\
&+ \nabla_x \cdot \left(\left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{2} \mathbf{u} \nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)}) - \tilde{2} \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \mathbf{u} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^e \right) \right) , \\
&\quad \underbrace{-\nabla_x \cdot (\tau^{(p)} \tilde{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}') - \nabla_x \cdot (\tau^{(p)2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)})}_{\text{Erros de discretização}}
\end{aligned}$$

Balanço de quantidade de movimento do componente p

(139)

e

$$\begin{aligned}
\partial_t^{(0)} \rho \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \nabla_x \cdot (\rho (\mathbf{u}' \mathbf{u}' - \mathbf{u} \mathbf{u})) &= -\nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e + \\
&\quad \underbrace{\text{Erros de discretização}} \\
+ \nabla_x \cdot \left(\sum_p \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \rho^{(p)} (\nabla_x \mathbf{u} + \nabla_x \mathbf{u}) \right) &- \underbrace{\sum_p \left(\nabla_x \cdot \tau^{(p)} (\tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) + \nabla_x \cdot (\tilde{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}') \right)}_{\text{Erros de Discretização}} + \\
+ \sum_p \left(\tau^{(p)} \nabla_x \cdot \left(\tilde{2} \mathbf{u} \nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)}) - \tilde{2} \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \mathbf{u} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^e \right) - \nabla_x \cdot \left(\frac{\tilde{2}}{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u} \right) \right) & \\
&\quad \underbrace{\text{Erros de discretização}}
\end{aligned}$$

Balanço de quantidade de movimento da mistura

(140)

onde $\rho \nu = \sum_p (\tau^{(p)} - \frac{1}{2}) c_s^2 \rho^{(p)}$, ν é viscosidade cinemática e \mathcal{P}_{sc} o tensor pressão representado pelo modelo pseudo-potencial na forma

$$\mathcal{P}_{sc} = \sum_p [\rho^{(p)} c_s^2 - (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e)] = P_s \mathbf{I} + \mathbf{S},$$

(141)

onde a pressão escalar P_s é representada por

$$P_s = P_e - \frac{1}{4} \sum_{p, \bar{p}} c_s^4 G^{(p\bar{p})} (\nabla_x^2 (\Psi^{(p)} \Psi^{(\bar{p})}) - \nabla_x \Psi^{(p)} \cdot \nabla_x \Psi^{(\bar{p})}), \quad (142)$$

a pressão termodinâmica P_e por

$$P_e = \rho c_s^2 - \frac{1}{2} \sum_{p, \bar{p}} c_s^2 G^{(p\bar{p})} \Psi^{(p)} \Psi^{(\bar{p})}, \quad (143)$$

e o tensor de Kortweg \mathcal{S} por

$$\mathcal{S} = \sum_{p, \bar{p}} \frac{1}{2} c_s^4 G^{(p\bar{p})} (\nabla_x \Psi^{(p)} \nabla_x \Psi^{(\bar{p})}), \quad (144)$$

podendo $a^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})}$ ser relacionados a $G^{(p\bar{p})}$, *i.e.*, $a^{(p\bar{p})} = c_s^2 G^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})} = \frac{1}{2} c_s^4 G^{(p\bar{p})}$ numa comparação com a Eq. (50). Para detalhes do processo de recuperação das Eqs. (137), (138), (139) e (140) através da análise Chapman-Enskog, ver Apêndice C.1.

Como destacado nas Eqs. (139) e (140), observam-se erros de discretização que incorporam os vetores de aceleração \mathbf{g} presentes no termo de força. Tais tipos de erros resultam da utilização do termo de força em discretizações do espaço-tempo de primeira ordem, sendo possível eliminá-los com a extensão da discretização do espaço-tempo para os termos de segunda ordem, como aplicado na Seção 3.3.1. Os últimos termos do lado direito e esquerdo da Eq. (140) são considerados erros de discretização devido à serem termos extras não esperado na equação de balanço da quantidade de movimento da mistura; porém, não é possível afirmar uma única fonte específica de origem destes erros. Contudo, considerando $\tau^p = \tau^{\bar{p}}$ o último termo do lado esquerdo da Eq. (140) é anulado e o último termo do lado direito parcialmente reduzido.

4.2.1.2 Abordagem Proposta

O procedimento de análise apresentado por Shan e Doolen (1995) demonstra incoerências em relação às interpretações dos momentos macroscópicos recuperados pelas funções distribuição, como discutido no Apêndice C. Assim como, Shan e Doolen (1995) consideram a velocidade resultante (dado pela Eq. (131)) no desenvolvimento da análise, sendo que tal velocidade não é devidamente incorporada no modelo. Deste modo, o presente trabalho propõe uma reinterpretação da análise Chapman-Enskog do modelo pseudo-potencial com base na separação dos termos em ordens de Knudsen (análise apresentada na Seção 3.3.2), a qual fica

descrita para o modelo pseudo-potencial na forma:

$$\begin{aligned}
(Kn^{(-1)}) : \quad & f_{i(0)}^{(p)} = f_{eq,i}^{(p)}(\rho^p, \mathbf{u}'), \\
(Kn^{(0)}) : \quad & \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) f_{i(0)}^{(p)} = -\frac{f_{i(1)}^{(p)}}{\tau^{(p)}} + F_{SC,i}^{(p)}, \\
(Kn^{(1)}) : \quad & \partial_t^{(1)} f_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) f_{i(1)}^{(p)} + \frac{\left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right)^2 f_{i(0)}^{(p)}}{2} = -\frac{f_{i(2)}^{(p)}}{\tau^{(p)}}, \quad (145)
\end{aligned}$$

ou

$$(Kn^{(1)}) : \quad \partial_t^{(1)} f_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) f_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i}{2} \right) = -\frac{f_{i(2)}^{(p)}}{\tau^{(p)}}.$$

visto que o termo de ordem $Kn^{(1)}$ dado pela discretização de primeira ordem do espaço-tempo difere do termo de mesma ordem da Eq. (109) que utiliza uma discretização de segunda ordem do espaço-tempo. Para detalhes do processo de obtenção das equações macroscópicas a partir da Eq. 145, ver o Apêndice C.2. Assim, as equações macroscópicas recuperadas dão-se nas formas:

$$\underbrace{\partial_t \rho^{(p)} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}') = - \underbrace{\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}_{\mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \approx \rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u}')} - \underbrace{\frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}}_{\text{Erro de discretização}}}_{\text{Balanço de massa do componente } p}, \quad (146)$$

$$\underbrace{\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u}') = - \underbrace{\sum_p \left(\nabla_x \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) - \sum_p \left(\frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right)}_{\text{Erros de discretização}}}_{\text{Balanço de massa da mistura}}, \quad (147)$$

$$\underbrace{\partial_t \rho^{(p)} \mathbf{u}' + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}') = -\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} - \left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \partial_t \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \left(\left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) - \tau^{(p)} \rho^{(p)} \left(\nabla_x \mathbf{u}' + \left(\nabla_x \mathbf{u}' \right)^T \right) + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \frac{1}{2} \partial_t \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} - \frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \left(\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right)}_{\text{Erros de Discretização}}}_{\text{Balanço de quantidade de movimento do componente } p}, \quad (148)$$

e

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho \mathbf{u}' + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u}' \mathbf{u}') &= -\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} - \sum_p \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \tau^{(p)} \rho^{(p)} \left(\nabla_x \mathbf{u}' + \left(\nabla_x \mathbf{u}' \right)^T \right) \right) + \\
&+ \sum_p (\rho^{(p)} \mathbf{g}^e) - \underbrace{\sum_p \left(\partial_t \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) - \sum_p \left(\nabla_x \cdot \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) \right)}_{\text{Erros de discretização}} + \\
&\underbrace{-\frac{1}{2} \partial_t \sum_p (\rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) - \frac{1}{2} \sum_p \left(\nabla_x \cdot \rho^{(p)} \left(\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right) \right)}_{\text{Erros de discretização}}.
\end{aligned}$$

Balanço de quantidade de movimento da mistura

(149)

sendo $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ o momento de primeira ordem de $f_{i(1)}^{(p)}$ dado por

$$\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i = \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} = \tau^{(p)} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) + \rho^{(p)} (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e) \right). \quad (150)$$

Na comparação das equações macroscópicas recuperadas pela análise de Chapman-Enskog proposta (Eqs. 146, 147, 148 e 149) com as equações recuperadas pela abordagem de análise de Shan e Doolen (1995) (Eqs. 137, 138, 139 e 140), tem-se como principais diferenças a dependência da velocidade resultante \mathbf{u}' e uma maior explicitação dos erros de discretização resultantes da utilização de uma discretização de primeira ordem do espaço-tempo em problemas com termo de força. Adicionalmente, a dependência de \mathbf{u}' de τ^p adiciona erros na recuperação da velocidade resultante em casos onde $\tau^p \neq \tau^{\bar{p}}$, no caso de $\tau^p = \tau^{\bar{p}}$ tem-se $\mathbf{u}' = \mathbf{u}$.

Na Eq. (146), o balanço de massa representa o termo difusivo entre componentes no lado direito da equação, assim como a Eq. (137). Contudo, nota-se também no lado direito da Eq. (146) um termo extra de aceleração, sendo tal termo um erro de discretização resultante da presença do termo de força numa discretização de primeira ordem do espaço-tempo. Na Eq. (147) de balanço de massa da mistura, assim como na Eq.(146), o erro de aceleração se faz presente. Adicionalmente, o termo difusivo presente na Eq. (146) quando somado sobre todos os componentes não se anula devido aos possíveis valores diferente de $\tau^{(p)}$ e $\tau^{(\bar{p})}$, *i.e.*, se $\tau^{(p)} = \tau^{(\bar{p})}$ o termo se anula e se $\tau^{(p)} \neq \tau^{(\bar{p})}$ o termo pode ser diferente zero, sendo possivelmente um erro diretamente proporcional ao aumento da razão de viscosidade dos fluidos.

Nas Eqs. (148) e (149) de balanço da quantidade de movimento do componente e da mistura, assim como as Eqs. (139) e (137), observam-se erros de discretização resultantes da presença do termo de força na discretização de primeira ordem do espaço-tempo. Os erros de discretização que envolvem o termo difusivo $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ na Eq. (149), seguem as mesmas questões de variações da razão de viscosidade que envolvem a diferença entre os valores de $\tau^{(p)}$ e $\tau^{(\bar{p})}$ analisados para o balanço de massa.

4.2.2 Comparação: pseudo-potencial e modelo cinético

Numa comparação do modelo pseudo-potencial com o modelo cinético de Philippi *et al.* (2012), o modelo pseudo-potencial pode ser visto como uma simplificação do modelo descrito pela Eq. (112), dadas as considerações:

- correção de volume de Enskog não é levada em consideração, *i.e.*, $b = 0$;
- as forças de longo alcance $\mathbf{g}^{(ps)}$ são representadas pela Eq. (132) desconsiderando as interações quando $p = s$;
- os parâmetros $a^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})}$ são funções de $G^{(p\bar{p})}$, gerando uma relação proporcional entre $a^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})}$;
- o termo de força é deslocado para o termo de colisão, resultando no esquema proposto por Shan e Chen (1993);
- o termo de colisão é modificado para uma função do tempo de relaxação de cada componente ($\tau^{(p)}$), sendo o tempo de relaxação independente do estado termodinâmico do fluido, *i.e.*, $\tau^{(p)}$ é independente de ρ e θ .
- erros de discretização comumente resultantes da forma discreta do espaço-tempo e do espaço de velocidades, devem ser desconsiderados.

4.3 Modelo Aprimorado

Com base nos erros de discretização observados na análise de Chapman-Enskog proposta (Seção 4.2.1.2) e nas comparações do modelo pseudo-potencial com o modelo cinético de Philippi *et al.* (2012) (Seção 4.2.2), um modelo aprimorado é desenvolvido com o propósito eliminar estes erros e estender o modelo originalmente proposto por Shan e Chen (1993) para uma modelagem mais termodinamicamente consistente com um sistema de fluidos multicomponentes imiscíveis. Tendo como objetivos específicos do modelo atingir altos gradientes de viscosidade da mistura e reduzir correntes espúrias. Os aprimoramentos desenvolvidos ao longo da presente seção estão apoiados num esquema de colisão baseado em momentos, na discretizações de alta ordem de termos derivativos e correções conceituais de fundamentos termodinâmicos. Entre as correções conceituais pode-se destacar a modificação do modelo de força proposto por Shan e Chen (1993) para melhor representar a teoria do campo-médio e uma função suave do tempo de relaxação como uma função da fração mássica dos componentes. Enfim, através de uma análise de Chapman-Enskog as equações macroscópicas do modelo são comparadas e discutidas.

4.3.1 Tempo de Relaxação

O tempo de relaxação τ presente no modelo de colisão BGK é um parâmetro que está relacionado ao livre caminho médio (ℓ_c) e a velocidade média (ξ_{med}) das moléculas do fluido, sendo que em sistemas de r multicomponentes estas propriedades variam em regiões com presenças das moléculas de mais de um componente, *i.e.*, $\tau^{(p,s,\dots,r)}(\mathbf{x},t)$ é uma função de todos os componentes (PHILIPPI *et al.*, 2012). Na escala mesoscópica de representação do modelo BGK o tempo de relaxação pode ser representado em termos das propriedades termodinâmicas locais, como densidade e temperatura da mistura e dos componentes, *i.e.*, $\tau^{(p,s,\dots,r)}(\mathbf{x},t,\rho,\chi^{(p)},\chi^{(s)},\dots,\chi^{(r)},\theta,\theta^{(p)},\theta^{(s)},\dots,\theta^{(r)})$, sendo $\chi^{(p)}$ a fração mássica do componente.

Considerando um sistema isotérmico e a relação do tempo de relaxação com a viscosidade da mistura (relação obtida pela análise de Chapman-Enskog), o presente estudo propõe a restrição do tempo de relaxação local a uma função suave dependente apenas das densidades do sistema, sendo descrito por

$$\hat{\tau}(\mathbf{x},t,\rho,\chi^{(p)},\chi^{(s)},\dots,\chi^{(r)}) = \sum_p \left(\hat{\tau}^{(p)} \times (\chi^{(p)})^{\left(\frac{\sum_{\bar{p}} \rho^{(\bar{p})}}{\rho^{(p)}}\right)} \right). \quad (151)$$

Esta função suave tem como objetivo criar um alto gradiente de densidade na interface dos fluidos, de modo que o valor de $\hat{\tau}$ tende a se aproximar do valor de $\hat{\tau}^{(p)}$ do componente de maior fração mássica local. Os valores de $\hat{\tau}^{(p)}$ de cada componente são pré definidos de acordo com a viscosidade cinemática assumida de cada componente por

$$\hat{\tau}^{(p)} = \frac{\nu^{(p)}}{c_s^2} + \frac{1}{2}. \quad (152)$$

Deste modo, a viscosidade local da mistura pode ser determinada por

$$\nu(\mathbf{x},t) = c_s^2 \left(\hat{\tau}(\mathbf{x},t) + \frac{1}{2} \right), \quad (153)$$

de acordo com a análise de Chapman-Enskog conduzida na Seção 4.3.6.

Substituindo τ^p por τ na Eq. (126), tem-se

$$f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) + \frac{(f_{eq,i}^{(p)}(\rho_\sigma, \mathbf{u}) - f_i^{(p)})}{\tau} + F_{SC,i}^{(p)}, \quad (154)$$

destacando que com esta alteração tem-se $\mathbf{u}' = \mathbf{u}$.

4.3.2 Termo de Força Explícito

O esquema de força inicialmente proposto no modelo pseudo-potencial é representado pela velocidade $\mathbf{u}_*^{(p)}$ que incorpora as forças por unidade de massa $\mathbf{g}^{(p)}$ na função distribuição de equilíbrio. A utilização deste esquema implica na aparição de termos extras no termo de força do modelo, o qual é descrito pela Eq.(127). Em acordo com Huang, Krafczyk e Lu (2011), Otomo *et al.* (2018) e Peng, Wang e Mao (2018), estes termos extras no termo de força tem mostrado inconsistências termodinâmicas no modelo, tal como a dependência τ na tensão superficial entre os fluidos. Deste modo, aplica-se uma explicitação do termo de força e a correção dos termos extras, ambos com o objetivo de eliminar inconsistência termodinâmicas e permitir uma direta extensão do modelo para discretizações de maior ordem do espaço-tempo.

Com a forma explicita da equação LB do modelo pseudo-potencial descrita pela Eq. (126), o termo de força explicitado é representado pela Eq.(127), onde $\tau^{(p)}\mathbf{g}^{(p)}\mathbf{g}^{(p)}$ é considerado um termo extra resultante do esquema proposto por Shan e Chen (1993). No presente trabalho é utilizado o termo força proposto por Guo, Zheng e Shi (2002), o qual é representado por

$$F_i^{(p)} = W_i \rho^{(p)} \left(\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{g}^{(p)}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 I) : (\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u} + (\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u})^T)}{2c_s^4} \right), \quad (155)$$

sendo que este termo de força pode ser deduzido através de uma expansão do termo $\mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{e}_i} f_i^{(p)}$ em polinômios de Hermite para o estado de equilíbrio até a ordem $N = 2$ de discretização do espaço de velocidades (KRÜGER *et al.*, 2017), *i.e.*,

$$\mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{e}_i} f_i^{(p)} \approx \mathbf{g} \cdot \nabla_{\mathbf{e}_i} f_{eq,i}^{(p)} \approx W_i \sum_{n=1}^{N=2} \frac{1}{n!} \mathbf{g}^{(p)} \mathcal{A}_{eq}^{(n-1)}(\mathbf{x}, t) \mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_i). \quad (156)$$

4.3.3 Discretização de Segunda Ordem do Espaço-Tempo

Seguindo o processo de discretização do espaço-tempo apresentado na Sec. 3.3, a Eq. (154) é estendida para segunda-ordem, sendo representada na forma

$$\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = \hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - \frac{\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) - f_{i,eq}^{(p)}(\mathbf{x}, t)}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}}\right) \delta_t F_i^{(p)}(\mathbf{x}, t), \quad (157)$$

em acordo com a Eq. (104). Na discretização de segunda ordem a função distribuição $\hat{f}_i^{(p)}$ é determinada por um esquema implícito, onde

$$\hat{f}_i^{(p)} = f_i^{(p)} + \frac{f_i^{(p)} - f_{i,eq}^{(p)}}{2\tau} - \frac{F_i^{(p)}}{2} = \left(1 + \frac{1}{2\tau}\right) f_i^{(p)} - \frac{f_{i,eq}^{(p)}}{2\tau} - \frac{F_i^{(p)}}{2} \quad (158)$$

como a Eq. (157) está em função de $\hat{\tau} = \tau + 1/2$, reformula-se equação acima para

$$\hat{f}_i^{(p)} = \left(\frac{2\hat{\tau}}{2\hat{\tau} - 1} \right) f_i^{(p)} - \frac{f_{i,eq}^{(p)}}{2\hat{\tau} - 1} - \frac{F_i^{(p)}}{2}, \quad (159)$$

consequentemente, o esquema numérico implícito implica na redefinição de cálculo dos momentos do fluido com base em $\hat{f}_i^{(p)}$. Deste modo, têm-se os momentos

$$\rho^{(p)} = \sum_i f_i^{(p)} = \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \sum_i \hat{f}_i^{(p)} + \underbrace{\frac{\sum_i f_{i,eq}^{(p)}}{2\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \frac{\sum_i F_i^{(p)}}{2}}_{=0}, \quad (160)$$

$$\begin{aligned} \rho^{(p)} \mathbf{u}^{(p)} = \sum_i \mathbf{e}_i f_i^{(p)} &= \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \sum_i \hat{f}_i^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{\sum_i f_{i,eq}^{(p)} \mathbf{e}_i}{2\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \frac{\sum_i F_i^{(p)} \mathbf{e}_i}{2} \\ &= \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \sum_i \hat{f}_i^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{\rho^{(p)} \mathbf{u}}{2\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \frac{\mathbf{g}^{(p)} \rho^{(p)}}{2}, \end{aligned} \quad (161)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_p \sum_i \mathbf{e}_i f_i^{(p)} = \sum_p \sum_i \mathbf{e}_i \hat{f}_i^{(p)} + \sum_p \frac{\mathbf{g}^{(p)} \rho^{(p)}}{2}, \quad (162)$$

e

$$\mathbf{P}^{(p)} = \sum_i f_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \sum_i \hat{f}_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i + \frac{\sum_i f_{i,eq}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i}{2\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \frac{\sum_i F_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i}{2}. \quad (163)$$

4.3.4 Termo de Colisão Baseado em Momentos

Historicamente, o termo de colisão baseado em momentos com único tempo de relaxação foi introduzido no LBM por Ladd (1994) e mais tarde renomeado como método regularizado no trabalho de Latt e Chopard (2006), o qual demonstrou o seu aprimoramento na estabilidade das simulações. A ideia deste termo de colisão é a representação da função de não-equilíbrio ($f_{neq,i}^{(p)}$) em momentos que podem ser controlados, demais momentos de alta ordem que não podem ser corretamente controlados e não contribuem para recuperação das equações macroscópicas desejada são eliminados da descrição.

A representação do termo de colisão regularizado é diretamente dependente da ordem de discretização do espaço-tempo, *i.e.*, caso esquemas implícitos de representação da função distribuição sejam utilizados, como mostra Silva e Semiao (2012). Deste modo, com uma discretização de segunda ordem do espaço-tempo, a Eq. (157) fica representada na forma re-

gularizada por

$$\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_{eq,i}^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{\hat{\tau}}\right) \hat{f}_{neq,i}^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}}\right) F_i^{(p)} \delta, \quad (164)$$

sendo $\hat{f}_{neq,i}^{(p)}$ a função distribuição de não-equilíbrio obtida por Silva e Semiao (2012) na forma

$$\hat{f}_{neq,i}^{(p)} = w_i \left(\frac{(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 I)}{2c_s^4} : \hat{\Pi}_{neq}^{(p)} \right) - \frac{\delta_t}{2} F_i^{(p)}, \quad (165)$$

onde

$$\hat{\Pi}_{neq}^{(p)} = \sum_i \left(\hat{f}_i^{(p)} - f_{i,eq}^{(p)} + \frac{\delta_t}{2} F_i^{(p)} \right) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i. \quad (166)$$

Para mais detalhes ver Latt e Chopard (2006) e Silva e Semiao (2012).

Porém, a equação regularizada obtida por Latt e Chopard (2006) e Silva e Semiao (2012) não leva em conta a equação de balanço da energia no processo de dedução. Levando em conta a o balanço de energia na representação do tensor de segunda ordem de não-equilíbrio, obtém-se o tensor tensão com o termo de taxa de deformação volumétrica (Eq. 123). Esta representação do tensor de segunda ordem corrigido pelo balanço de energia foi apresentada em Ladd (1994), onde

$$\overline{\Pi}_{neq}^{(p)} = \sum_i \left(\hat{f}_i^{(p)} - f_{i,eq}^{(p)} + \frac{\delta_t}{2} F_i^{(p)} \right) \left(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i) I}{D} \right), \quad (167)$$

e consequentemente, a função distribuição de não-equilíbrio é dada por

$$\overline{f}_{neq,i}^{(p)} = w_i \left(\frac{(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 I)}{2c_s^4} : \overline{\Pi}_{neq}^{(p)} \right) - \frac{\delta_t}{2} F_i^{(p)}. \quad (168)$$

Contudo, o estudo feita por Ladd (1994) não contempla uma análise dos efeitos representação deste modelo para problemas incompressíveis e em sistemas multicomponentes. Em vista disto, na sequência do presente trabalho desenvolve-se uma análise da influência do tensor tensão corrigido em sistemas monocomponente, incompressíveis e isotérmicos (Seção 5). Adicionalmente, estende-se sua formulação para a representação dos momentos da função de não-equilíbrio em sistemas multicomponentes, tal extensão é aplicada com base na análise de Chapman-Enskog desenvolvida na Sec. 4.3.6.

4.3.5 Modelo de Força

Com os termos derivativos de alta ordem desconsiderados na representação das forças do modelo pseudo-potencial, a Eq. (136) consiste de uma forma simplificada da teoria do campo

médico descrita pela Eq. (50) onde as interações entre $p = s$ são desconsideradas. Para melhor representar a Eq. (50), o coeficiente $G^{(p\bar{p})}$ presente na Eq. (136) é dividido em dois termos, com o termo $a^{(p\bar{p})}$ controlando a separação/segregação dos componentes e o $\kappa^{(p\bar{p})}$ o comprimento da interface de transição entre os componentes. Complementarmente, a massa virtual é considerada igual a densidade do componente, *i.e.*, $\Psi^{(p)} = \rho^{(p)}$. Assim, a Eq. (136) pode ser reescrita na forma

$$(\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e) = \sum_{\bar{p}} (a^{(p\bar{p})} \nabla_{\mathbf{x}} \rho^{(\bar{p})} + \kappa^{(p\bar{p})} \nabla_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}}^2 \rho^{(\bar{p})}). \quad (169)$$

Na representação do modelo de força, descrito pela Eq. (169), os termos derivativos devem ser corretamente discretizados. Neste trabalho, a discretização é feita utilizando os esquemas de *lattice* propostos por Mattila, Hegele Jr. e Philippi (2014), onde

$$\nabla_{\mathbf{x}} \rho^{(\bar{p})} = \frac{1}{2c_s^2} \sum_i W_i \rho^{(\bar{p})}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \left[(D + 4) - \frac{e_i^2}{c_s^2} \right] \mathbf{e}_i, \quad (170)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}}^2 \rho^{(\bar{p})} = \frac{1}{c_s^4} \sum_i W_i \rho^{(\bar{p})}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \left[\frac{e_i^2}{c_s^2} - (D + 2) \right] \mathbf{e}_i. \quad (171)$$

Destaca-se que, quando $a^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})}$ são escritos em termos de $G^{(p\bar{p})}$, a soma das Eqs. (170) e (171) recupera a Eq. (132). Na discretização dos termos derivativos, dois diferentes lattices são utilizados para comparação no presente trabalho, sendo o D2Q9 e o D2V141. Os valores de e_i e W_i do *lattice* D2V141 são apresentados na Tabela 1, para $c_s = 1.194856755$.

4.3.6 Análise de Chapman-Enskog

Definido os aspectos da equação LB do presente modelo, a análise de Chapman-Enskog é desenvolvida com o objetivo de determinar a função distribuição de não-equilíbrio e recuperar as equação macroscópicas que descrevem o modelo.

Tabela 1 – Valores de e_i e W_i do *lattice* D2V141. O valores p representam o número de vetores velocidade obtidos por suas permutações.

e_i	p	W_i
(0,0)	1	$1.1508949125706189 \times 10^{-1}$
(±1,0)	4	$7.5595334899625166 \times 10^{-2}$
(±1, ±1)	4	$5.7734363121950370 \times 10^{-2}$
(±2,0)	4	$2.9033095241565582 \times 10^{-2}$
(±2, ±1)	8	$1.8074672747613353 \times 10^{-2}$
(±2, ±2)	4	$7.4435479269746455 \times 10^{-3}$
(±3,0)	4	$4.2549928887228462 \times 10^{-3}$
(±3, ±1)	8	$3.7759145451527918 \times 10^{-3}$
(±3, ±2)	8	$9.5510661516062627 \times 10^{-4}$
(±4,0)	4	$4.9926973701248283 \times 10^{-4}$
(±4, ±1)	8	$2.1766901272228135 \times 10^{-4}$
(±3, ±3)	4	$2.7427360033189315 \times 10^{-4}$
(±4, ±2)	8	$1.3852638332696371 \times 10^{-4}$
(±5,0)	4	$1.2905073342509215 \times 10^{-5}$
(±4, ±3)	8	$5.9323648903820310 \times 10^{-6}$
(±5, ±1)	8	$1.6161185887309810 \times 10^{-5}$
(±5, ±2)	8	$2.4159493337948245 \times 10^{-6}$
(±4, ±4)	4	$3.3101853527875648 \times 10^{-6}$
(±5, ±3)	8	$1.3086410701892049 \times 10^{-6}$
(±6,0)	4	$1.1118416570950374 \times 10^{-7}$
(±6, ±1)	8	$4.6121305137932601 \times 10^{-7}$
(±6, ±3)	8	$3.6530518727364592 \times 10^{-8}$
(±7,0)	4	$8.3273853753395782 \times 10^{-9}$
(±7, ±2)	8	$2.3109247814347261 \times 10^{-9}$

Seguindo a análise de Chapman-Enskog previamente desenvolvida na Sec. 3.3.2 para uma discretização de segunda ordem do espaço-tempo, tem-se

$$\begin{aligned}
 (Kn^{(-1)}) : \quad \hat{f}_{i(0)}^{(p)} &= f_{eq,i}^{(p)} = W_i \rho^{(p)} \left(1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I}) : (\mathbf{u} \mathbf{u} + \rho \Theta c_s^2 \mathbf{I})}{2c_s^4} \right), \\
 (Kn^{(0)}) : \quad \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \hat{f}_{i(0)}^{(p)} &= -\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)}}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)}, \\
 (Kn^{(1)}) : \quad \partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \hat{f}_{i(1)}^{(p)} &+ \frac{\left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right)^2 \hat{f}_{i(0)}^{(p)}}{2} = -\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)}}{\hat{\tau}}, \quad (172)
 \end{aligned}$$

ou

$$(Kn^{(1)}) : \quad \partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\hat{f}_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i^{(p)}}{2} \right) = -\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)}}{\hat{\tau}}.$$

Somando a equação de ordem $Kn^{(0)}$ sobre todas as direções do *lattice* para os momentos 1, e_i e e_i^2 , com o objetivo de recuperar as equações de balanço de massa, quantidade

de movimento e energia, ambas para o componente p , obtêm-se:

$$\sum_i \left(\partial_t^{(0)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) = \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)}}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)} \right), \quad (173)$$

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \rho^{(p)} \mathbf{u} = 0}_{\text{Balanço de massa do componente } p \text{ de ordem } Kn^{(0)}}$$

$$\sum_i \left(\partial_t^{(0)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) = \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)} \mathbf{e}_i \right), \quad (174)$$

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho^{(p)} \theta) = -\frac{\mathbf{m}^{(p)}}{\hat{\tau}} + \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}}_{\text{Balanço de quantidade de movimento do componente } p \text{ de ordem } Kn^{(0)}}$$

$$\sum_i \left(\partial_t^{(0)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} e_i^2 + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i e_i^2 \right) = \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)} e_i^2}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)} e_i^2 \right)$$

$$\partial_t^{(0)} (D c_s^2 \rho^{(p)} \theta) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u}^2) - 2\mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} (\rho^{(p)} c_s^2 \theta) + (D + 2) \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} c_s^2) = , \quad (175)$$

$$\underbrace{2\mathbf{u} \cdot \frac{\mathbf{m}^{(p)}}{\hat{\tau}} - \tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}^{(p)} - \frac{\hat{\mathbf{P}}^{(p)} : \mathbf{I}}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^{(p)} : \mathbf{I}}_{\text{Balanço de energia do componente } p \text{ de ordem } Kn^{(0)}}$$

onde

$$\sum_i \hat{f}_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i = \mathbf{m}^{(p)} - \frac{1}{2} \sum_i F_i^{(p)} \mathbf{e}_i, \quad \sum_i \hat{f}_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = \hat{\mathbf{P}}^{(p)} = \hat{\Pi}^{(p)} - \frac{1}{2} \sum_i F_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i, \quad (176)$$

devido ao esquema explícito aplicado no processo de discretização de segunda ordem do espaço-tempo. Replicando o processo de recuperação das equações de ordem $Kn^{(0)}$ para a mistura, têm-se

$$\sum_p \sum_i \left(\partial_t^{(0)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) = \sum_p \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)}}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)} \right), \quad (177)$$

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \rho + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \rho \mathbf{u} = 0}_{\text{Balanço de massa da mistura de ordem } Kn^{(0)}}$$

$$\sum_p \sum_i \left(\partial_t^{(0)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \nabla_x \cdot \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) = \sum_p \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)} \mathbf{e}_i \right), \quad (178)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho \theta) = \sum_p (\rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)})$$

Balanco de quantidade de movimento do componente p de ordem $Kn^{(0)}$

e

$$\sum_p \sum_i \left(\partial_t^{(0)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} e_i^2 + \nabla_x \cdot \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i e_i^2 \right) = \sum_p \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(1)}^{(p)} e_i^2}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)} e_i^2 \right)$$

$$\partial_t^{(0)} (D c_s^2 \rho \theta) - \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u} u^2) - 2\mathbf{u} \cdot \nabla_x (\rho c_s^2 \theta) + (D + 2) \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u} c_s^2) =$$

$$- \sum_p (\tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}^{(p)}) - \sum_p \frac{\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} : \mathbf{I}}{\hat{\tau}} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \sum_p (\tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^{(p)} : \mathbf{I})$$

Balanco de energia do componente p de ordem $Kn^{(0)}$

Como o momento $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ é inicialmente indeterminado, a Eq. (174) fica dependente de sua determinação para o seu fechamento. Utilizando as Eqs. (173) e (177) para reescrever as Eqs. (174) e (178), obtêm-se

$$\partial_t^{(0)} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x \mathbf{u} = -\frac{\nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2 \theta)}{\rho^{(p)}} - \frac{\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\rho^{(p)} \hat{\tau}} + \mathbf{g}^{(p)}, \quad (180)$$

Balanco de quantidade de movimento de (p) para (Kn^0)

e

$$\partial_t^{(0)} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x \mathbf{u} = -\frac{\nabla_x \cdot \mathcal{P}}{\rho} + \mathbf{g}^e. \quad (181)$$

Balanco de quantidade de movimento da mistura para (Kn^0)

onde $\nabla_x \cdot \mathcal{P}$ é dado por

$$\nabla_x \cdot \mathcal{P} = \nabla_x (c_s^2 \rho \theta) - \sum_p \sum_{\bar{p}} (a^{(p\bar{p})} \nabla_x \rho^{(\bar{p})} + \kappa^{(p\bar{p})} \nabla_x \nabla_x^2 \rho^{(\bar{p})}). \quad (182)$$

Na manipulação das Eqs. (180) e (181) pode-se isolar o termo $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ na forma

$$\mathbf{m}_{(1)}^{(p)} = \hat{\tau} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P} - \underbrace{\nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)} \theta)}_{\nabla_x \cdot \mathcal{P}^{(p)}} + \rho^{(p)} (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e) \right) = \hat{\tau} \left(\chi^{(p)} \nabla_x \cdot \mathcal{P} - \nabla_x \cdot \mathcal{P}^{(p)} \right). \quad (183)$$

Por fim, substituindo $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ na Eq. (174), tem-se a equação de balanço fechada para a quantidade de movimento do componente p :

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u})}_{\text{Balanço de quantidade de movimento de } (p) \text{ para } (Kn^0)} = -\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P} + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e. \quad (184)$$

Assim como o momento $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$, o termo $\hat{\Pi}_{(1)}^{(p)}$ é um momento de segunda ordem desconhecido da função distribuição de não-equilíbrio. De modo a determinar $\hat{f}_{i(1)}^{(p)}$, e conseqüentemente seus momentos, tem-se através da equação de ordem $Kn^{(0)}$ a relação

$$\hat{f}_{i(1)}^{(p)} = -\hat{\tau} \left(\partial_t^{(0)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \right) + \left(\hat{\tau} - \frac{1}{2} \right) F_i^{(p)}. \quad (185)$$

Expandindo $f_{i(0)}^{(p)}$ e utilizando apenas as Eqs. (174), (180) e considerando $\theta = 1$, obtém-se por manipulações algébricas

$$\begin{aligned} \hat{f}_{i(1)}^{(p)} = & -\frac{\hat{\tau}^{(p)} W_i}{c_s^2} \left(\rho^{(p)} \nabla_x \mathbf{u} : \mathcal{Q} - \underbrace{\mathbf{e}_i \cdot (\nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u}))}_{\text{Termos da ordem de } Ma^2} + \frac{\mathbf{e}_i \cdot (\nabla_x \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} : \mathcal{Q})}{2c_s^2} \right) + \\ & \underbrace{-\frac{(\nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u}) : \mathcal{Q}}{2c_s^2}}_{\text{Termos da ordem de } Ma^3} - \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\hat{\tau}^{(p)}} - \frac{\left(\left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) : \mathcal{Q}}{\hat{\tau}^{(p)} 2c_s^2} \right) - \frac{1}{2} F_i^{(p)}. \end{aligned} \quad (186)$$

onde $\mathcal{Q} = \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I}$. Considerando os termos derivativos da ordem de Ma^2 e Ma^3 desprezíveis na Eq. (186), tem-se

$$\hat{f}_{i(1)}^{(p)} = -\frac{\hat{\tau} W_i}{c_s^2} \left(\rho^{(p)} \nabla_x \mathbf{u} : \mathcal{Q} - \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\hat{\tau}} - \frac{\left(\left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) : \mathcal{Q}}{\hat{\tau} 2c_s^2} \right) - \frac{1}{2} F_i^{(p)}, \quad (187)$$

sendo a Eq.(187) a função distribuição de não-equilíbrio obtida no processo descrito por Latt e Chopard (2006). Contudo, tal procedimento de obtenção desconsidera a presença dos termos de balanço de energia na função distribuição de não-equilíbrio do D2Q9, como já comentado na

Seção 4.3.4. Deste modo, utilizando as Eqs. (174), (180), (175) e considerando $\theta = 1$, obtém-se

$$\begin{aligned} \hat{f}_{i(1)}^{(p)} = & -\frac{\hat{\tau}W_i}{c_s^2} \left(\rho^{(p)} \underbrace{\left(\nabla_x \mathbf{u} - \frac{\nabla_x \cdot \mathbf{u}}{D} \mathbf{I} \right)}_{\text{Hipótese de Stokes}} : \mathcal{Q} - \frac{\left(\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} : \mathbf{I} \right) \mathbf{I} : \mathcal{Q}}{2D\hat{\tau}c_s^2} - \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\hat{\tau}} + \right. \\ & \left. - \frac{\left(\left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T - \frac{2\mathbf{u} \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{D} \mathbf{I} \right) : \mathcal{Q}}{\hat{\tau}2c_s^2} \right) - \frac{1}{2} \left(F_i^{(p)} - W_i \left(\frac{2\rho^{(p)} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}^{(p)}}{2Dc_s^4} \right) \mathbf{I} : \mathcal{Q} \right), \end{aligned} \quad (188)$$

sendo recuperado, como destacado na Eq.(188), a hipótese de Stokes na representação do tensor tensão hidrodinâmico.

Na função distribuição de não-equilíbrio determinada na Eq. (188), nota-se a dependência de termos derivativos da velocidade e do próprio momento de segunda ordem $\mathbf{P}_{(1)}^{(p)}$. Com o objetivos de evitar o cálculo direto de tais termos derivativos, a função pode ser determinada em função de seus momentos de segunda ordem. Calculando o momento de segunda ordem de $\hat{f}_{i(1)}^{(p)}$, tem-se

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} = & -\hat{\tau} \left(\left(-\frac{1}{D} \frac{\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} : \mathbf{I}}{\hat{\tau}} \right) \mathbf{I} + c_s^2 \rho^{(p)} \left(\tilde{2} \nabla_x \mathbf{u} - \frac{2}{D} (\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) + \right. \\ & \left. - \frac{\left(\left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T - \frac{2\mathbf{u} \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{D} \mathbf{I} \right)}{\hat{\tau}} \right) - \frac{1}{2} \left(\sum_i F_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - \frac{2\rho^{(p)} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}^{(p)}}{D} \mathbf{I} \right) \end{aligned}, \quad (189)$$

passando o primeiro e o último termo do lado direito da equação para o lado esquerdo, tem-se

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{\Pi}}_{(1)}^{(p)} = & \hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} + \frac{1}{2} \sum_i F_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - \frac{1}{D} \left(\left(\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} - \frac{1}{2} \sum_i F_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) : \mathbf{I} \right) \mathbf{I} = \\ & \sum_i \left(\left(\hat{f}_{i(1)}^{(p)} + \frac{1}{2} F_i^{(p)} \right) \left(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i) \mathbf{I}}{D} \right) \right) = \\ & -\tau c_s^2 \rho^{(p)} \left(\tilde{2} \nabla_x \mathbf{u} - \frac{2}{D} (\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) + \left(\left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T - \frac{2\mathbf{u} \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{D} \mathbf{I} \right), \end{aligned} \quad (190)$$

substituindo o tensor $\overline{\Pi}_{(1)}^{(p)}$ na Eq.(188), tem-se a função distribuição de não-equilíbrio reescrita na forma

$$\hat{f}_{i(1)}^{(p)} = \frac{W_i}{2c_s^4} \left(\overline{\Pi}_{(1)}^{(p)} + 2c_s^2 \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) - \frac{1}{2} F_i^{(p)} + \underbrace{\frac{W_i}{c_s^2} \left(\frac{\left(\hat{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} : \mathbf{I} \right) \mathbf{I} : \mathcal{Q}}{2Dc_s^2} + \left(\frac{\rho^{(p)} \mathbf{u} \cdot \mathbf{g}^{(p)}}{2Dc_s^2} \right) \mathbf{I} : \mathcal{Q} \right)}_{\text{Termos Espúrios}}, \quad (191)$$

no objetivo de recuperar apenas os momentos desejados, elimina-se os momentos espúrios (termos destacados na Eq. (191)). Por fim, tem-se a função distribuição de não-equilíbrio corrigida $\overline{f}_{i(1)}^{(p)}$ dada por

$$\overline{f}_{i(1)}^{(p)} = \frac{W_i}{2c_s^4} \left(\overline{\Pi}_{(1)}^{(p)} + 2c_s^2 \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) - \frac{1}{2} F_i^{(p)}. \quad (192)$$

Com a função distribuição de não-equilíbrio e os demais momentos determinados, agora estende-se a recuperação das equações macroscópicas para a ordem de $Kn^{(1)}$. Somando os termos de ordem $Kn^{(1)}$ da Eq. (172) sobre todas as direções do *lattice* para os momentos 1 e \mathbf{e}_i , com o objetivo de recuperar as equações de balanço de massa e quantidade de movimento do componente p , obtêm-se:

$$\sum_i \left(\partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\hat{f}_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i^{(p)}}{2} \right) \right) = \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)}}{\hat{\tau}} \right), \quad (193)$$

$$\underbrace{\partial_t^{(1)} \rho^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \nabla_x \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}_{\text{Balanço de massa do componente } p \text{ de ordem } Kn^{(1)}} = 0$$

$$\sum_i \left(\partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\hat{f}_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{F_i^{(p)} \mathbf{e}_i}{2} \right) \right) = \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)} \mathbf{e}_i}{\hat{\tau}} \right),$$

$$\underbrace{\partial_t^{(1)} \rho^{(p)} \mathbf{u} + \partial_t^{(0)} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} - \nabla_x \cdot \left(\left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \hat{\tau} c_s^2 \rho^{(p)} \left(\tilde{\nabla}_x \mathbf{u} - \frac{2}{D} (\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right) + \nabla_x \cdot \left(\left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T - \frac{2\mathbf{u} \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{D} \mathbf{I} \right) \right)}_{\text{Balanço de quantidade de movimento do componente } p \text{ de ordem } Kn^{(1)}} = 0$$

$$(194)$$

sendo considerado $\sum_i \hat{f}_{i(2)}^{(p)} = 0$ e $\sum_i \hat{f}_{i(2)}^{(p)} \mathbf{e}_i = 0$. Estendendo para a recuperação das equações macroscópicas da mistura de ordem $Kn^{(1)}$, têm-se

$$\underbrace{\sum_p \sum_i \left(\partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\hat{f}_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i^{(p)}}{2} \right) \right)}_{\partial_t^{(1)} \rho^{(p)} = 0} = \sum_p \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)}}{\hat{\tau}} \right),$$

Balço de massa da mistura de ordem Kn^1

$$\underbrace{\sum_p \sum_i \left(\partial_t^{(1)} \hat{f}_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \right) \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left(\hat{f}_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{F_i^{(p)} \mathbf{e}_i}{2} \right) \right)}_{\partial_t^{(1)} \rho^{(p)} \mathbf{u} - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \hat{\tau} c_s^2 \rho \left(\tilde{2} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} - \frac{2}{D} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right) = 0} = \sum_p \sum_i \left(-\frac{\hat{f}_{i(2)}^{(p)} \mathbf{e}_i}{\hat{\tau}} \right).$$

Balço de quantidade de movimento da mistura de ordem Kn^1

(195)

Por fim, reunindo as equações recuperadas nas diferentes ordens de Kn , obtêm-se as equações macroscópicas que representam o presente modelo nas formas

$$\underbrace{\partial_t \rho^{(p)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \rho^{(p)} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}_{\text{Balço de massa do componente } (p)} = \frac{1}{2\hat{\tau}} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}, \quad (197)$$

$$\underbrace{\partial_t \rho + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \rho \mathbf{u}}_{\text{Balço de massa da mistura}} = 0, \quad (198)$$

$$\underbrace{\partial_t \rho^{(p)} \mathbf{u} + \partial_t^{(0)} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathcal{P} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\nu \rho^{(p)} \left(\tilde{2} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} - \frac{2}{D} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) \left((\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}) + (\mathbf{u} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)})^T - \frac{2 \mathbf{u} \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{D} \mathbf{I} \right) \right) + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e}_{\text{Balço de quantidade de movimento do componente } (p)} , \quad (199)$$

e

$$\underbrace{\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \mathcal{P} - \rho \nu \left(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u})^T - \frac{2}{D} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) \right)}_{\text{Balço de quantidade de movimento da mistura}} = \rho \mathbf{g}^e, \quad (200)$$

onde $\nu = \left(\hat{\tau} - \frac{1}{2} \right) c_s^2$ e \mathcal{P} é o tensor pressão representado por

$$\mathcal{P} = \sum_p \left[\rho^{(p)} c_s^2 - (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e) \right] = P_s \mathbf{I} + \mathbf{S}, \quad (201)$$

onde P_s é a pressão escalar dado por

$$P_s = P_e - \frac{1}{2} \sum_{p, \bar{p}} \kappa^{(p\bar{p})} \left(\nabla_{\mathbf{x}}^2 (\rho^{(p)} \rho^{(\bar{p})}) - \nabla_{\mathbf{x}} \rho^{(p)} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \rho^{(\bar{p})} \right), \quad (202)$$

P_e a pressão termodinâmica

$$P_e = \rho c_s^2 - \frac{1}{2} \sum_{p, \bar{p}} a^{(p\bar{p})} \rho^{(p)} \rho^{(\bar{p})}, \quad (203)$$

e S o tensor de Kortweg na forma

$$S = \sum_{p, \bar{p}} \kappa^{(p\bar{p})} \left(\nabla_{\mathbf{x}} \rho^{(p)} \nabla_{\mathbf{x}} \rho^{(\bar{p})} \right). \quad (204)$$

4.3.7 Equação Lattice Boltzmann

Em suma das modificações e análises conduzidas na formulação do presente modelo, a abordagem LB fica representada pela equação :

$$\hat{f}_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_{eq,i}^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{\hat{\tau}} \right) \bar{f}_{neq,i}^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{2\hat{\tau}} \right) F_i^{(p)} \delta_t. \quad (205)$$

onde $f_{eq,i}^{(p)}$ e $\hat{f}_{neq,i}^{(p)}$ são representados pelas Eqs. (113) e (192), respectivamente. Nota-se que, a Eq. (192) que representa função distribuição de não-equilíbrio para sistemas multicomponentes, dada na forma

$$\bar{f}_{i(1)}^{(p)} = \frac{W_i}{2c_s^4} \left(\bar{\Pi}_{(1)}^{(p)} + 2c_s^2 \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) - \frac{1}{2} F_i^{(p)},$$

apresenta um termo extra em relação a formulação monocomponente (único fluido) descrita na Seção 4.3.4, sendo $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ um momento de não equilíbrio relacionado a difusividade entre os componentes.

Na representação do termo $\hat{\tau}$ (tempo de relaxação da mistura) presente na Eq. (205), propôs-se a utilização de uma equação suave descrita por

$$\hat{\tau} = \sum_p \hat{\tau}^{(p)} \left(\chi^{(p)} \right)^{\frac{\sum_{\bar{p}} \rho^{(\bar{p})}}{\rho^{(p)}}}, \quad (206)$$

onde o valor $\hat{\tau}$ se aproxima de $\hat{\tau}^{(p)}$ (viscosidade do componente pré-definido) no ponto que $\chi^{(p)}$ é maior que $\chi^{(\bar{p})}$, diminuindo a dependência da viscosidade da mistura em relação à distribuição de densidade do sistema.

As forças por unidade de massa (Eq. 132) que descrevem o modelo pseudo-potential são substituídas por

$$\mathbf{g}^{(p)} = \mathbf{g}^e + \sum_{\bar{p}} \left(a^{(p\bar{p})} \nabla_{\mathbf{x}} \rho^{(\bar{p})} + \kappa^{(p\bar{p})} \nabla_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}}^2 \rho^{(\bar{p})} \right) \quad (207)$$

onde o parâmetro $G^{(p\bar{p})}$ é dividido nos parâmetros $a^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})}$ relacionados ao controle de imiscibilidade dos fluidos e ao espaçamento da interface, respectivamente, sendo ambos considerados iguais para todos os fluidos envolvidos, i.e, $a^{(p\bar{p})} = a^{(\bar{p}p)}$ e $\kappa^{(p\bar{p})} = \kappa^{(\bar{p}p)}$.

Os principais momentos macroscópicos recuperados pelas funções distribuição são dados por:

$$\sum_p \sum_i \hat{f}_i^{(p)} = \sum_p \sum_i f_{eq,i}^{(p)} = \sum_p \rho^{(p)} = \rho, \quad (208)$$

$$\sum_p \sum_i \bar{f}_{neq,i}^{(p)} = \sum_p \sum_i \left(\hat{f}_i^{(p)} - f_{eq,i}^{(p)} \right) = \sum_p (0) = 0, \quad (209)$$

$$\sum_p \sum_i \left(\hat{f}_i^{(p)} + \frac{1}{2} F_i^{(p)} \right) \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{u}, \quad (210)$$

$$\sum_p \sum_i f_{eq,i}^{(p)} \mathbf{e}_i = \sum_p (\rho^{(p)} \mathbf{u}) = \rho \mathbf{u}, \quad (211)$$

$$\sum_p \sum_i \bar{f}_{neq,i}^{(p)} \mathbf{e}_i = \sum_p \sum_i \left(\hat{f}_i^{(p)} - f_{eq,i}^{(p)} \right) \mathbf{e}_i = \sum_p \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} = 0, \quad (212)$$

$$\begin{aligned} \sum_p \sum_i \bar{f}_{neq,i}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i &= \sum_p \sum_i \left(\hat{f}_i^{(p)} - f_{eq,i}^{(p)} \right) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = \sum_p \bar{\mathbf{P}}_{(1)}^{(p)} \\ &= \sum_p \left(\bar{\mathbf{\Pi}}_{(1)}^{(p)} - \sum_i \frac{1}{2} F_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) \end{aligned} \quad (213)$$

Enfim, a estrutura a implementação numérica do modelo segue o fluxograma descrito na Figura 11.

4.4 Discussões e Comparações

Na comparação do presente modelo com o modelo pseudo-potential proposto por Shan e Chen (1993), destacam-se:

- a extensão para discretização do espaço-tempo de segunda-ordem em conjunto com a explicitação do termo de força;
- a representação do modelo de força com maiores ordens de discretização e a divisão do termo $G^{(p\bar{p})}$ nos termos $a^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})}$;

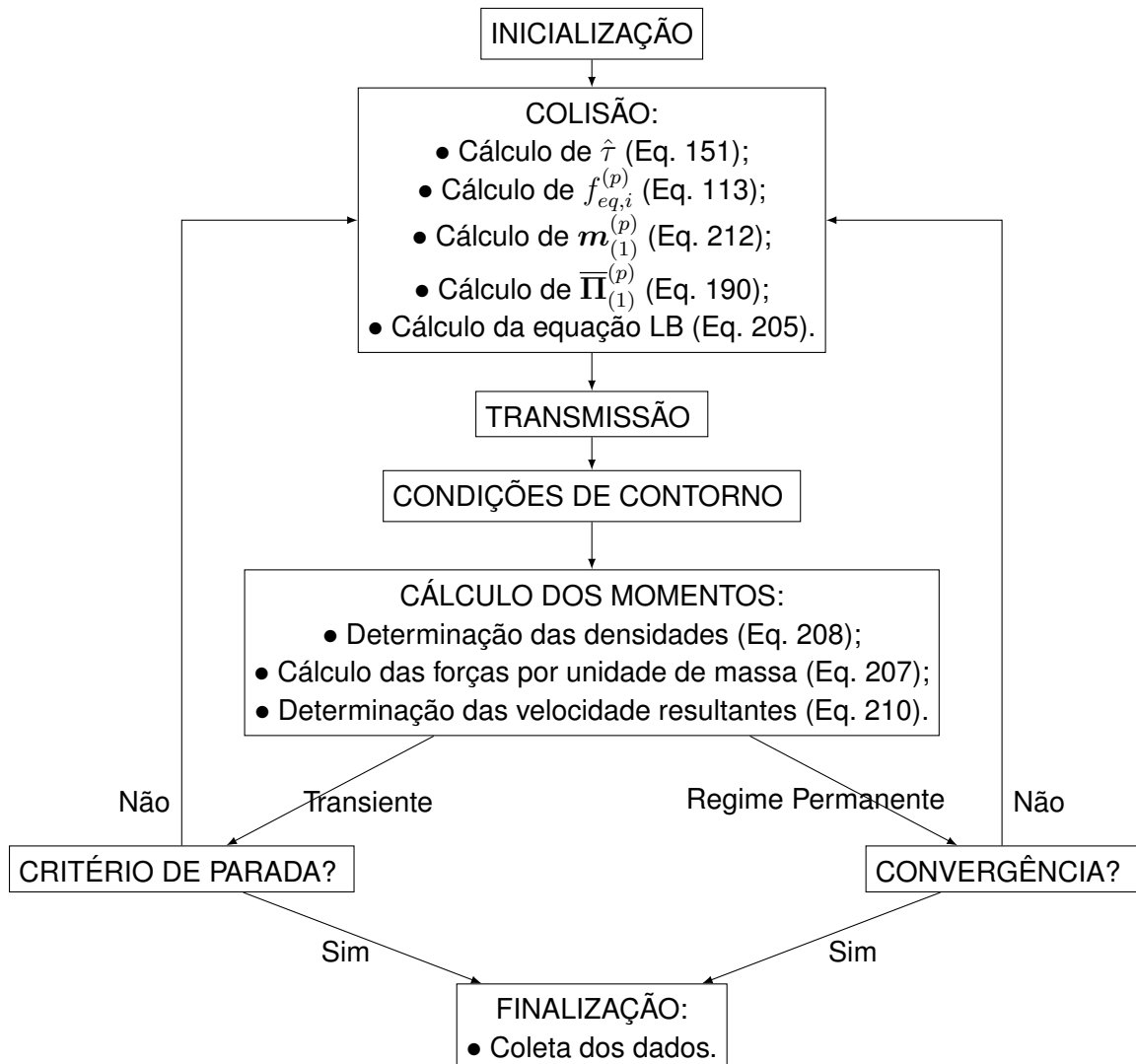


Figura 11 – Fluxograma da estrutura numérica da abordagem *lattice* Boltzmann multicomponente.

- a incorporação do esquema adaptado de colisão baseado em momentos, em conjunto com a representação do tempo de relaxação. Ambos com o objetivo de reduzir erros observados na análise do modelo pseudo-potencial.
- a eliminação de termos espúrios na equação da quantidade de movimento recuperada pelos modelos, como é evidenciado na comparação das equações obtidas na Seção 4.2.1 e 4.3.6.

As vantagens de tais modificações/adaptações são exploradas nos resultados de verificação (Seção 6) para os problemas de bolha estática, escoamento de Poiseuille para dois-componentes e deslocamento fluido-fluido.

Na comparação do presente modelo com o modelo cinético termodinamicamente consistente proposto por Philippi *et al.* (2012), destaca-se no presente modelo:

- a não representação da correção de volume do Enskog, *i.e.*, $b = 0$;

- as forças de longo alcance $g^{(ps)}$ são desconsideradas para as interações $p = s$, não representando corretamente a teoria do campo médio e, conseqüentemente, não satisfazendo a consistência termodinâmica estabelecida por tal;
- as forças que caracterizam o processo de segregação dos fluidos são descritas por forças repulsivas controladas pelos parâmetros $a^{(p\bar{p})}$ e $\kappa^{(p\bar{p})}$.

Como uma continuidade da presente pesquisa, propõe-se eliminar inconsistências termodinâmicas através da utilização de equações de estado para representação de cada componente, como aplicado por Bao e Schaefer (2013). Tal aplicação, além de possibilitar a representação das interações de longo alcance entre todos os componentes, incluindo $p = s$, remove a representação de forças repulsivas que são incoerentes com as reais interações atrativas dos componentes. Esta modelagem permitirá a correta inclusão do termo de correção de Enskog como uma força repulsiva através da interface e dos fluidos. Assim, removendo as inconsistências termodinâmicas observadas na comparação com o modelo de Philippi *et al.* (2012), e permitindo também sua extensão para representação de gradientes de densidade na interface como evidenciado por Bao e Schaefer (2013).

5 RESULTADOS DE VERIFICAÇÃO - MONOCOMPONENTE

No presente capítulo são desenvolvidos resultados de verificação que fundamentam e corroboram conceitos que serão empregados no modelo *lattice* Boltzmann desenvolvido para a representação de sistemas multicomponentes. As análises são conduzidas para problemas hidrodinâmicos monocomponente, *i.e.*, escoamentos de um único componente fluido, com o objetivo de observar e destacar as influências do modelo de colisão abordado na Seção 4.3.4 para representação de problemas incompressíveis. Nas seções são desenvolvidos os *Benchmarks* de instabilidade de Kelvin-Helmholtz e cavidade com tampa deslizante, tendo como foco as análises de convergência de malha, estabilidade e efeito de compressibilidade.

A implementação do modelo corrigido, caracterizado pela Eq. (205), é denominado no presente capítulo como modelo Stokesiano, sendo representado pela Eq.(168) a função distribuição de não-equilíbrio para escoamento monocomponente.

5.1 Instabilidade de Kelvin-Helmholtz

O problemas de instabilidade de Kelvin-Helmholtz é caracterizado por uma configuração inicial de duas camadas antiparalelas de cisalhamento num domínio bidimensional quadrado e totalmente periódico, sendo o campo inicial de velocidade descrito por

$$\begin{aligned}
 u_x &= \begin{cases} U_0 \tanh \left[\lambda_{KH} \left(\frac{y}{L} - \frac{1}{4} \right) \right], & y \leq \frac{L}{2}, \\ U_0 \tanh \left[\lambda_{KH} \left(\frac{3}{4} - \frac{y}{L} \right) \right], & y > \frac{L}{2}, \end{cases} \\
 u_y &= \epsilon_{KH} U_0 \sin \left[2\pi \left(\frac{x}{L} + \frac{1}{4} \right) \right];
 \end{aligned} \tag{214}$$

onde u_x é a velocidade horizontal que descreve a camada de cisalhamento, U_0 é a velocidade de referência, λ_{KH} a espessura inicial da camada de cisalhamento, e L o comprimento do domínio em número de pontos de malha. O campo de velocidade vertical u_y representa uma perturbação perpendicular ao escoamento cisalhante e o parâmetro ϵ_{KH} controla a intensidade desta perturbação inicial.

A inicialização do campo de pressão/densidade (parâmetros acoplados) é feito com base no procedimento de condições iniciais proposto por Mei *et al.* (2006), tal procedimento satisfaz a equação de Poisson para o acoplamento de pressão-velocidade do fluido.

Para análise do presente problema será utilizado o número de Reynolds $Re = U_0 L / \nu$ e o tempo característico $T_{over} = L / U_0$.

5.1.1 Teste de convergência de malha

Nas análises do domínio discreto, espera-se que as soluções convirjam com o refinamento do tamanho de malha tendendo a zero, tendo a taxa de convergência dos resultados como o parâmetro que quantifica a eficiência do processo convergência. Assumindo um comportamento de convergência exponencial, a relação entre erro e taxa de convergência é dada por

$$ER = c(L_{ref})^{\hat{a}} \quad (215)$$

onde ER é o erro, c uma constante, L_{ref} o comprimento de referência do domínio e \hat{a} a taxa de convergência exponencial do erro.

Sendo o número de Reynolds o parâmetro de referência, tem-se duas alternativas para o teste de convergência de malha mantendo o número de Reynolds constante quando multiplicado o comprimento L por um número inteiro S : i) multiplica-se a viscosidade ν por S mantendo a velocidade de referência constante (escala convectiva); ii) dividi-se a velocidade de referência por S mantendo a viscosidade constante (escala difusiva).

No presente teste, as análises de convergência do modelo Stokesiano são conduzidas em ambas escalas, convectiva e difusiva, e comparadas com os resultados obtidos pelos modelos colisão BGK e Regularizado (proposto por Latt e Chopard (2006) e representado pela Eq. 165). As simulações são realizadas triplicando o comprimento de malha ($S = 3$) com os valores de $L = 32, 96, 288$ e 864 para $Re = 4000, 15000$ e 30000 .

Na Figura 12 são ilustrados os campos de vorticidade para diferente tamanhos de malha no tempo de $T_{over} = 1$ e $T_{over} = 1.5$ para $\lambda_{KH} = 80, \epsilon_{KH} = 0.05, U_0 = 0.0625$ e $Re = 4000$. Os valores de $\lambda_{KH} = 80$ e $\epsilon_{KH} = 0.05$ foram mantidos em todos os casos simulados.

Para os testes da escala convectiva a velocidade de referência foi fixada em $U_0 = 0.0625$ para $Re = 4000, 15000$ e 30000 . Enquanto, na escala difusiva a viscosidade foi fixada em $\nu = 6.75 * 10^{-3}, \nu = 1.8 * 10^{-3}$ e $\nu = 9. * 10^{-4}$ para $Re = 4000, 15000$ e 30000 , respectivamente. O erro utilizado no calcula da taxa de convergência para ambas escalas é dado pelo erro de velocidade relativa L_2 , descrito pela equação

$$L_2 = \sqrt{\frac{\sum_{y,x} [(u_x(x,y) - u_{x,ref}(x,y))^2 + (u_y(x,y) - u_{y,ref}(x,y))^2]}{\sum_{y,x} (u_{x,ref}^2(x,y) + u_{y,ref}^2(x,y))}}, \quad (216)$$

o subscrito ref indica o campo de velocidade de referência, correspondendo a maior resolução de 864×864 pontos de malha. A soma sobre x e y é feita levando em conta apenas os ponto que estão presentes na malha mais grosseira. A Figura 13 ilustra o esquema de comparação dos pontos de malha, utilizando como exemplo as malhas triplicadas $3 \times 3, 9 \times 9$ e 81×81 , onde os pontos vermelhos são os pontos de comparação determinados pela malha mais grosseira.

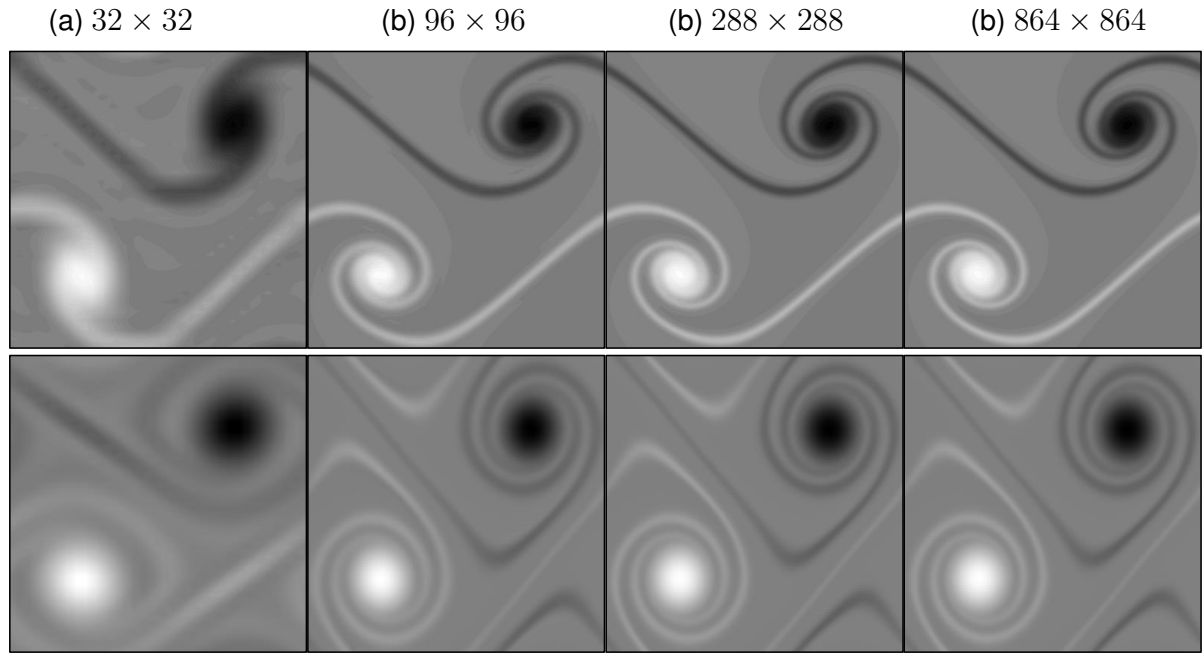


Figura 12 – Campo de vorticidade para os comprimentos de malha de (a) 32, (b) 96, (c) 288 and (d) 864 unidades *lattices*. Os campos foram coletados nos tempos $T_{over} = 1$. e $T_{over} = 1.5$ para as fileiras superior e inferior, respectivamente.

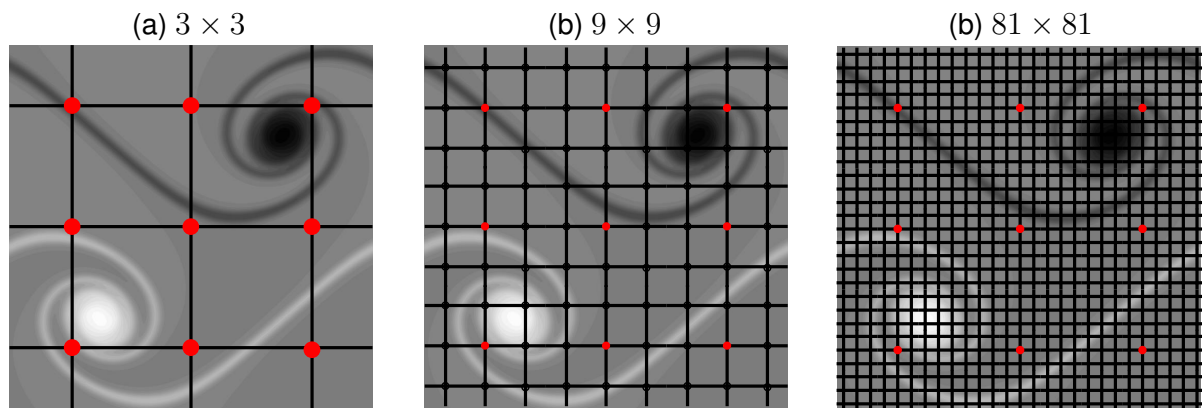


Figura 13 – Esquema de comparação dos pontos de malha para o cálculo do erro L_2 . Os pontos em vermelho são os pontos de comparação determinados pela malha mais grosseira.

Na Tabela 2 os resultados do erro L_2 em função de L e de \dot{a} são mostrados para as escalas difusiva e convectiva em três diferentes valores do número Reynolds. Como esperado, as simulações realizadas com o modelo BGK demonstraram instabilidades para $L = 32$ em $Re = 4000$ na escala convectiva, e em ambas escalas para $L = 32$ e 96 em $Re = 15000$ e 30000. Consequentemente, não foi possível calcular a taxa de convergência do modelo BGK para $Re = 15000$ e 30000, enquanto para $Re = 4000$ o modelo demonstra a maior taxa em ambas escalas. Os modelos Regularizados e Stokesiano apresentaram estabilidade em todos os casos, demonstrando ambos valores de L_2 e \dot{a} menores que o modelo BGK para $Re = 4000$, no entanto, todos os demais casos demonstraram taxas de convergência de segunda ordem. Na comparação entre Regularizado e Stokesiano, ambos modelos demonstram resultados de

Tabela 2 – Erro L_2 e taxa de convergência \dot{a} para (A) modelo BGK, (B) Regularizado, e (C) modelo Stokesiano.

		$L_2(u)$								
		Convectivo								
		$Re = 4000$			$Re = 15000$			$Re = 30000$		
L		A	B	C	A	B	C	A	B	C
32		-	0.22941	0.21167	-	0.55975	0.54344	-	0.63134	0.61595
96		0.01332	0.00926	0.00927	-	0.03980	0.04078	-	0.10459	0.10144
288		0.00074	0.00073	0.00081	0.00192	0.00173	0.00176	0.00421	0.00321	0.00322
\dot{a}		-2.61	-2.61	-2.53	-	-2.62	-2.61	-	-2.40	-2.39
		Difusivo								
		$Re = 4000$			$Re = 15000$			$Re = 30000$		
L		A	B	C	A	B	C	A	B	C
32		0.78163	0.26792	0.25476	-	0.61002	0.59786	-	0.68551	0.67408
96		0.01578	0.01336	0.01366	-	0.04834	0.04957	-	0.10716	0.10385
288		0.00112	0.00101	0.00100	0.00227	0.00256	0.00268	0.00514	0.00507	0.00532
\dot{a}		-2.97	-2.53	-2.52	-	-2.49	-2.46	-	-2.23	-2.20

L_2 e \dot{a} muito próximos, sendo os valores de \dot{a} no modelo Stokesiano menores na ordem média de 3%.

5.1.2 Teste de estabilidade

Na análise de estabilidade investiga-se as características do modelo Stokesiano quando o número de Reynolds é aumentado pela diminuição da viscosidade, e conseqüentemente pela diminuição do tempo de relaxação, para uma velocidade de referência e malha fixada. Os resultados obtidos são comparados com os resultados apresentados por (MATTILA; PHILIPPI; HEGELE, 2017).

Replicando o teste de estabilidade performado por Mattila, Philippi e Hegele (2017), aumenta-se o número de Reynolds para um dado número de Mach baseado na velocidade de referência, *i.e.*, $Ma = U_0/c_s$, buscando o máximo valor atingível do número de Reynolds. O escoamento é considerado estável quando a energia cinemática E_k global do sistema decai a cada passo de tempo durante o tempo total de $T_{over} = 10$. A energia cinética global E_k é dada por

$$E_k = \frac{1}{2} \frac{\sum_{x,y} (\mathbf{u}^2(x,y))}{N^2}. \quad (217)$$

Os resultados obtidos para uma malha de 129×129 pontos estão apresentados na Figura 14 e comparados com os resultados de Mattila, Philippi e Hegele (2017) para os modelos BGK, Regularizado e recursivo. Nos comportamentos observados, nota-se que todos os modelos, exceto pelo BGK, demonstraram um aumento da estabilidade com a diminuição do número de Mach. Entre os modelos, o modelo Stokesiano apresenta um aumento significativo da estabilidade para valores de $Ma < 0.01804$.

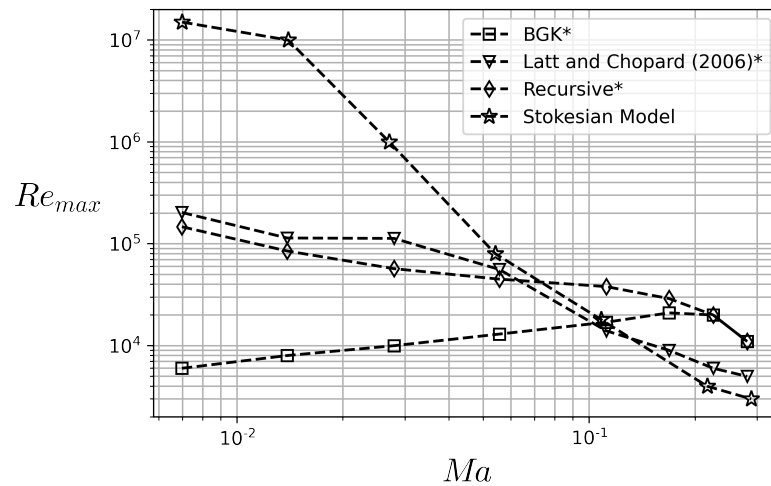


Figura 14 – Teste de estabilidade: máximo número de Reynolds atingível como função do número de Mach. O teste é performed considerando uma malha de 129×129 pontos. O sobrescrito * indica os resultados que foram obtidos de Mattila, Philippi e Hegele (2017).

5.1.3 Efeito de compressibilidade

Devido a descrição de gás rarefeito da equação Boltzmann, não é possível garantir a incompressibilidade numa simulação numérica de escoamento no método LBM, sendo o efeito de compressibilidade representado por $\nabla \cdot \mathbf{u} \neq 0$. Deste modo, investiga-se a influência do número de Mach na compressibilidade do modelo Stokesiano comparando com os modelos BGK e Regularizado. As simulações foram realizadas para $Re = 4000, 15000$ e 30000 em quatro diferente resoluções $N = 64, 128, 256$ e 512 , até o tempo $T_{over} = 1$. A quantificação do efeito de compressibilidade é feita pela equação da raiz quadrada média (RMS, *root mean square*), descrita por

$$\sqrt{\langle (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \rangle} = \left[\frac{\sum_{x,y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2}{L^2} \right]^{1/2} \quad (218)$$

onde as derivadas parciais foram calculadas através do método de transformada rápida de Fourier.

Na Tabela 3 são demonstrados os resultados de compressibilidade em função do número de Mach. Todos os modelos demonstraram uma tendência de diminuição do efeito compressibilidade com a diminuição do número de Mach. Nas comparações, o modelo Stokesiano apresenta reduções significativas na compressibilidade do escoamento, com porcentagem de redução na média 70% e 46% em relação ao modelo BGK e Regularizado, respectivamente.

Tabela 3 – Dependência do RMS do divergente da velocidade no número de Reynolds (Re), número de Mach (Ma) e comprimento de malha (L). (A) modelo BGK, (B) Regularizado e (C) Stokesiano.

$\sqrt{\langle (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \rangle}$												
$Re = 4000$												
L	$Ma = 0.1082$			$Ma = 0.0541$			$Ma = 0.0270$			$Ma = 0.0135$		
	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C
33	-	0.054170	0.03904	-	0.026880	0.01761	-	0.01430	0.00952	-	0.008610	0.00580
65	0.174980	0.019880	0.01884	0.167420	0.012350	0.00839	0.16530	0.00630	0.00503	0.164730	0.004130	0.00329
1290	0.022410	0.017650	0.01462	0.013880	0.010140	0.00434	0.00999	0.00261	0.00179	0.005810	0.001590	0.00121
2570	0.022140	0.019560	0.01583	0.012510	0.010840	0.00547	0.008150	0.003900	0.00115	0.001350	0.001460	0.00028
5130	0.022300	0.020690	0.01773	0.012550	0.011390	0.00786	0.008070	0.0055840	0.00255	0.001580	0.001750	0.00024
$Re = 15000$												
L	$Ma = 0.1082$			$Ma = 0.0541$			$Ma = 0.0270$			$Ma = 0.0135$		
	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C
33	-	0.124740	0.10776	-	0.070540	0.06065	-	0.04387	0.03848	-	0.034380	0.03230
65	-	0.038600	0.03197	-	0.021140	0.01463	-	0.01138	0.00824	-	0.006980	0.00511
1290	0.540470	0.022390	0.01865	0.530140	0.012480	0.00746	0.53075	0.00505	0.00413	0.531020	0.003200	0.00268
2570	0.025070	0.021680	0.01722	0.014680	0.011480	0.00608	0.01080	0.00431	0.00186	0.010800	0.001900	0.00106
5130	0.024260	0.022680	0.01896	0.013070	0.011840	0.00813	0.00836	0.00573	0.00261	0.001850	0.001840	0.00032
$Re = 30000$												
L	$Ma = 0.1082$			$Ma = 0.0541$			$Ma = 0.0270$			$Ma = 0.0135$		
	A	B	C	A	B	C	A	B	C	A	B	C
33	-	0.172080	0.15956	-	0.102350	0.09439	-	0.06267	0.05841	-	0.049940	0.04851
65	-	0.056700	0.04715	-	0.027670	0.02102	-	0.01498	0.01123	-	0.008770	0.00647
129	-	0.026680	0.02249	-	0.014180	0.00943	-	0.00633	0.00524	-	0.003930	0.00329
2570	0.063770	0.023360	0.01879	0.060290	0.012020	0.00676	0.05921	0.00478	0.00255	0.058720	0.002310	0.00155
5130	0.025160	0.023620	0.01985	0.013400	0.012000	0.00823	0.00853	0.00579	0.00268	0.002320	0.001920	0.00052

5.2 Cavidade com tampa deslizante

Em contraste com o problema totalmente periódico de instabilidade de Kelvin-Helmholtz, a modelagem LB Stokesiana monocomponente é empregada na simulação do problema de cavidade com tampa deslizante que necessita da aplicação de condições de contorno de velocidade. O problema é representado por uma cavidade quadrada com tampa superior que desliza com velocidade constante U_0 (ilustrado na Figura 15), sendo este tipo de escoamento caracterizado pela formação de vórtices que podem ser intensificados de acordo com número de Reynolds.

As condições de contorno de *half-way bounce-back* (condição de contorno entre camadas) e *moments-based* (condição de contorno local) são empregadas e comparadas nas simulações numéricas. Para mais detalhes das condições de contorno ver Apêndice D. Ambas condições satisfazem a conservação de massa global e representam corretamente as condições de quinas.

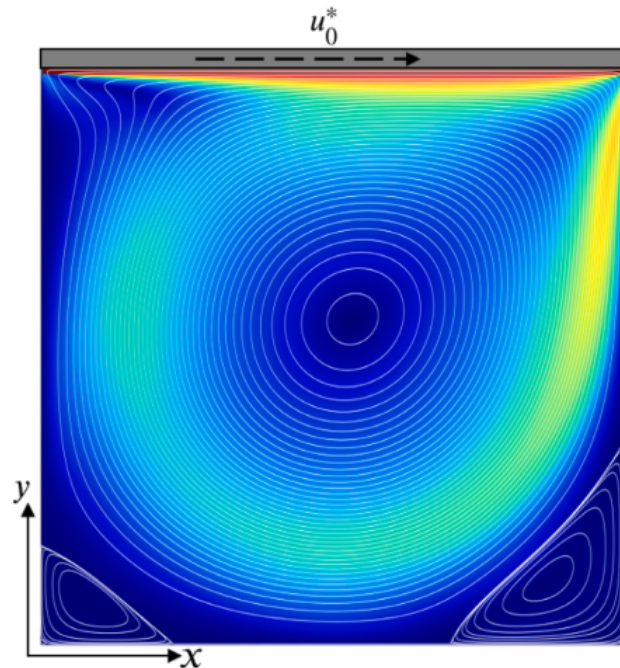


Figura 15 – Formação de vórtice para $Re = 10000$ na geometria do problema de cavidade de tampa deslizante bidimensional. A tampa em $y = L$ se move com velocidade U_0 .

5.2.1 Acurácia

Na Figura 16 são mostradas as isolinhas de corrente e vorticidade obtidas para $Re = 100, 400, 1000, 3200,$ e 5000 , considerando $U_0 = 0.0625$ (velocidade da tampa), malha de 513×513 pontos e condições de contorno *moments-based*.

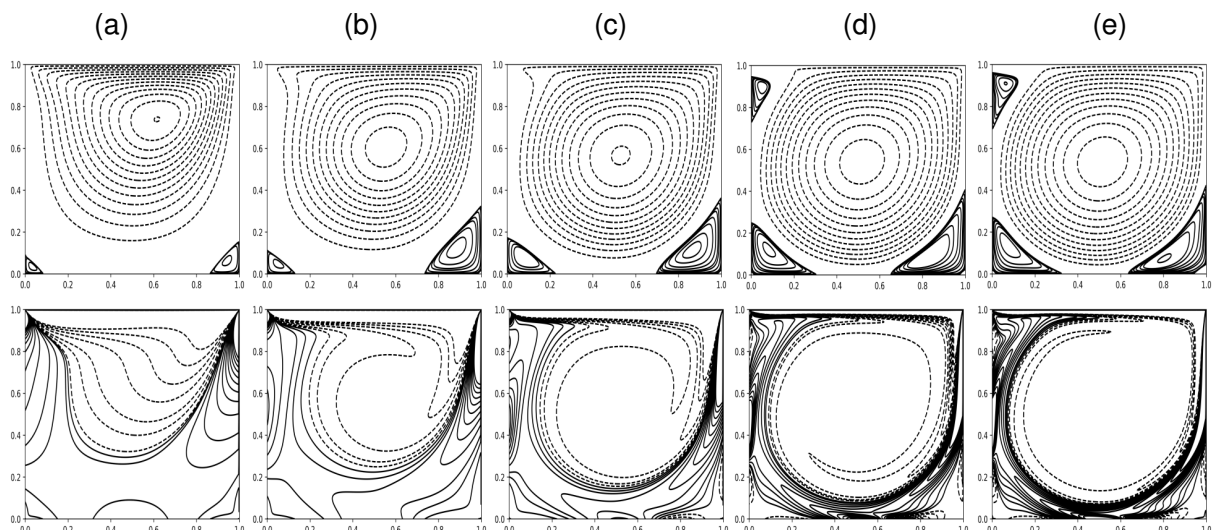


Figura 16 – Isolinhas de corrente e vorticidade para (a) $Re = 100$, (b) $Re = 400$, (c) $Re = 1000$, (d) $Re = 3200$ and (e) $Re = 5000$. Na linha superior é ilustrado as linhas de corrente e na inferior as linhas de vorticidade.

Na Figura 17 ilustra-se para $Re = 100, 400, 1000$ e 5000 os perfis numéricos de velocidade u_x/U_0 ao longo da linha média $y = L/2$ e de velocidade u_y/U_0 ao longo da linha média

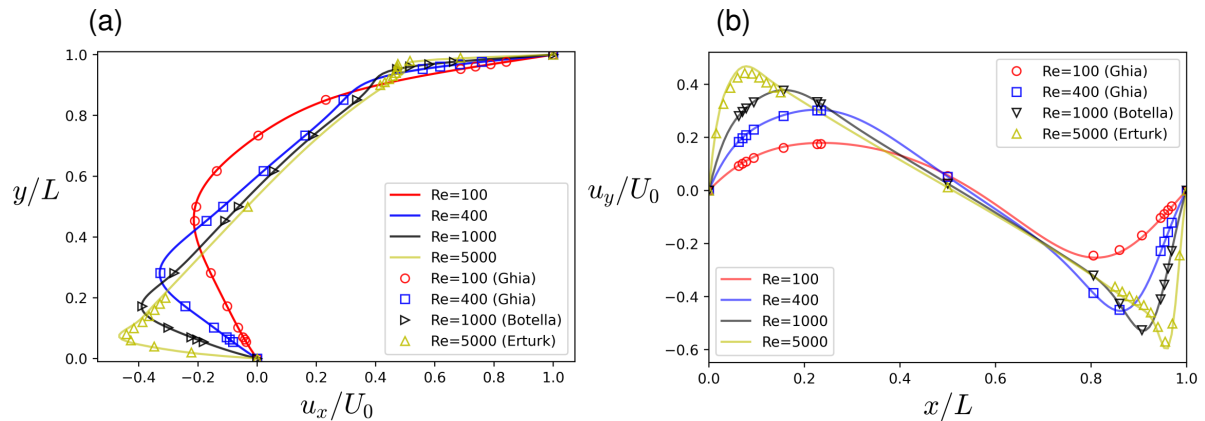


Figura 17 – Resultados numéricos em $Re = 400, 1000$ e 5000 para: a) velocidade horizontal u_x/U_0 ao longo da linha média $x = L/2$; b) velocidade vertical u_y/U_0 ao longo da linha média $y = L/2$ da cavidade. Os resultados são comparados com Ghia, Ghia e Shin (1982), Botella e Peyret (1998) e Erturk, Corke e Gökçöl (2005).

$x = L/2$ da cavidade. Os resultados foram obtidos das simulações apresentadas na Figura 16. Os perfis de velocidade são comparados qualitativamente com os resultados de Ghia, Ghia e Shin (1982) e Erturk, Corke e Gökçöl (2005) que obtiveram resultados numéricos através dos esquemas de discretização baseados na formulação *vorticity-stream* $\omega_z - \psi$. Os perfis de velocidade são também comparados com o resultados Botella e Peyret (1998) que utilizaram uma solução de alta acurácia baseada no método de colocação de Chebyshev para a discretização espacial de uma expansão assintótica da equação de Navier-Stokes. Em suma, observou-se para todos os perfis comparados excelente proximidade com os resultados da literatura.

5.2.2 Teste de convergência de malha

O teste de convergência de malha do modelo Stokesiano foi realizado para diferentes valores do número de Re utilizando as condições de contorno de *half-way bounce-back* (HW) e *moments-based* (MB), ambas descritas no Apêndice D. O procedimento segue o mesmo desenvolvido na Seção 5.1.1. Contudo, como HW é uma condição entre camadas e MB uma condição de contorno local, o teste é performada triplicando ($S = 3$) a malha para HW e duplicando ($S = 2$) a malha para MB.

Na Figura 18 (a) e (b) os resultados de taxa de convergência são apresentados nas escalas convectiva e difusiva para diferentes valores de Re . As malhas de 432×432 e 257×257 pontos foram utilizadas como malhas de referência para HW e MB, respectivamente. O erro L_2 é calculado para HW com as malhas $L = 16, 48$ e 144 , e para MB com as malhas $L = 16, 32, 64$ e 128 . Na escala convectiva, a velocidade da tampa $U_0 = 0.015625$ é fixada para todos os casos. Na escala difusiva são fixados os valores de viscosidade iguais a $\nu = 5.33 \times 10^{-2}$, 1.33×10^{-2} e 5.33×10^{-3} para os casos HW, e $\nu = 4.0 \times 10^{-2}$, 1.0×10^{-2} e 4.0×10^{-3} para os casos MB, ambos para $Re = 100, 400$ e 1000 , respectivamente.

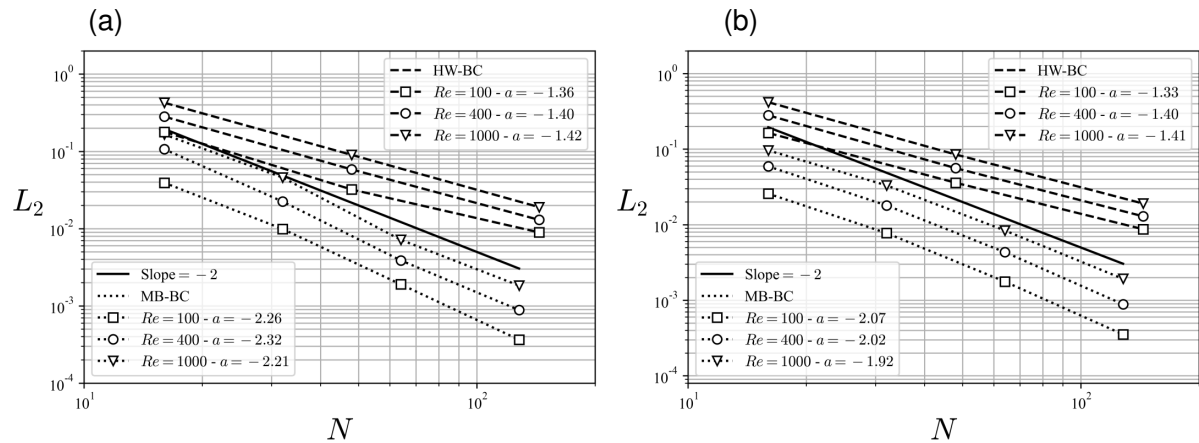


Figura 18 – Teste de convergência de malha para $Re = 100, 400$ and 1000 : (a) escala convectiva; (b) escala difusiva. As linhas tracejadas e pontilhadas representam os casos com condições de contorno HW e MB, respectivamente.

Taxas de convergência de segunda ordem foram observadas em todos os casos simulados com as condições de contorno MB. Enquanto para a condição de contorno por HW, foram observadas taxas de convergência na faixa de 1.33 to 1.42, em concordância com os resultados apresentados por Luo *et al.* (2011). Ademais, as simulações com MB demonstraram valores menores de erro L_2 em relação a HW.

5.2.3 Teste de Estabilidade

O teste de estabilidade foi realizado buscando o máximo número de Reynolds atingível para um valor de número de Mach fixado. Considera-se o escoamento estável quando a simulação atinge $T_{over} = 100$ tempos *turn-over*, sendo $T_{over} = L/U_0$.

As simulações foram conduzidas para dois números de Mach, $Ma = 0.2165$ e $Ma = 0.1082$, e para os comprimentos de malha (L) variando de 40 até 400. Os resultados obtidos são comparados com os resultados de Bazarin *et al.* (2021), o qual utilizou o modelo Regularizado de Latt e Chopard (2006) e diferentes modelos de condições de contorno *moments-based*.

Na Figura 19 mostra-se a comparação entre as faixas de estabilidade obtidas pelo modelo Stokesiano e pelos resultados de Bazarin *et al.* (2021) utilizando as condições de contorno propostas pelos trabalhos de Latt *et al.* (2008), Malaspinas, Chopard e Latt (2011), Mohammed e Reis (2017) e o método IV de Bazarin *et al.* (2021).

Na Figura 19 a) o modelo Stokesiano-MB demonstra estabilidade na ordem 10^6 , enquanto os modelos de Bazarin *et al.* (2021) e Latt e Chopard (2006) atingem valores na ordem de 10^5 , e os modelos de Malaspinas, Chopard e Latt (2011) e Mohammed e Reis (2017) atingem valores na ordem de 10^4 . Quando o modelo Stokesiano é utilizado com as condições de contorno HW para $Ma = 0.2165$, as simulações permanecem estáveis para $Re \rightarrow \infty$. Na Figura 19 b) o modelo Stokesiano com ambas condições de contorno apresentam estabilidade para

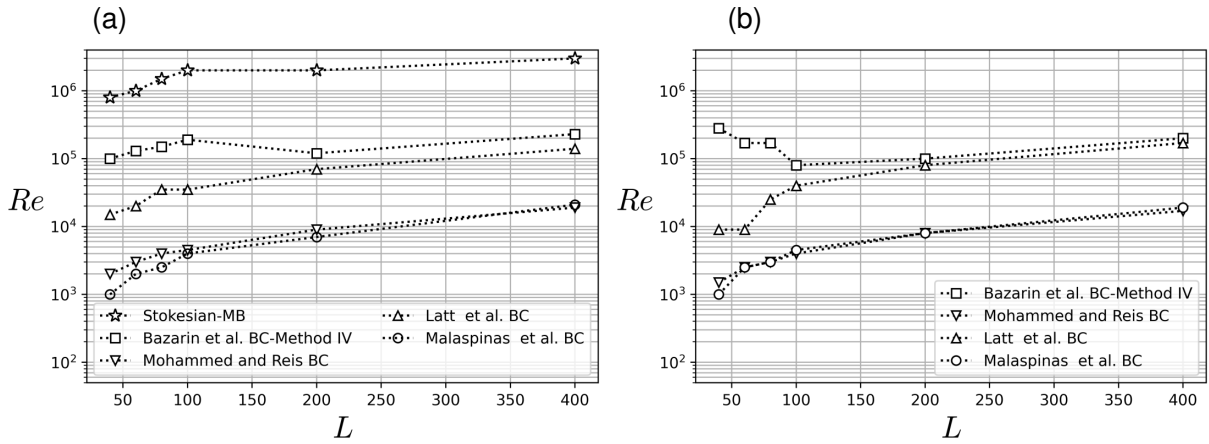


Figura 19 – Teste de estabilidade: máximo número de Reynolds atingível em função de L variando de 40 até 400 para a) $Ma = 0.2165$ e b) $Ma = 0.1082$. A ausência dos resultados do modelo Stokesiano com HW em a) e ambos, Stokesiano com MB e HW em b), ocorrem devido as simulações permanecerem estáveis em $Re \rightarrow \infty$.

$Re \rightarrow \infty$, enquanto os demais modelos apresentam valores máximos de número de Reynolds na ordem de 10^5 e 10^4 .

5.2.4 Efeito de Compressibilidade

Analisando a influência do modelo Stokesiano na compressibilidade do escoamento na cavidade com tampa deslizante, foram simulados casos que replicam o procedimento de análise feito por Luo *et al.* (2011) para $Ma = 0.1732$ com L variando de 65 até 513, sendo o efeito de compressibilidade quantificado pela raiz quadrada média (RMS) de $\nabla \cdot \mathbf{u}$, dada pela Eq. (218). Os termos derivativos no domínio numéricos são calculados pelas formulas de diferenças finitas:

$$\begin{aligned} \partial_x u(x_i, y_i) &\approx u(x_{i+1}, y_j) - u(x_{i-1}, y_j) \\ &\quad - \frac{1}{4} [u(x_{i+1}, y_{j+1}) - u(x_{i-1}, y_{j+1}) - u(x_{i-1}, y_{j-1}) + u(x_{i+1}, y_{j-1})] \end{aligned} \quad (219)$$

$$\begin{aligned} \partial_y v(x_i, y_i) &\approx v(x_i, y_{j+1}) - v(x_i, y_{j-1}) \\ &\quad - \frac{1}{4} [v(x_{i+1}, y_{j+1}) + v(x_{i-1}, y_{j+1}) - v(x_{i-1}, y_{j-1}) - v(x_{i+1}, y_{j-1})] \end{aligned} \quad (220)$$

para os pontos internos do domínio, *i.e.*, $L > x > 0$ and $L > y > 0$. Para os nós próximos a fronteira

$$\partial_x u(x_b, y_i) \approx \frac{1}{3} [u(x_{b\pm 1}, y_j) + 3u(x_b, y_j)], \quad (221)$$

$$\partial_y v(x_i, y_b) \approx \frac{1}{3} [v(x_i, y_{b\pm 1}) + 3v(x_i, y_b)], \quad (222)$$

onde o subscripto b indica a posição da camada.

Contudo, a análise do efeito de compressibilidade na cavidade com tampa deslizante é dificultada pela singularidade na representação das velocidades nas quinas superiores. Devido a singularidade, a representação numérica do escoamento próximo as quinas resulta em aumentos dos valores de termos derivativos da velocidade que tendem ao infinito com o refino da malha (SCHULTZ; LEE; BOYD, 1989), (BRUNEAU; SAAD, 2006). Deste modo, a quantificação do efeito de compressibilidade pela Eq. (218) em simulações com condições de contorno locais não tendem a apresentar convergência dos termos derivativos do campo de velocidade, como demonstrado por Bruneau e Saad (2006). Por outro lado, as condições de *half-way* no LBM são uma alternativa para evitar tal problema, de maneira que, as singularidades nas quinas superiores são representadas de modo indireto pela modelagem entre camadas. Isto posto, na presente análise será utilizado no modelos Stokesiano apenas com a condição de contorno HW.

Na Tabela 4 os resultados obtidos utilizando o modelo Stokesiano são comparados com os resultados apresentado por Luo *et al.* (2011) para os modelos de colisão BGK, TRT e MRT, ambos com condições de contorno HW. Com o número de Mach fixo em $Ma = 0.1732$ o teste é aplicado para os números de Reynolds 100 e 1000. No comportamento dos resultados, os modelos TRT, BGK e Stokesiano demonstraram uma diminuição do efeito de compressibilidade com o refinamento de malha, enquanto o MRT apresentou o aumento da compressibilidade penas em $Re = 100$. O modelo Stokesiano demonstrou reduções significativas do efeito de compressibilidade com relação aos demais modelos, com reduções médias para $Re = 100$ de 47%, 10% e 40% em relação aos modelo MRT, TRT e BGK, respectivamente, e para $Re = 1000$ reduções de 14%, 15% e 42% em relação aos modelos MRT, TRT e BGK, respectivamente.

Tabela 4 – Dependência do RMS do divergente da velocidade com relação ao número de Reynolds (Re) e tamanho de malha (L). Os resultados para os modelos MRT, TRT, e BGK foram obtidos de Luo *et al.* (2011).

N	RMS do divergente da velocidade							
	$Re = 100$				$Re = 1000$			
	Luo <i>et al.</i> (2011)			Stokesiano	Luo <i>et al.</i> (2011)			Stokesiano
	MRT	TRT	BGK	HW	MRT	TRT	BGK	HW
65	0.305216	0.302737	0.361507	0.216479	0.345939	0.359265	-	0.316146
129	0.305982	0.299739	0.310092	0.180424	0.325027	0.334810	0.567025	0.296477
257	0.309262	0.298951	0.239084	0.140927	0.313045	0.316334	0.458426	0.267637
513	0.313143	0.298658	0.181124	0.108498	0.305985	0.304804	0.379374	0.233431

5.3 Considerações

Os efeitos da hipótese de Stokes descrita pela correção do tensor tensão (168), foram investigados numericamente para os problemas de instabilidade de Kelvin-Helmholtz e de cavi-

dade com tampa deslizando, tendo como foco das análises os comportamentos da convergência numérica, estabilidade e efeitos de compressibilidade.

No problema de instabilidade de Kelvin-Helmholtz foram conduzidas comparações com os modelos de colisão BGK e Regularizado, onde o modelo Stokesiano apresentou grande aumento nas faixas de estabilidade numérica e reduções significativas nos efeitos de compressibilidade. Contudo, as taxas de convergência dos resultados numéricos, com base nos testes de malha, foram significativamente menores em comparação com o modelo BGK e aproximadamente similares ao do modelo Regularizado. Entretanto, todos os modelos mantiveram taxas de convergência de malha de segunda ordem.

Para a cavidade com tampa deslizando, o modelo Stokesiano foi analisado nas condições de contorno de *half-way bounce-back* e *moments-based*, e comparado com os resultados de Luo *et al.* (2011) Bazarin *et al.* (2021). No teste de convergência de malha foram observadas taxas de decaimento de segunda ordem para a condição *moments-based* e taxa de convergência de primeira ordem para *half-way bounce-back*, em concordância com os resultados de *half-way bounce-back* de Luo *et al.* (2011). Nas análises de estabilidade foram observadas estabilidades para Re tendendo ao infinito em ambas condições de contorno. Por fim, na comparação dos efeitos de compressibilidade com os resultados de Luo *et al.* (2011), notam-se reduções percentuais significativas que variam na faixa de 10 até 47%.

Diante dos resultados observados de melhoria na compressibilidade e estabilidade, ambos sem comprometer a taxa de convergência, sua extensão para representação de casos incompressíveis em sistemas multicomponentes é considerada válida pelo presente trabalho. Posto que, tal correção pode ser facilmente implementada com baixos custos adicionais de recurso computacional.

6 PROBLEMAS MULTICOMPONENTE

na sequência das análises, o modelo multicomponente é empregado aos problemas de verificação de dois fluidos imiscíveis, tendo como principal objetivo observar melhorias do presente modelo em relação aos demais modelos similares da literatura.

Neste seção são desenvolvidos três problemas de verificação: bolha estática, escoamento de Poiseuille para dois-componentes e deslocamento fluido-fluido. As verificações buscam examinar os efeitos resultantes dos esquemas de discretização desenvolvidos na Sec. 4.3. As análises apresentadas tem como foco a estabilidade do problema para altas razões de viscosidade e em específico no problema de bolha estática a magnitude de correntes espúrias. Adicionalmente, o caso de bolha estática é simulado utilizando os *lattices* D2Q9 e D2V141 na discretização do modelo de força (definidos na Sec. 4.3.5) para a comparação de suas influências na representação dos termos derivativos. Nos demais casos é utilizado apenas o *lattice* D2V141 para a discretização dos termos.

6.1 Bolha Estática

Buscando verificar a representação da tensão interfacial, influência de correntes espúrias e estabilidade, realizam-se simulações do problema de bolha estática. Geometricamente, o problema consiste de uma bolha circular de raio r_b (fluido 2) localizada no centro de um domínio quadrado com comprimento H e imersa num fluido de suspensão (fluido 1). Condições de contorno periódicas são consideradas em todas as camadas (Figura 20). As hipóteses do problema são de temperatura constante, força gravitacional nula, sendo ambos os fluidos incompressíveis e Newtonianos. As simulações são executada até atingir o regime de estado estacionário, assumido quando o erro L_2 definido por

$$L_2 = \sqrt{\frac{\sum_{\vec{x}} \left[(u_x(\vec{x},t) - u_x(\vec{x},t-1))^2 + (u_y(\vec{x},t) - u_y(\vec{x},t-1))^2 \right]}{\sum_{i,j} \left[(u_x(\vec{x},t-1))^2 + (u_y(\vec{x},t-1))^2 \right]}}. \quad (223)$$

atinge um valor menor ou igual 10^{-10} .

Em conjunto com as demais análises, a influência do parâmetro de razão de viscosidade também é investigada. Sendo no presente capítulo a razão de viscosidade entre os fluidos definida por

$$M_\nu = \frac{\nu_1}{\nu_2}. \quad (224)$$

onde os subscritos 1 e 2 indicam os fluidos 1 e 2, respectivamente

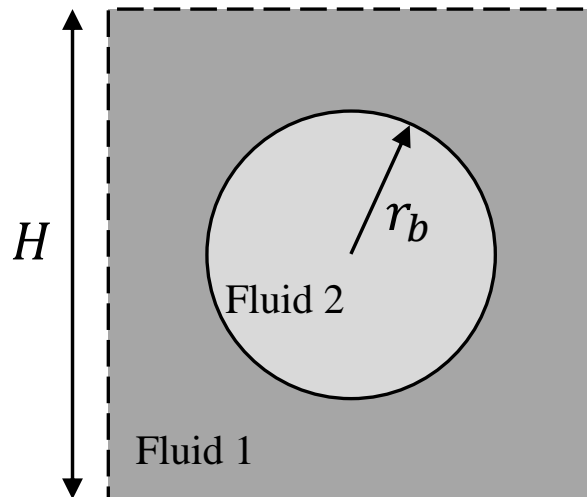


Figura 20 – Representação esquemática do problema de bolha estática.

6.1.1 Teste de Faixa de Imiscibilidade

Antes de qualquer análise em específico, o parâmetro $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ é variado no intuito de observar as faixas de miscibilidade e imiscibilidade dos fluidos. Sendo o parâmetro $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$, que controla o espaçamento da interface, mantido nulo, *i.e.*, $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}} = 0$. Neste teste, as densidades do fluido 2 (ρ_2) e do fluido 1 (ρ_1) são monitoradas no centro do domínio de $H = 100$ (coordenadas $x = 50$ e $y = 50$), considerando inicialmente $r_b = 40$, $\rho_1 = \rho_2 = 1$, e $\nu_1 = 0,78125$. Os resultados obtidos com a variação de $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ podem ser observados na Figura 21, onde os valores de $a_{\sigma\bar{\sigma}} \leq 0,7$ representam a faixa de miscibilidade (difusão de um fluido sobre o outro), o intervalo de $0,7 < a_{\sigma\bar{\sigma}} \leq 1,0$ indica uma faixa de transição, e para valores de $1,0 \leq a_{\sigma\bar{\sigma}}$ tem-se a faixa imiscível dos fluidos. Adicionalmente, os valores de densidade dos componentes obtidos com a variação de $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ mostram-se independentes das variações de M_ν no presente caso.

Comparando os *lattices* D2Q9 e D2V141 no teste de faixa de imiscibilidade, observa-se maior estabilidade na variação de $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ para o D2V141, com faixa estável para $a_{\sigma\bar{\sigma}} \leq 2,0$, enquanto o D2Q9 apresenta uma faixa estável de $a_{\sigma\bar{\sigma}} \leq 1,3$. Complementarmente, observa-se para os mesmos valores de $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ que o *lattice* D2V141 apresenta densidades maiores que o D2Q9. Este caso resulta do comportamento da interface de transição na faixa de imiscibilidade do modelo, onde nota-se a criação de uma região de baixa densidade ilustrada na Figura 22 para o perfil de densidade ao longo de x em $y = H/2$. A região de baixa densidade causa um efeito de compressão e, conseqüentemente, uma diferença de pressão entre os fluidos que caracteriza tensão interfacial descrita pela equação de Young-Laplace. Como destacado na Figura 22 b) a região de baixa densidade gerada pelo *lattice* D2V141 é maior que no D2Q9, assim justificando os valores maiores de densidade observados na Figura 21.

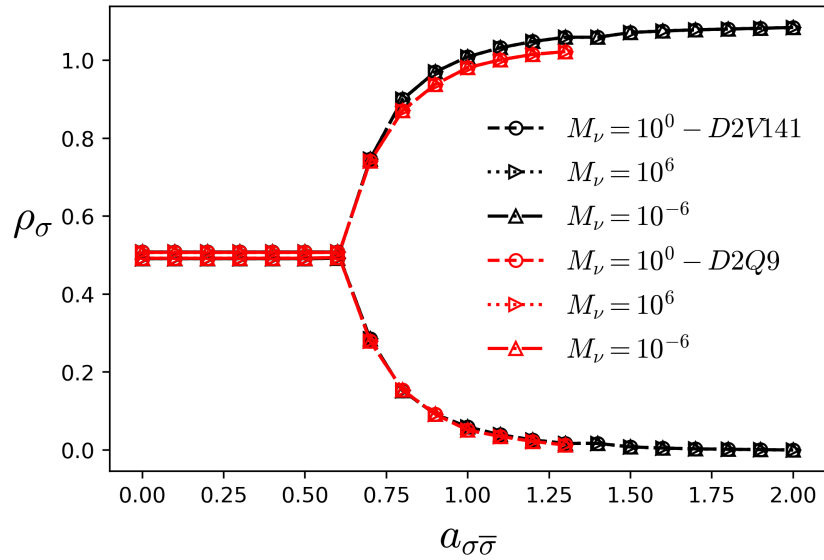


Figura 21 – Teste de faixa de imiscibilidade variando a razão de viscosidade: as linhas em vermelho e preto representam os resultados obtidos pelos *lattices* D2Q9 e D2V141, respectivamente.

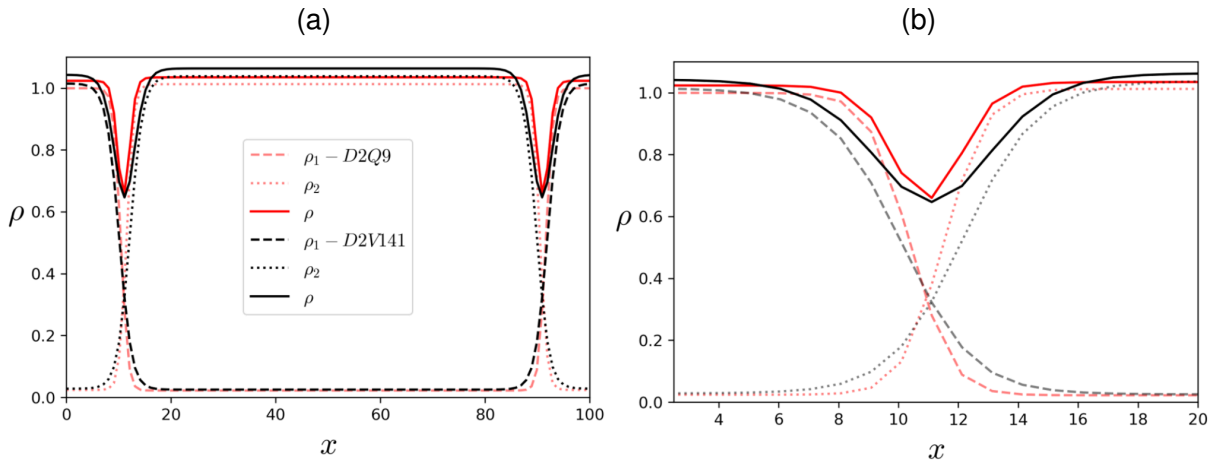


Figura 22 – Comparação do perfil de densidade do *lattice* D2Q9 (vermelho) com o D2V141 (preto): (a) perfil de densidade ao longo de x e $y = H/2$; (b) imagem com zoom da interface transição.

6.1.2 Tensão Interfacial

Com a faixa de imiscibilidade bem definida, a análise da tensão interfacial (γ) entre os fluidos imiscíveis 1 e 2 é feita com base na equação de Young-Laplace, variando r_b como uma função de Δp :

$$\underbrace{\Delta p = p_2 - p_1 = \frac{\gamma}{r_b}}_{\text{Equação de Young-Laplace}}, \quad (225)$$

onde p_1 e p_2 são as pressões medidas em cada fluido. O teste de representação de γ é simulado para o presente modelo em conjunto com a variação dos parâmetros M_ν , $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$. Os resultados ilustrados na Figura 23 demonstram o comportamento linear de Δp em função de

$1/r_b$, onde γ é proporcional ao aumento de $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$. Nota-se também que γ independente da variação de M_ν , sendo simulado valores na faixa de 10^{-12} até 10^{12} , em específico $M_\nu = 10^{12}$, 10^0 e 10^{-12} para $\nu_1 = 3,86 \times 10^{11}$; 0,386; e 0,386; respectivamente.

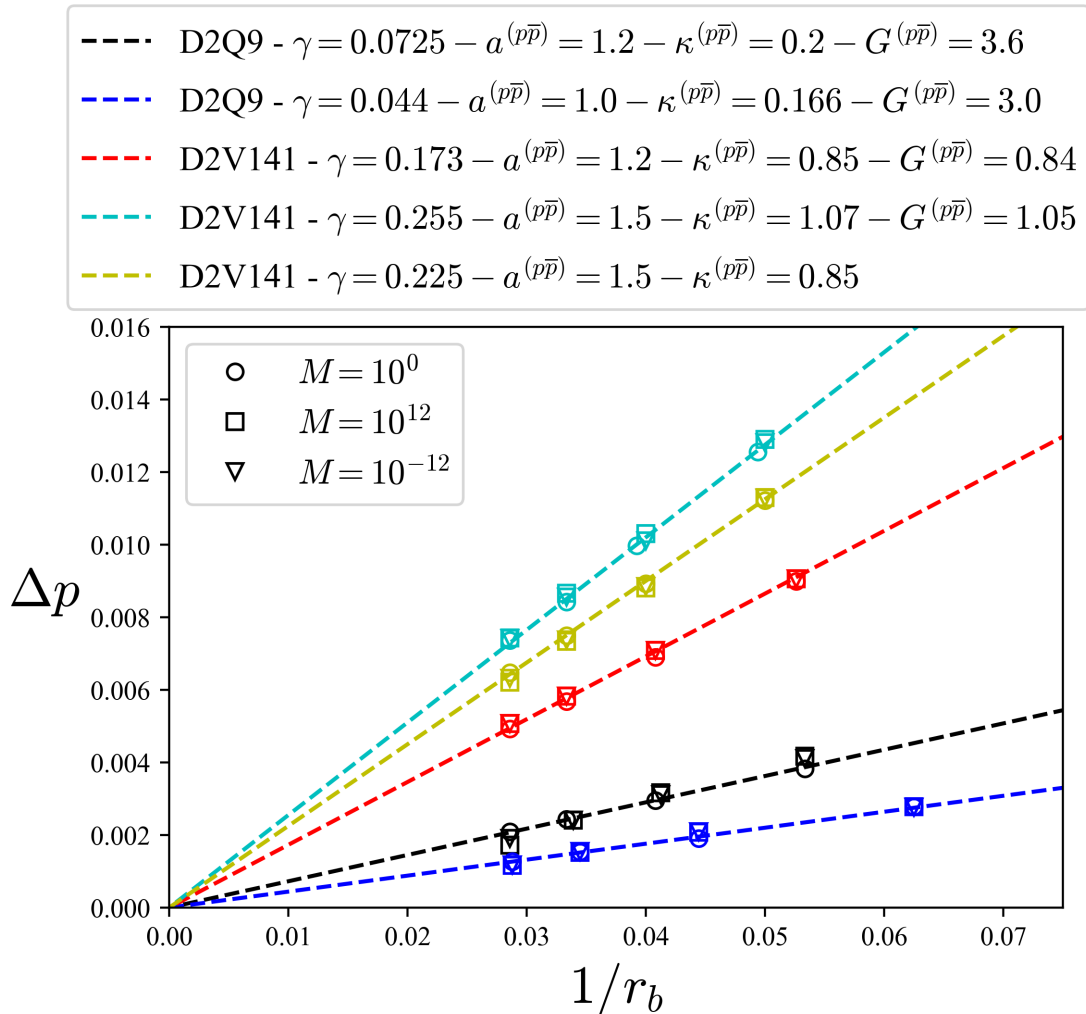


Figura 23 – Tensão interfacial: verificação da equação de Young-Laplace para diferentes valores de M_ν , $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$.

Na comparação dos *lattices* D2Q9 e D2V141, notam-se valores de γ maiores do D2V141 em relação ao D2Q9, assim como um maior controle da tensão interfacial pela variação $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$ no D2V141. Os termos derivativos discretizados pelo *lattice* D2Q9 não representaram um comportamento linear da tensão interfacial Com valores de $a_{\sigma\bar{\sigma}}$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$ que fogem da proporção de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$.

6.1.3 Correntes Espúrias

Na investigação da influência de correntes espúrias, uma formulação específica de boia estática é utilizada nos trabalho de Porter *et al.* (2012), Otomo *et al.* (2018) e Gharibi e Ashrafizaadeh (2020), para a análise da magnitude máxima da velocidade ($|u|_{max}$) em termos

dos parâmetros de viscosidade e razão de viscosidade. Sendo $|u|_{max}$ a máxima magnitude de velocidade encontrada no domínio numérico, comumente localizada na interface dos fluidos. Nesta formulação são considerados $H = 62$, $r_b = 24$ e os parâmetros do modelo de força são escolhidos no início da faixa de imiscibilidade de cada modelo, *i.e.*, $a_{\sigma\bar{\sigma}} = 1,0$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$ seguindo a proporção de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ de acordo com cada *lattice* utilizado na discretização do termo de força. A metodologia de análise é dividida em dois casos, no primeiro caso fixa-se $M_\nu = 1$ e varia-se o valor de ν_1 e no segundo caso fixa-se $\nu_1 = 0.0067$ e varia-se a M_ν .

Os resultados obtidos replicando a metodologia descrita acima estão destacados na Figura 24, juntamente com os resultados de Porter *et al.* (2012), Otomo *et al.* (2018) e Gharibi e Ashrafizaadeh (2020). Na variação de ν_1 para $M_\nu = 1$ (Figura 24 a) o presente modelo demonstra uma diminuição de $|u|_{max}$ com o aumento da viscosidade até atingir um valor aproximadamente constante na ordem de 10^{-4} e 10^{-5} para os *lattices* D2Q9 e D2V141, respectivamente. Na variação de M_ν mantendo $\nu_1 = 0.0067$ (Figura 24 b) um comportamento similar ao caso anterior foi observado, ocorrendo a diminuição de $|u|_{max}$ com o aumento da razão de viscosidade até um ponto de constância na ordem de 10^{-4} e 10^{-5} para os *lattices* D2Q9 e D2V141, respectivamente. Na comparação com os resultados de Porter *et al.* (2012), Otomo *et al.* (2018) e Gharibi e Ashrafizaadeh (2020), o presente modelo exhibe maior faixa de estabilidade na análise e $|u|_{max}$ consideravelmente menores para elevados valores de ν_1 e M_ν , alcançando ordens constantes de 10^{-4} e 10^{-5} em altos valores destas faixas. Para as faixas de baixos valores ν_1 e M_ν os trabalhos de Gharibi e Ashrafizaadeh (2020) e Otomo *et al.* (2018) apresentam valores menores de magnitude das correntes espúrias que o presente modelo.

Como extensão desta análise padronizada do problema de bolha estática, propõe-se a investigação da influência de variação parâmetro $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ nas correntes espúrias. Isto posto, na Figura 25 são ilustrados os resultados de magnitude de correntes espúria para $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 1; 1,1$ e $1,2$, para os *lattices* D2Q9 e D2V141. Nas colunas (a) e (b) da Figura 25 são ilustrados os resultados dos *lattices* D2Q9 e D2V141, respectivamente. Em ambos os casos notam-se tendência de aumento de $|u|_{max}$ com o aumento $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. No entanto, os resultados de $|u|_{max}$ para o *lattice* D2V141 apresentam valores menores que o *lattice* D2Q9 na faixa de variação de ν_1 para $M_\nu = 1$. Enquanto, para variação de M_ν em $\nu_1 = 0.0067$, os resultados do *lattice* D2Q9 apresentam valores ligeiramente maiores que o *lattice* D2V141 para $M_\nu < 10^{10}$.

6.1.4 Estabilidade Numérica

Na análise de estabilidade numérica do problema foram identificadas faixas de estabilidade de ν_1 para cada valor de M_ν fixado. Em todos os valores de M_ν escolhidos foram encontrados valores de ν_1 simuláveis, *i.e.*, as simulações se tornaram estáveis tanto para razões de viscosidade tendendo ao infinito como tendendo a zero. Contudo, o tempo computacional necessário para alcançar o regime estacionário tende a aumentar com os valores de M_ν tendendo a extremos.

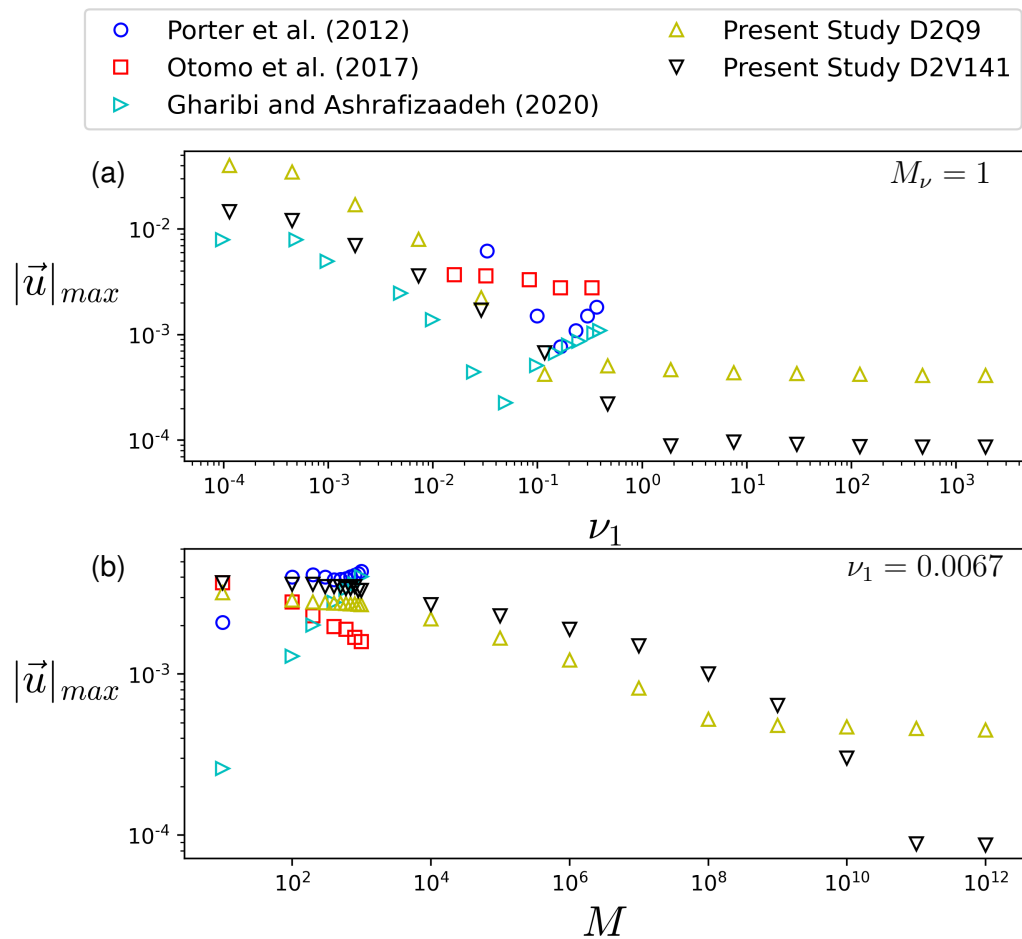


Figura 24 – Análise de correntes espúrias: valores de $|u|_{max}$ como função de (a) ν_1 para $M_\nu = 1$ e (b) M_ν para $\nu_1 = 0.0067$.

6.2 Escoamento de Poiseuille para Dois-Componentes

Para análise do presente modelo num caso dinâmico, o problema analítico de escoamento de Poiseuille para dois-componentes é numericamente simulado. A geometria do problema é caracterizada por um canal de comprimento $L = 7$ e altura $2H = 200$ com dois componentes dispostos paralelamente (Figura 26), *i.e.*, o fluido 1 ocupa uma altura a na região central e o fluido 2 em contato com as paredes ocupa as adjacências do canal. As condições de contorno são de não-deslizamento nas paredes do canal, representadas pela condição de contorno do Método II de conservação da massa proposto em Bazarin *et al.* (2021), e periodicidade são aplicadas na entrada e saída do canal. Consequente às condições de contorno de periodicidade, o escoamento é promovido pelo gradiente de pressão (Δp) que é inserido por força externa. As hipóteses do problema são de temperatura constante, forças gravitacionais nulas, ambos fluidos incompressíveis e newtonianos. As simulações são realizadas até o regime estacionário, representado pela Eq. (223) quando o erro L_2 atinge 10^{-10} .

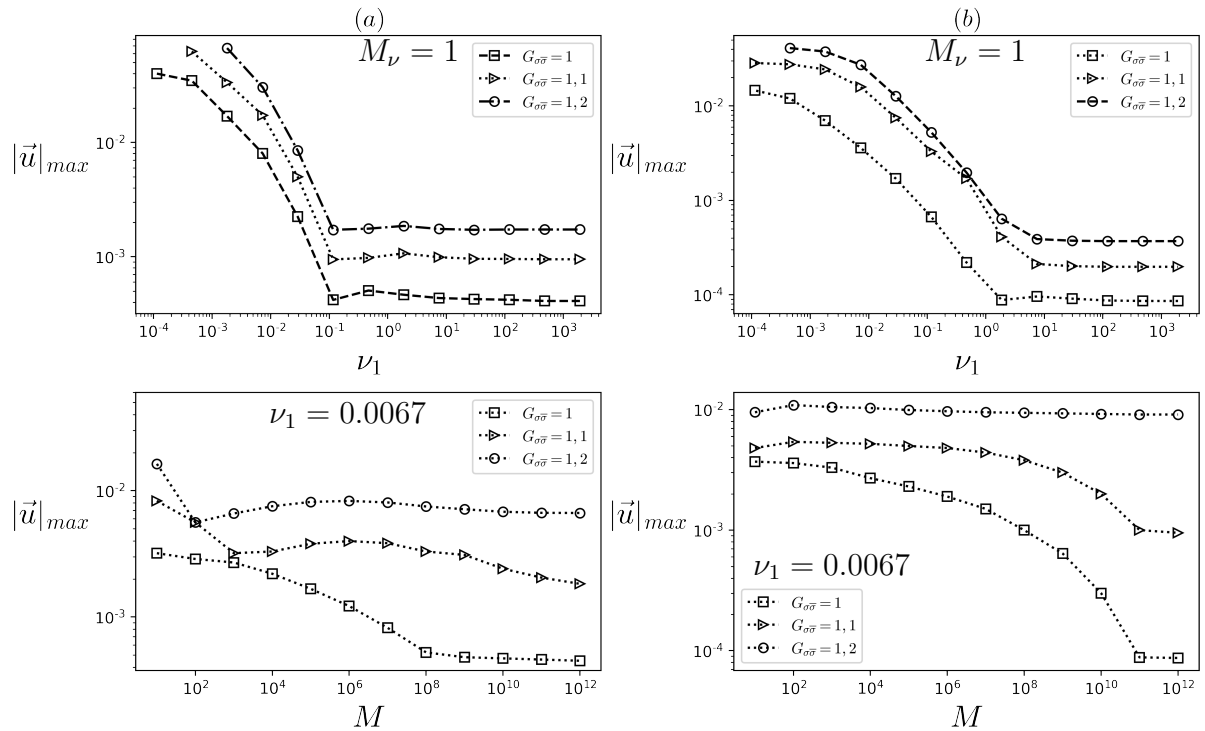


Figura 25 – Variação de correntes espúrias em função $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. Nas colunas (a) e (b) são ilustradas para os lattices D2Q9 e D2V141, respectivamente, os valores de $|u|_{max}$ para as variações de ν_1 em $M_\nu = 1$ e M_ν em $\nu_1 = 0.0067$.

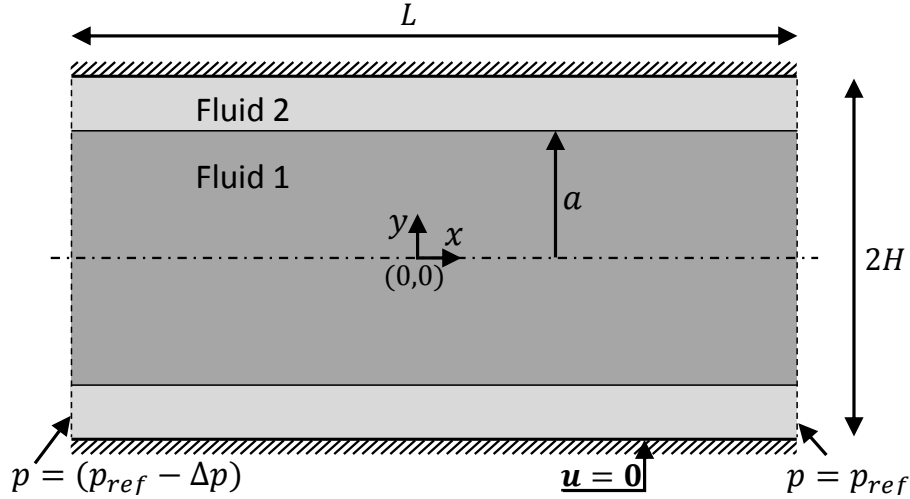


Figura 26 – Representação esquemática do escoamento de Poiseuille para dois-componentes.

Dadas as hipóteses do problema e considerando uma representação de interface singular, a solução analítica para o perfil de velocidade do escoamento é dada por:

$$u(y) = \frac{\Delta p}{2\nu_1\rho_1 L} (a^2 - y^2) + \frac{\Delta p}{2\nu_2\rho_2 L} (H^2 - a^2), \quad 0 \leq |y| \leq a \quad (226)$$

$$u(y) = \frac{\Delta p}{2\nu_2\rho_2 L} (H^2 - y^2), \quad a \leq |y| \leq H, \quad (227)$$

para detalhes da solução analítica ver Yiotis *et al.* (2007).

Considerando $\rho_1 = \rho_2 = 1$, $a = 75$ e $a_{\sigma\bar{\sigma}} = 1.2$, a Figura 27 ilustra a comparação entre os resultados numéricos e analíticos dos perfis de velocidade obtidos para (a) $M_\nu = 10^{-1}$, (b) $M_\nu = 10^1$, (c) $M_\nu = 10^{-6}$ e (d) $M_\nu = 10^6$. Os perfis de velocidade apresentados são normalizados pela velocidade máxima analítica. Nas simulações $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$ é considerado nulo com o objetivo de reduzir o espaçamento da interface de transição entre os componentes. Nestes casos, a viscosidade do fluido 1 para $M_\nu > 1$ e $M_\nu < 1$ foram fixadas em $\nu_1 = 909,42$ e $\nu_1 = 0,018188$, respectivamente.

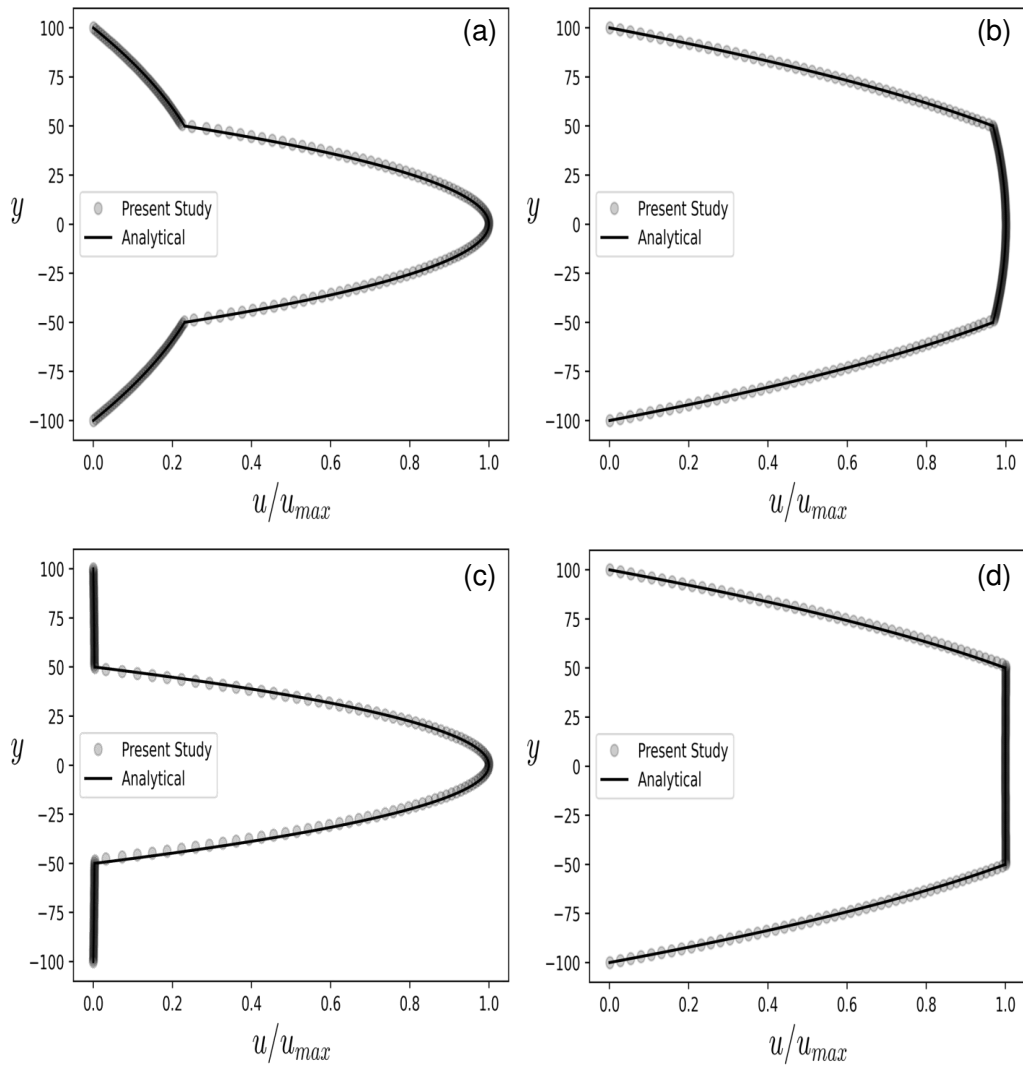


Figura 27 – Comparações entre os perfis de velocidade numérico (pontos) e analítico (linha): (a) 10^{-1} , (b) 10^1 , (c) 10^{-6} , (d) 10^6 . As velocidades plotadas são normalizadas pela velocidade analítica máxima u_{max} .

Variando a altura a para $a_{\sigma\bar{\sigma}} = 1.2$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}} = 0.0$, os resultados numéricos e analíticos de permeabilidade relativa ($k_{r\sigma}$) em função da saturação do fluido 2 (S_2) são ilustrados na Figura 28 (a) para $M_\nu > 0$ e (b) para $M_\nu < 0$, em $a/H = 0,9; 0,75; 0,5; 0,33; 0,2$ e razão de viscosidade na faixa de $10^{-5} \leq M_\nu \leq 10^5$. As soluções analíticas para permeabilidade relativa são dadas

por

$$k_{r1} = (1 - S_2) \left(\frac{3}{2} M_\nu + (1 - S_2)^2 \left(1 - \frac{2}{3} M_\nu \right) \right), \quad (228)$$

$$k_{r2} = \frac{1}{2} S_2^2 (3 - S_2), \quad (229)$$

onde $S_2 = 1 - a/H$ é saturação do fluido 2, para detalhes da solução analítica ver Yiotis *et al.* (2007).

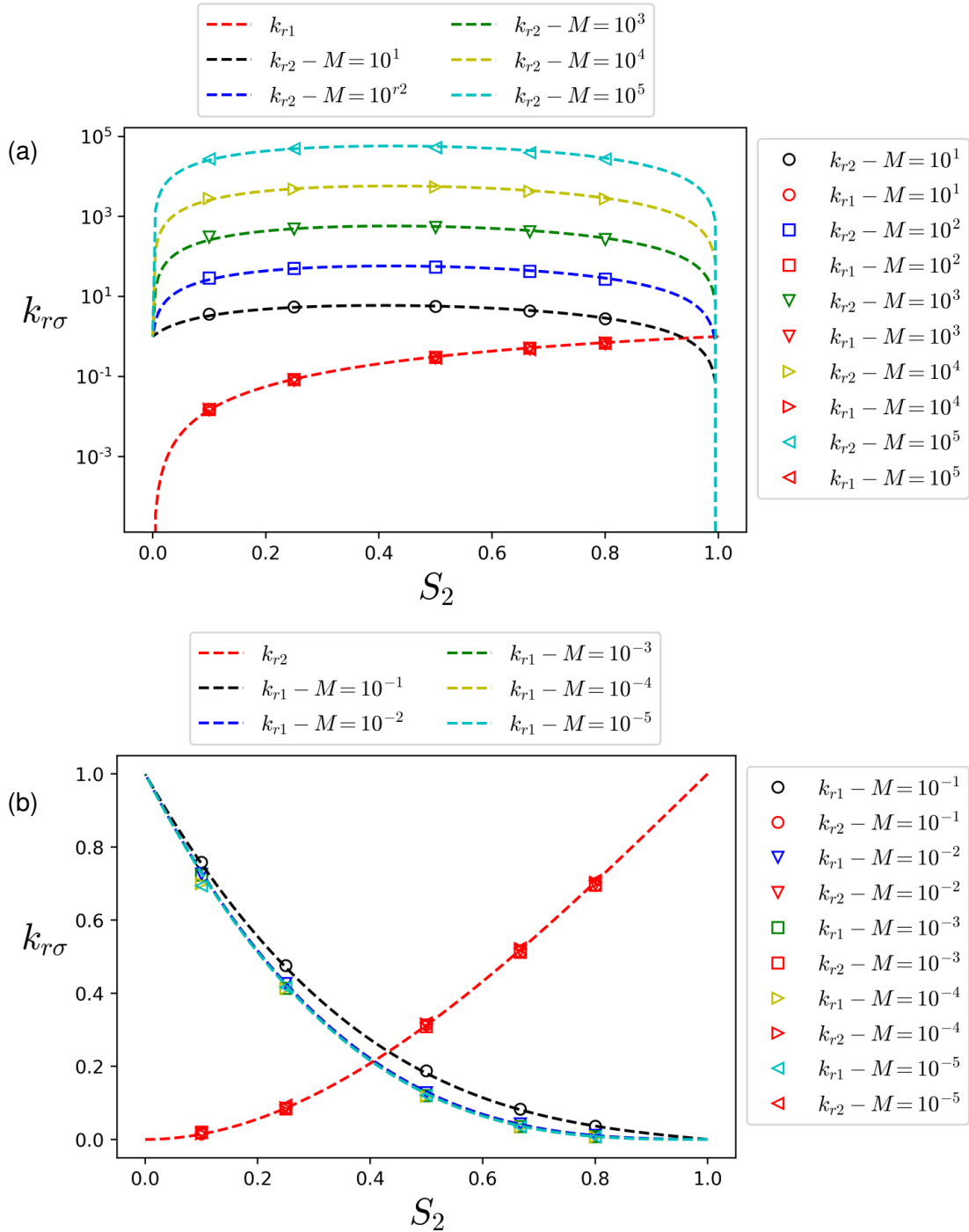


Figura 28 – Comparação entre os resultados de permeabilidade relativa (k_{rp}) analíticos e numéricos para (a) $M_\nu > 10^0$ e (b) $M_\nu < 10^0$.

Tabela 5 – Erros de permeabilidade relativa: comparação com Porter *et al.* (2012).

M_ν	RMSE				MRPE%			
	k_{r1}		k_{r2}		k_{r1}		k_{r2}	
	P.W.	PORTER <i>et al.</i>	P.W.	PORTER <i>et al.</i>	P.W.	PORTER <i>et al.</i>	P.W.	PORTER <i>et al.</i>
10^{-5}	0.015	-	0.011	-	10.679	-	10.97	-
10^{-4}	0.014	-	0.002	-	9.224	-	10.34	-
10^{-3}	0.005	-	0.005	-	6.459	-	9.44	-
10^{-2}	0.002	0.002	0.003	0.017	4.779	6.6	8.965	5.4
10^{-1}	0.004	0.010	0.004	0.013	1.903	3.7	3.448	5.1
10^1	0.166	0.086	0.007	0.008	2.482	4.4	5.512	3.9
10^2	1.161	1.73	0.009	0.012	4.693	6.6	3.443	4.8
10^3	30.45	-	0.017	-	7.863	-	5.277	-
10^4	125.2	-	0.022	-	8.301	-	5.324	-
10^5	2753.2	-	0.043	-	9.234	-	9.854	-

Os erros entre os resultados analíticos e numéricos para os valores de permeabilidade relativa são destacados na Tabela 5. Os erros de raiz-quadrada média (root-mean-squared) e percentagem relativa máxima são calculados e comparados com Porter *et al.* (2012). Os resultados demonstram uma tendência de aumento dos erros com o aumento de M_ν para $M_\nu > 10^0$ e com a diminuição de M_ν para $M_\nu < 10^0$. Contudo, os erros observados apresentam valores similares aos erros obtidos por Porter *et al.* (2012), tendo o erro de percentagem relativa máxima variações na faixa de 3 até 11%.

Análogo a análise estabilidade do problemas de bolha estática, nenhum valor de M_ν teve uma faixa de ν_1 não simulável. Consequentemente, sendo possível simular valores de M_ν tendendo aos extremos de infinito e zero. Contudo, para valores fixos de malha e passo tempo (δ_t), a precisão numérica cai com o aumento da razão de viscosidade tendendo aos extremos, sendo necessários refinamentos de malha e passo de tempo para manter a precisão das análises.

6.3 Deslocamento Fluido-Fluido

O último caso de verificação é o problema transiente de deslocamento fluido-fluido num canal, onde padrões de formação *fingering* podem ser analisados de acordo com os parâmetros de razão de viscosidade e número de capilaridade. O problema é caracterizado pela injeção de um fluido que desloca outro fluido inicialmente presente num canal de comprimento L e altura H . A Figura 29 ilustra as condições iniciais e de contorno do problema. Inicialmente, o fluido 2 preenche uma região retangular de $L_2 \times H$ na entrada do canal, enquanto o fluido 1 preenche a região restante de $L_1 \times H$, tendo ambos fluidos um campo velocidade nula. Na entrada e saída do canal a condição de contorno de perfil de velocidade desenvolvido (perfil parabólico) é aplicada, e nas paredes superior e inferior são consideradas condições de não-deslizamento, sendo em ambos os casos utilizado o Método II de conservação da massa proposto em Bazarin *et al.* (2021) para a representação das condições de contorno. Ademais, são assumidas as hi-

póteses de temperatura constante, forças gravitacionais nulas e ambos fluidos incompressíveis e newtonianos, para a representação deste problema.

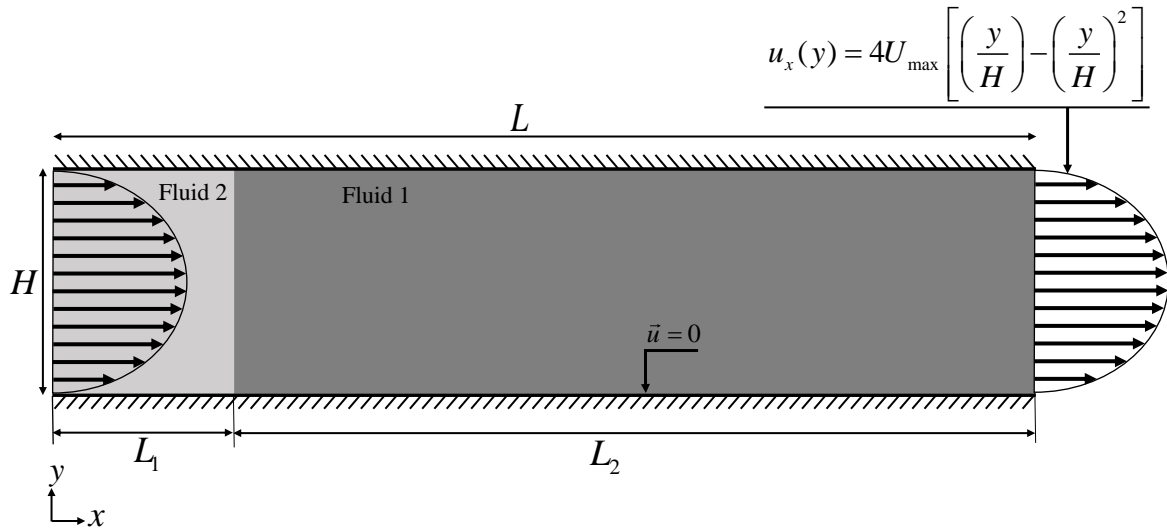


Figura 29 – Deslocamento fluido-fluido: geometria, condições iniciais e de contorno.

Nas simulações, os valores de H , L_1 e L_2 são 100, 10 e 590, respectivamente, e os parâmetros $a_{\sigma\bar{\sigma}} = 1.2$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}} = 0.85$ escolhidos correspondem a $\gamma = 0,255$. Na Figura 30 observam-se os resultados obtidos para $M_\nu = 10^4$ com diferentes valores do número de capilaridade, definido por

$$Ca = \frac{U_{\max}\nu_1}{\gamma}, \quad (230)$$

onde U_{\max} é velocidade máxima do perfil parábólico. Os padrões de *finger* foram obtidos para $\nu_1 = 1.25 \times 10^{-4}$ nos valores de $Ca = 0,6; 1,1; 1,6; 2,1$. Os contornos plotados são descritos pelo número de Atwood, dado por $(\rho_1 - \rho_2)/(\rho_1 + \rho_2)$, no ponto onde o *finger* atinge o comprimento de 550 do canal.

Analisando os padrões apresentados na Figura 30, as espessuras de *fingers* simulados são medidas e comparadas com a correlação proposta por Halpern e GaverIII (1994), dada por

$$\frac{a_f}{H} = 1 - 4.17(1 - e^{-1.69Ca^{0.5025}}), \quad (231)$$

onde a espessura do *finger* (a_f) é normalizada pela altura do canal e representada por uma função do número de capilaridade. Na Figura 31 ilustram-se as comparações, notando-se uma excelente proximidade entre os resultados numéricos e a correlação, para $M_\nu = 10^1, 10^2, 10^3$ e 10^4 , com erros de barra na ordem ± 4 unidades de *lattice*, sendo este erro correspondente a espessura da interface de transição entre fluido-fluido.

Embora instabilidades na variação de M_ν não tenham sido observadas nos problemas anteriores, no presente caso ocorrem instabilidades na simulação de escoamentos com $M_\nu \geq 10^5$ para $Ca > 0,1$. Nesta faixa de instabilidade, observou-se na evolução do escoamento a presença altas magnitudes de correntes espúrias em relação a velocidade de referên-

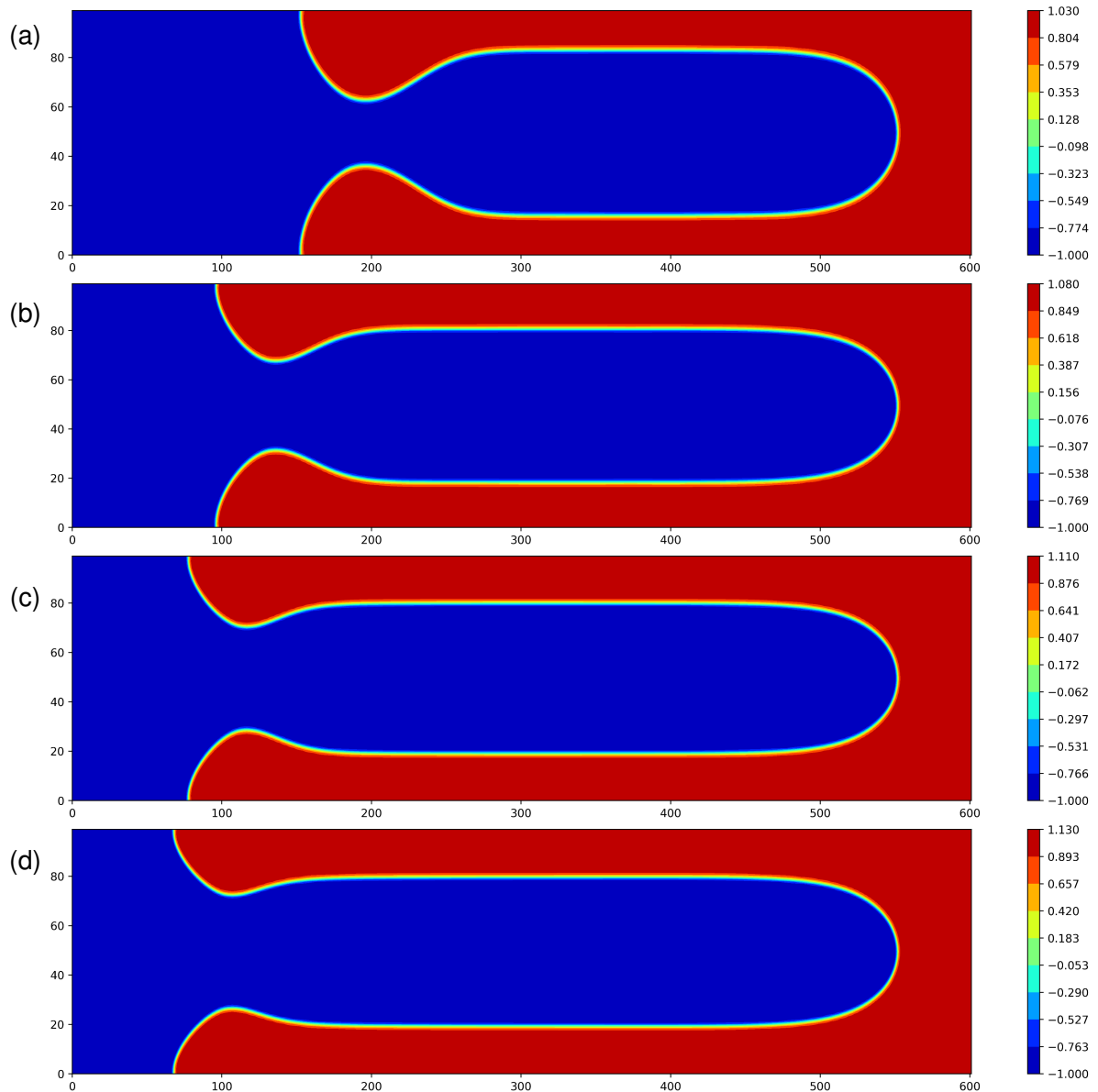


Figura 30 – Número de Atwood dos padrões *finger* obtidos para $M_v = 10^4$ e (a) $Ca = 0.6$, (b) $Ca = 1.1$, (c) $Ca = 1.6$, e (d) $Ca = 2.1$.

cia do escoamento, assim como efeitos de aumento de massa do sistema até o ponto em que simulação diverge. Entretanto, na comparação dos presentes resultados com os resultados de Otomo *et al.* (2018) para a mesma formulação de problema, destaca-se o aumento da capacidade representação dos valores de razão de viscosidade, sendo atingido valores na ordem de 10^2 por Otomo *et al.* (2018) e 10^4 pelo presente modelo.

6.4 Considerações

Em geral, uma excelente aplicabilidade do modelo foi observada para variação da razão de viscosidade nos problemas multicomponentes analisados. No problema de bolha estática obteve-se uma correta representação e um refinamento do controle da tensão interfacial pela

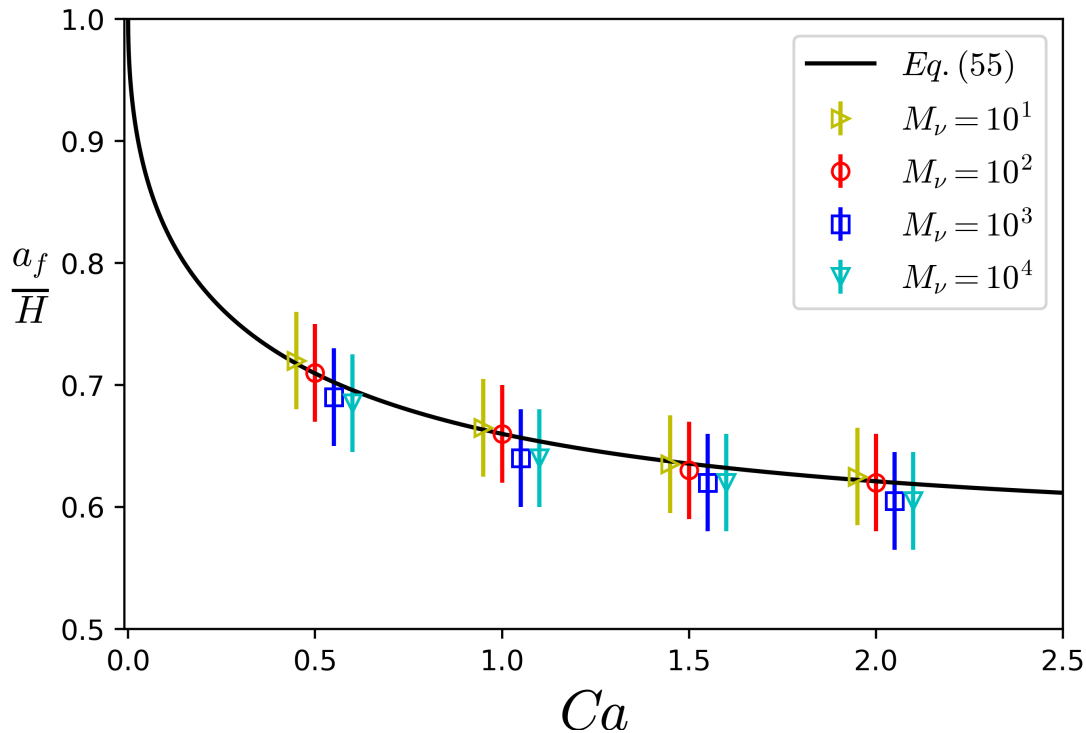


Figura 31 – Espessura de *finger* normalizada (a_f/H) em função do número de capilaridade (Ca): comparação da Eq.(231) em diferentes valores de razão de viscosidade.

utilização dos parâmetros $a_{\sigma\bar{\sigma}} = e \kappa_{\sigma\bar{\sigma}}$, assim validando o modelo de força proposto e a utilização de *lattices* com diferentes ordens em sua discretização. Adicionalmente, observou-se magnitudes máximas de correntes espúrias variando na faixa de 10^{-2} até 10^{-5} nos campos de velocidade, sendo esta faixa similar aos resultados apresentados por Porter *et al.* (2012) e Gharibi e Ashrafizaadeh (2020). No caso dinâmico de escoamento de Poiseuille para dois-componentes, o acoplamento viscoso entre os fluidos (representado pela Eq. 206) foi validado com excelente precisão numérica nos perfis de velocidade e nos valores de permeabilidade relativa, ambos para altas faixas razões de viscosidade. Em ambos os problemas de bolha estática e escoamento de Poiseuille para dois-componentes foram observadas faixas de estabilidade numérica para valores de razão de viscosidade tendendo ao infinito e a zero. Por fim, no problema transitório de deslocamento fluido-fluido observou-se estabilidade numérica para razão de viscosidade na ordem de 10^4 , e boa concordância com os padrões de *fingers* previstos pela correlação de Halpern e GaverIII (1994).

Enfim, na comparação com demais modelos multicomponentes da literatura, em específico os de Ginzburg (2007), Porter *et al.* (2012), Liu *et al.* (2016b), Otomo *et al.* (2018) e Gharibi e Ashrafizaadeh (2020), o presente modelo demonstrou faixas de estabilidade para razão de viscosidade significativamente maiores, mantendo a precisão numérica e um bom controle das magnitudes de correntes espúrias.

7 DESLOCAMENTO FLUIDO-FLUIDO EM MEIO POROSO

No presente Capítulo são desenvolvidas as simulações numéricas para o problema de deslocamento de fluido-fluido em meio poroso, tendo como objetivo verificar as capacidades de representação do presente modelo multicomponente nos casos com altas razões de viscosidades. Inicialmente, o problema é formulado, sendo apresentando suas hipóteses de simplificação dimensional e geométrica para determinação da geometria porosa utilizada, assim como suas condições iniciais e de contorno. Em sequência, abordam-se características específicas da implementação *lattice* Boltzmann referentes à representação do presente problema. Na seção de resultados são conduzidos testes de malha e de estabilidade numérica para a definição das faixas simuláveis de razão de viscosidade e de número de capilaridade. Com base nas faixas definidas, na sequência são simulados os diferentes estados de deslocamento que caracterizam o problema. Por fim, são feitas considerações do presente modelo com base nos resultados observados.

7.1 Geometria do Meio Poroso

Devido aos altos custos computacionais de simulações que envolvem imagens reais de meios porosos obtidos por microtomografia, o presente trabalho opta pela utilização de um meio poroso simplificado, sendo este idealizado para um arranjo de círculos padronizados num meio bidimensional. A Figura 32 ilustra o processo de simplificação dimensional e geométrica de uma imagem de rocha porosa de reservatório para um arranjo de círculos padronizados. Tais simplificações, tanto dimensionais como geométricas, reduzem exponencialmente os custos computacionais necessários para as simulações, tornando-as viáveis dentro dos recursos disponíveis.

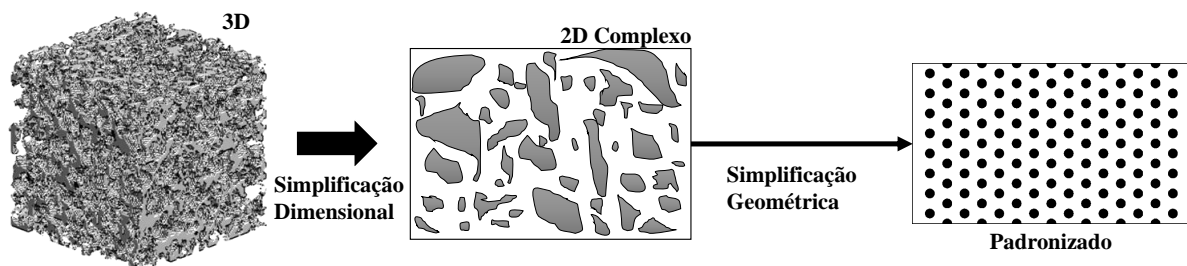


Figura 32 – Simplificações geométricas e dimensionais de representação do meio poroso.

Na representação geométrica do meio poroso de círculos padronizados (Figura 33), o valor de porosidade do meio é fixado em aproximadamente 0,82, *i.e.*, $\phi = 0,82$, sendo a porosidade definida por

$$\phi = 1 - \frac{V_s}{V_T}, \quad (232)$$

onde V_s é volume de sólido e V_T o volume total.

O meio poroso é formulado por um domínio de altura H e comprimento $L = \sqrt{3}H$, preenchido por círculos sólidos num padrão escalado com diâmetro de poro $\delta_p = H/(2N_c)$ e diâmetro de círculo $d_s = H/(2N_c)$, sendo N_c o número de círculos sólidos por coluna. Na entrada e saída do domínio poroso são mantidos espaços de comprimento $L_{entrada} = L_{saida} = L/(4N_c)$. Na Figura 33 é ilustrado um meio poroso com $N_c = 2$, onde devido às características de malha regular do método *lattice* Boltzmann a representação dos círculos sólidos é dada por uma aproximação em escadaria, como ilustrado na Figura 33 c). Para as análises conduzidas neste capítulo, N_c é considerado igual a 2 com o objetivo de reduzir os custos computacionais de simulação.

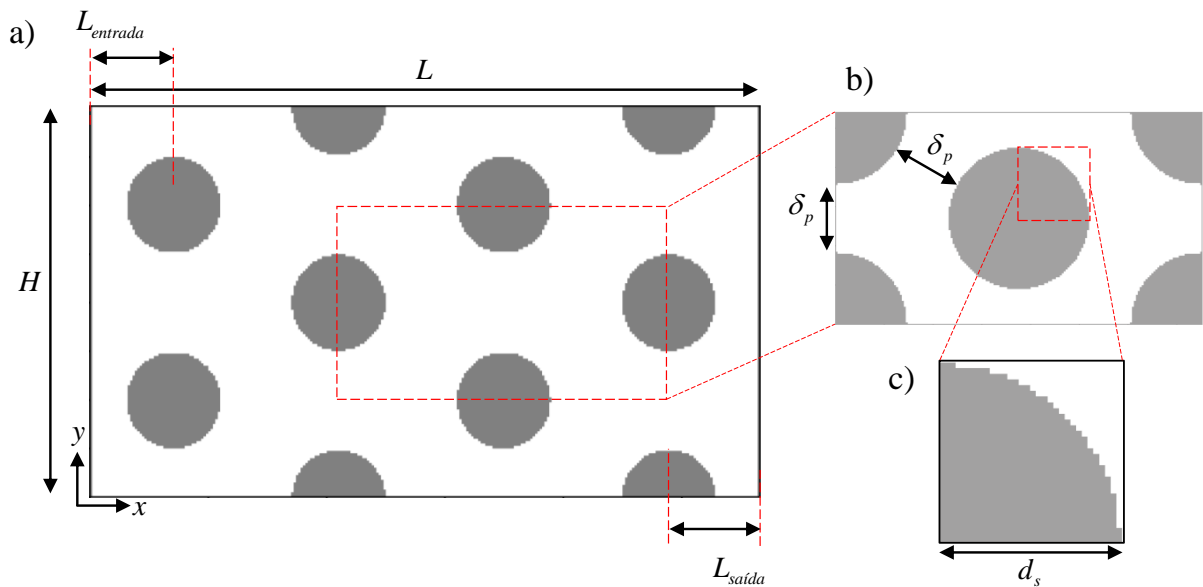


Figura 33 – Geometria porosa em padrão escalado: a) meio poroso completo; b) volume elementar representativo do padrão escalado; c) aproximação em escadaria.

Com as características geométricas do problema definidas, as condições de simulação no instante inicial de $t = 0$ são estipuladas em campo de velocidade nulo para ambos fluidos, onde o fluido injetado preenche a área de entrada $H \times (L/(4N_c) - 2d_s/3)$, e o fluido deslocado a área restante do domínio. Condições de contorno de periodicidade são consideradas nas camadas superior e inferior, enquanto na entrada (camada oeste) e saída (camada leste) do domínio são considerados perfis de velocidade constante. Nas superfícies dos sólidos condições de contorno de não deslizamento são impostas. A Figura 34 ilustra o estado inicial e as condições de contorno do problema.

7.2 Implementação *lattice* Boltzmann

Na representação da interação fluido-fluido a implementação do presente modelo LB segue a abordagem descrita na Seção 4.3.7, contudo, as interações fluido-fluido-sólido necessitam de tratamentos específicos no presente problema. Assim, na presente análise o efeito de

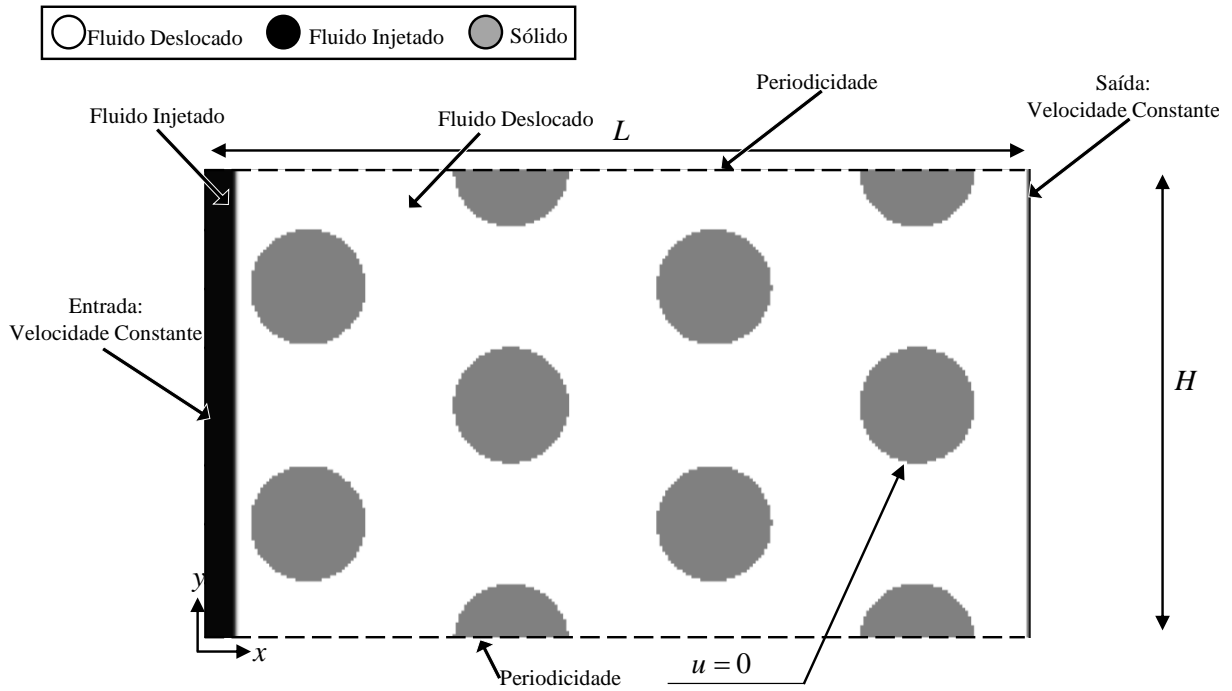


Figura 34 – Condições iniciais e de contorno no processo de deslocamento fluido-fluido em meio poroso.

molhabilidade é considerado neutro, *i.e.*, não existem forças de atração ou repulsão entre os fluidos e a superfície sólida. Adicionalmente, as forças da interação fluido-fluido (descrita pela Eq. 207) são consideradas nulas em pontos adjacentes às superfícies dos sólidos, sendo que esta consideração tem como objetivo suprimir as influências do efeito de escadaria no refino de malha do problema.

Para a representação dos termos derivativos presentes na Eq. (207) é utilizado o *lattice* D2Q9 com valores de $a_{\sigma\bar{\sigma}} = 1.2$ e $\kappa_{\sigma\bar{\sigma}} = 0.2$, os quais correspondem a $\gamma = 0,0725$. Adicionalmente, as densidades iniciais de cada fluido são definidas em $\rho^{(p)} = 1$.

Seguindo a representação das condições de contorno descritas na Figura 34, na modelagem LB são utilizadas condições de *halfway-bounce-back* tanto para as condições de velocidade constante na entrada e saída do domínio, assim como para a representação do não deslizamento na superfície dos blocos sólidos. As condições de contorno de *halfway-bounce-back* para as camadas do domínio multicomponente são representadas por

$$f_i^{(p)}(\mathbf{x}_b, t + \delta) = f_i^{(p)}(\mathbf{x}_b, t) - 2W_i\rho_f^{(p)}\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_b}{c_s^2} \quad (233)$$

onde \mathbf{u}_b é a velocidade imposta na camada e $\rho_f^{(p)}$ é densidade calculada no ponto fluido adjacente à camada. Nas camadas superior e inferior aplicam-se as condições de contorno de periodicidade, onde as funções distribuição transmitidas para fora da camada inferior são transmitidas para camada superior e o mesmo processo inverso da camada superior para a inferior (KRÜGER *et al.*, 2017).

Ressalta-se que as simulações do processo de deslocamento necessitam ser paradas antes que a interface de interação entre os fluidos atinja camada de saída das condições de contorno. Visto que, as condições de contorno utilizadas não estão aptas para representar corretamente o esquema de forças de interação entre os fluidos nestes pontos.

7.3 Resultados

Nos resultados são performados testes malha e de análise de estabilidade numérica de modo a determinar as faixas simuláveis no diagrama de estados proposto por Lenormand, Touboul e Zarcone (1988). Em sequência, com as faixas de estabilidade determinadas e a malha de referência definida, são realizadas simulações com o objetivo representar as transições entre os diferentes tipos de estados de deslocamento. Sendo, na presente seção, os parâmetros de número de capilaridade e razão de viscosidade definidos por

$$Ca = \frac{U_c \nu_i}{\gamma} \quad \text{e} \quad M_\nu = \frac{\nu_i}{\nu_d} \quad (234)$$

onde U_c é a velocidade constante imposta nas condições de contorno de entrada e saída, e os subscrito i e d indicam os fluidos injetado e deslocado, respectivamente.

7.3.1 Teste de Malha

No teste de malha da presente problemática, escolheu-se o caso crítico de $M_\nu = 10^{-3}$ e $Ca = 10^{-3}$, e refinamos a malha analisando a convergência do campo de densidade representado pelo número de Atwood (At):

$$At(x,y) = \frac{\rho_i(x,y) - \rho_d(x,y)}{\rho_i(x,y) + \rho_d(x,y)}. \quad (235)$$

Na quantificação da convergência de malha, o erro médio (E_{med}) é aplicado no campo de At pela equação

$$E_{med} = \frac{\sum_{x,y} \left(\frac{At(x,t) - At_{ref}(x,t)}{At_{ref}(x,t)} \right)}{N_x N_y} \times 100\% \quad (236)$$

onde At_{ref} representa o pontos da malha de referência, e N_x e N_y o número de pontos da malha de referência na direção x e y , respectivamente.

Devido à utilização de condições de contorno de periodicidade no problema, quando dobra-se o número de elementos numa malha não ocorre a intersecção de pontos na sua comparação, sendo necessário triplicar o número de elementos de malha para que tal intersecção ocorra (como ilustrado na Figura 13 para o problema de instabilidade de Kelvin-Helmholtz).

Deste modo, quando dobra-se a malha bidimensional, tira-se a média de At nos 4 elementos de malha que representam o mesmo ponto na malha mais grosseira. Na Figura 35 é ilustrada tal relação, onde utiliza-se como referência o ponto da malha mais grosseira e tira-se a média dos pontos respectivos àquela posição na malha mais refinada.

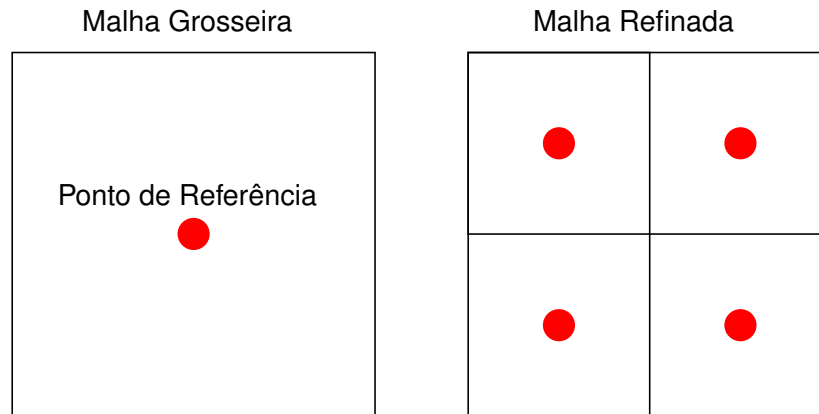


Figura 35 – Esquema de comparação entre malhas no cálculo do E_{med} . Os pontos vermelhos representam os centros dos elementos de malhas.

Dado o caso crítico escolhido de $M_\nu = 10^{-3}$ e $Ca = 10^{-3}$, as simulações foram conduzidas para as malhas de 80×138 , 160×276 e 320×552 , sendo fixada a velocidade constante em $U_c = 0,01$ e a viscosidade do fluido injetado igual a $\nu_i = 0,00725$. No cálculo do E_{med} compara-se as malhas no tempo escoamento $t = 0,9 \times L/U_{med}$, obtendo-se na comparação 1 (*i.e.*, entre 80×138 e 160×276) e na comparação 2 (*i.e.*, entre 160×284 e 320×552) valores de $E_{med} = 9\%$ e $E_{med} = 4\%$, respectivamente. Dado E_{med} menor que 5% na comparação 2, considera-se a malha de 160×276 como referência para a simulação dos demais casos nesta seção de resultados.

Na Figura 36 são ilustrados através do número de Atwood os resultados obtidos para o campo de densidades do escoamento, onde as fileiras a) e b) representam os deslocamentos nos pontos em que fluido injetado (ilustrado na cor azul) atinge os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente, ambos para cada coluna da malha especificada.

7.3.2 Estabilidade Numérica

Analisando a estabilidade numérica do modelo proposto para a representação do problema definido, varia-se os parâmetros de Ca e M_ν , considerando estável o escoamento se fluido injetado alcançar o comprimento do domínio de $L - L/16$ sem que a simulação divirja numericamente, *i.e.*, sem que nenhuma das variáveis no campo de densidade e velocidade dos componentes tendam ao infinito.

Simulações foram realizadas para a malha de 160×284 considerando as velocidades $U_c = 0,01$; $0,0025$ e $0,0005$. Na Figura 37 ilustra-se os resultados obtidos para as faixas de estabilidade no diagrama de estados propostos por Lenormand, Touboul e Zarccone (1988),

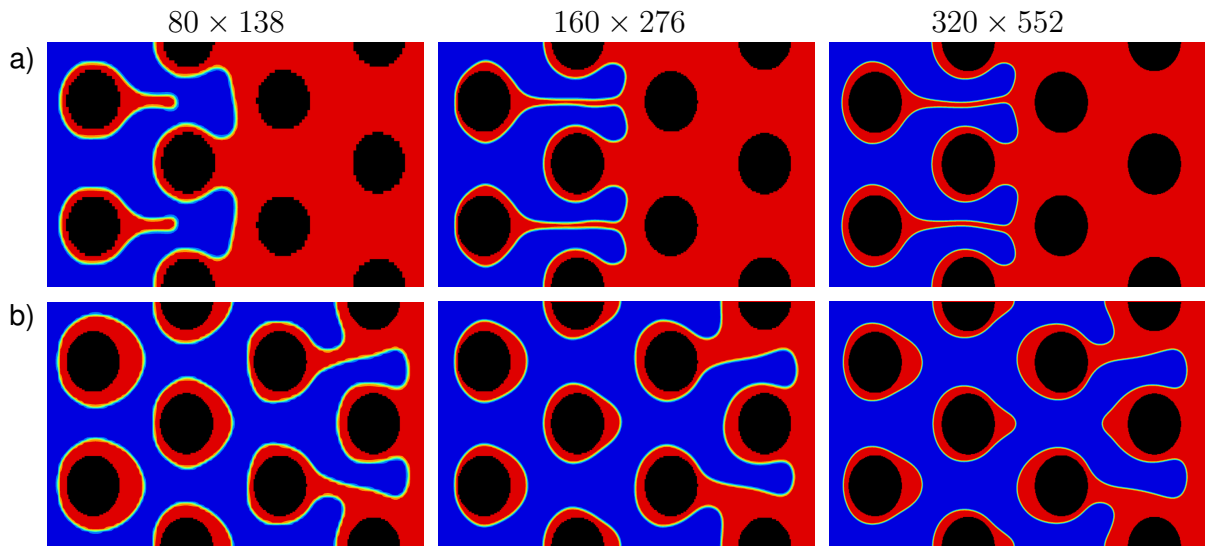


Figura 36 – Comparação das malhas 80×138 , 160×276 e 320×552 , de simulação do caso crítico $M_v = 10^{-3}$ e $Ca = 10^{-3}$. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente

destacando em azul os pontos simuláveis (estáveis) e em vermelho os pontos não-simuláveis (não estáveis). Sendo que, para ambas as velocidades testadas, observou-se faixas similares de estabilidade nas ordens de M_v e Ca , que conseqüentemente, resultam numa não influência da velocidade nas estabilidades do modelo. Nos pontos de instabilidade, notam-se tendências de diminuição da faixa simulável do número de capilaridade com os valores de M_v tendendo aos extremos de infinito e zero. Adicionalmente, com base nas linhas tracejadas e pontilhadas da Figura 37, que ilustram as tendências dos estados de deslocamento, as faixas de instabilidade observadas afetam, principalmente, a representação do presente modelo para os estados de *viscous fingering* e de deslocamento estável.

Em suma, no presente modelo para o respectivo meio poroso definido, demonstrou-se uma estabilidade numérica de aproximadamente 70% dos casos nas faixas de $10^{-6} \leq M_v \leq 10^6$ e de $10^0 \leq Ca \leq 10^{-10}$. Contudo, ressalta-se que a faixa de estabilidade observada pode ser aumentada pela utilização de malhas mais refinadas, assim como pode ser diminuída pela representação de um meio poroso com valores menores de porosidade e de diâmetros de poro nos padrões do meio idealizado definido.

Com base nas faixas de estabilidade observadas na Figura 37, na Tabela 6 são apresentados os valores escolhidos de Ca e M_v para a simulação dos processos de transição entre os estados de deslocamento de *viscous fingering*-deslocamento estável, deslocamento estável-*capillary fingering*, e *capillary fingering*-*viscous fingering*.

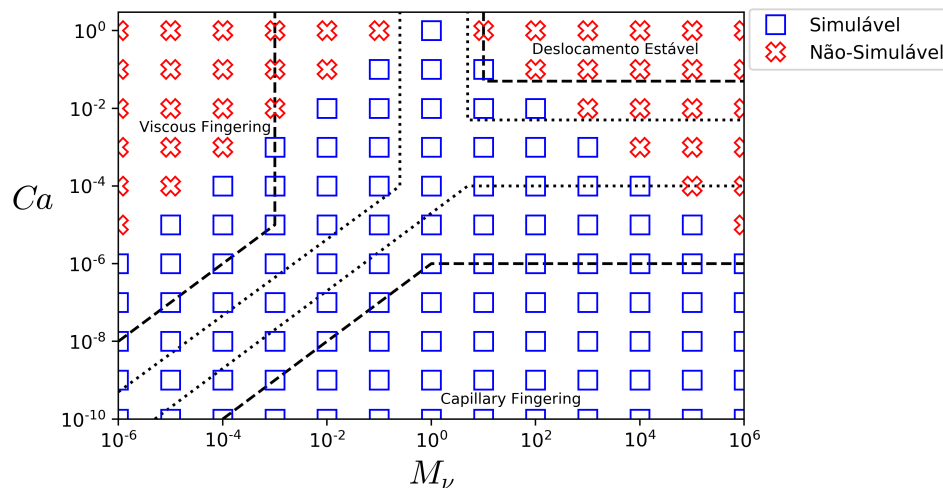


Figura 37 – Faixa de estabilidade numérica de Ca e M_v para a malha de 160×284 . Considerando as faixas de análise para $10^{-6} \leq M_v \leq 10^6$ e de $10^0 \leq Ca \leq 10^{-10}$. As linhas tracejadas e pontilhadas circundam as zonas de tendência de cada estado de deslocamento

Tabela 6 – Valores estimados de análise do número de capilaridade e razão de viscosidade, para o processo de transição entre diferentes estados de deslocamento.

Parâmetros	Valores Analisados
<i>Viscous Fingering</i> - Deslocamento Estável	
Razão de Viscosidade (M_v)	10^{-3} , 10^0 e 10^3
Número de Capilaridade (Ca)	10^{-3}
Deslocamento Estável- <i>Capillary Fingering</i>	
Razão de Viscosidade (M_v)	10^3
Número de Capilaridade (Ca)	10^{-3} , 10^{-4} e 10^{-5}
<i>Capillary Fingering</i> - <i>Viscous Fingering</i>	
Razão de Viscosidade (M_v)	10^{-4} , 10^0 e 10^3
Número de Capilaridade (Ca)	10^{-5}

7.3.3 *Viscous Fingering* - Deslocamento Estável

Na representação da transição entre os estados de *viscous fingering* e de deslocamento estável, foram simulados para $Ca = 10^{-3}$ os casos de $M_v = 10^{-3}$, 10^0 e 10^3 , sendo fixada a velocidade constante em $U_c = 0,01$ e a viscosidade do fluido injetado em $\nu_i = 0,00725$. Na Figura 38 são ilustrados através do número de Atwood os resultados obtidos para o campo de densidades do escoamento.

Os padrões de estados de deslocamento observados na Figura 38 representam adequadamente os casos de *viscous fingering* e deslocamento estável. No caso $M_v = 10^{-3}$ observa-se em a) a formação inicial de dois *fingers* que atravessam um mesmo poro na direção do escoamento, tendo estes *fingers* espessuras de ordem menor que $\delta_p/2$. Adicionalmente, tanto na Figura 38 a) e b) para $M_v = 10^{-3}$, notam-se formações aproximadamente simétricas de evolução dos *fingers* no decorrer do deslocamento. Assim, nota-se a capacidade de representação do presente modelo para as instabilidades do deslocamento que resultam nas formações dos *fingers* característicos do estado de *viscous fingering*.

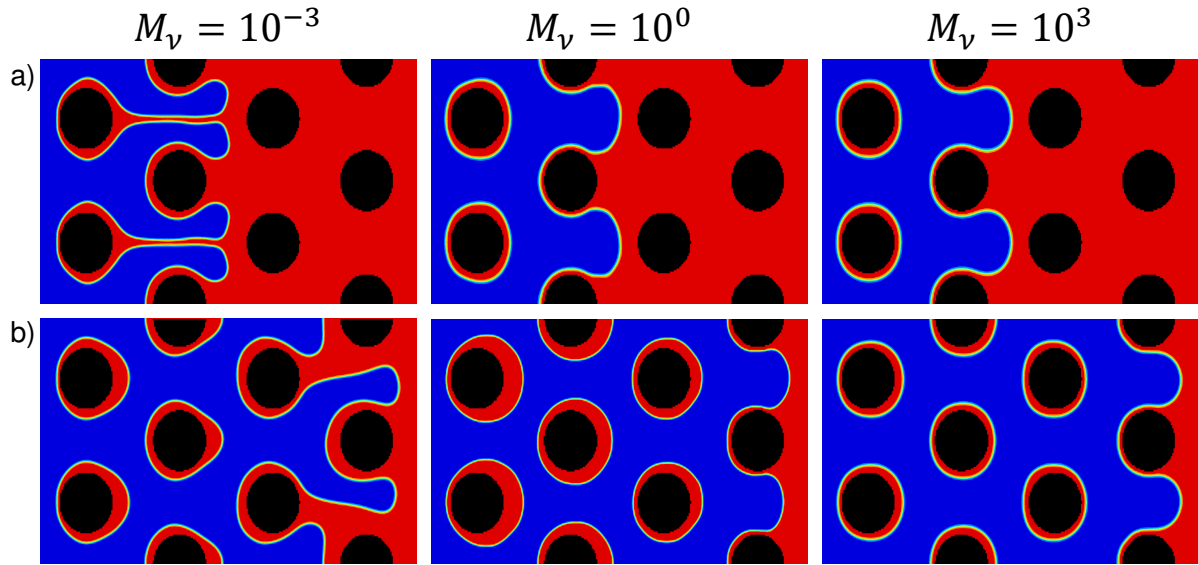


Figura 38 – Transição do estado de *viscous fingering* para deslocamento estável. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente

Nos casos de $M_v = 10^0$ e $M_v = 10^3$ padrões similares de deslocamento foram observados, onde em ambos ocorrem uma frente estável de deslocamento com um único *finger* de espessura da ordem de δ_p atravessando o poro. Na comparação dos casos $M_v = 10^0$ e $M_v = 10^3$, notam-se bolhas maiores de fluido não deslocado ao redor dos blocos sólidos em $M_v = 10^0$. Na classificação dos estados de deslocamento, ambos os casos apresentam características do estado de deslocamento estável.

7.3.4 Deslocamento Estável - *Capillary Fingering*

Na transição entre os estados de deslocamento estável e de *capillary fingering*, foram simulados para $M_v = 10^3$ os casos de $Ca = 10^{-3}$, 10^{-4} e 10^{-5} , sendo fixada a velocidade constante em $U_c = 0,01$ e variada a viscosidade do fluido injetado em $\nu_i = 0,00725$, $0,000725$ e $0,0000725$ para os casos de $Ca = 10^{-3}$, 10^{-4} e 10^{-5} , respectivamente. Na Figura 39 são ilustrados através do número de Atwood os resultados obtidos para o campo de densidade de cada escoamento.

Entre os padrões de deslocamento observados na Figura 39, o caso $Ca = 10^{-3}$ que representa um processo deslocamento estável já foi analisado na subseção anterior. Nos demais casos de $Ca = 10^{-4}$ e $Ca = 10^{-5}$, observam-se em ambos a representação de *fingers* da espessura do poro que avançam tanto na direção do escoamento como em direções perpendiculares, *i.e.*, os *fingers* apresentam um comportamento de avanço em direções aleatórias. Contudo, para $Ca = 10^{-4}$ observa-se uma frente mais estável no avanço dos *fingers* aleató-

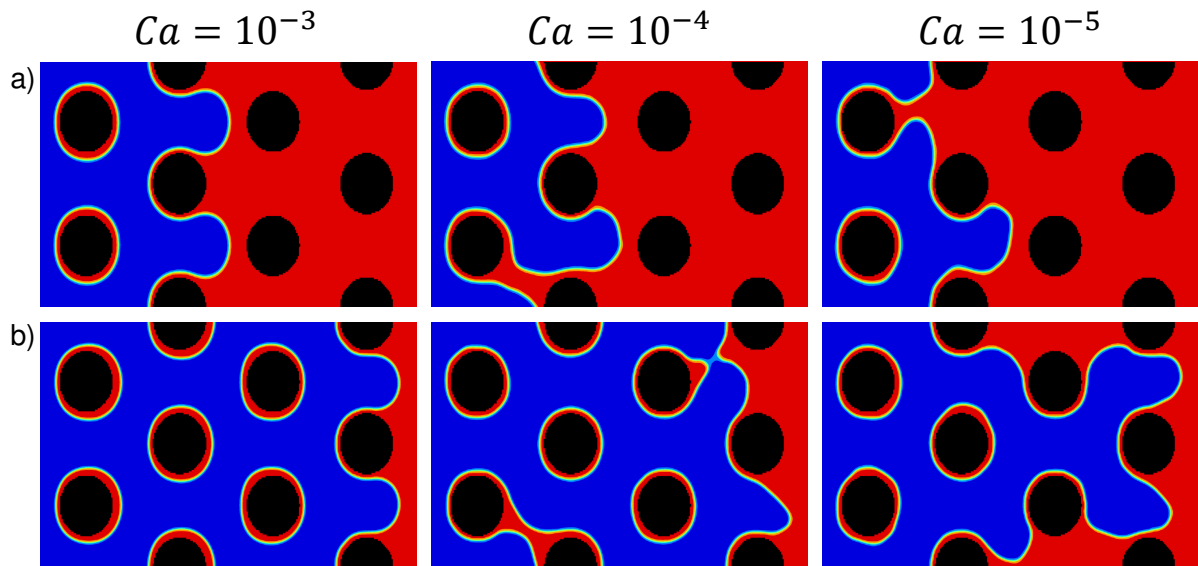


Figura 39 – Transição do estado de deslocamento estável para *capillary fingering*. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente

rios, enquanto para $Ca = 10^{-5}$ o *fingers* aleatório apresenta uma maior tendência de avanço na direção do escoamento.

Estes comportamentos nos avanços dos *fingers*, observados nos casos de $Ca = 10^{-4}$ e $Ca = 10^{-5}$, são corroborados pelos resultados experimentais de Zhang *et al.* (2011). Resultados experimentais que são caracterizados pela injeção de fluido não-molhante num micro-modelo poroso de círculos padronizados escalados (similar ao presente domínio poroso), que se encontra saturado por um fluido molhante. Na Figura 40 b) são ilustrados os resultados experimentais obtidos por Zhang *et al.* (2011) para $M_v = 10^{1.88}$ em $Ca = 10^{-2.69}$, 10^{-4} e $10^{-4.57}$, onde a cor verde representa a distribuição do fluido injetado no momento em que ele atravessa totalmente o meio poroso atingindo um regime permanente do escoamento, enquanto a cor preta representa tanto as regiões sólidas como as regiões de fluido molhante que não foram deslocadas no processo.

Na comparação com os resultados de Zhang *et al.* (2011), notam-se comportamentos semelhantes na estrutura final de avanço dos *fingers*. Nos casos de $Ca = 10^{-5}$ e $Ca = 10^{-4.57}$ ambos resultam numa estrutura de *fingers* aleatórios que tendem a criar um menor caminho preferencial de travessia do domínio poroso em relação aos casos de menor número de capilaridade. Assim, corroborando uma correta representação do presente modelo na caracterização do estado de *capillary fingering*.

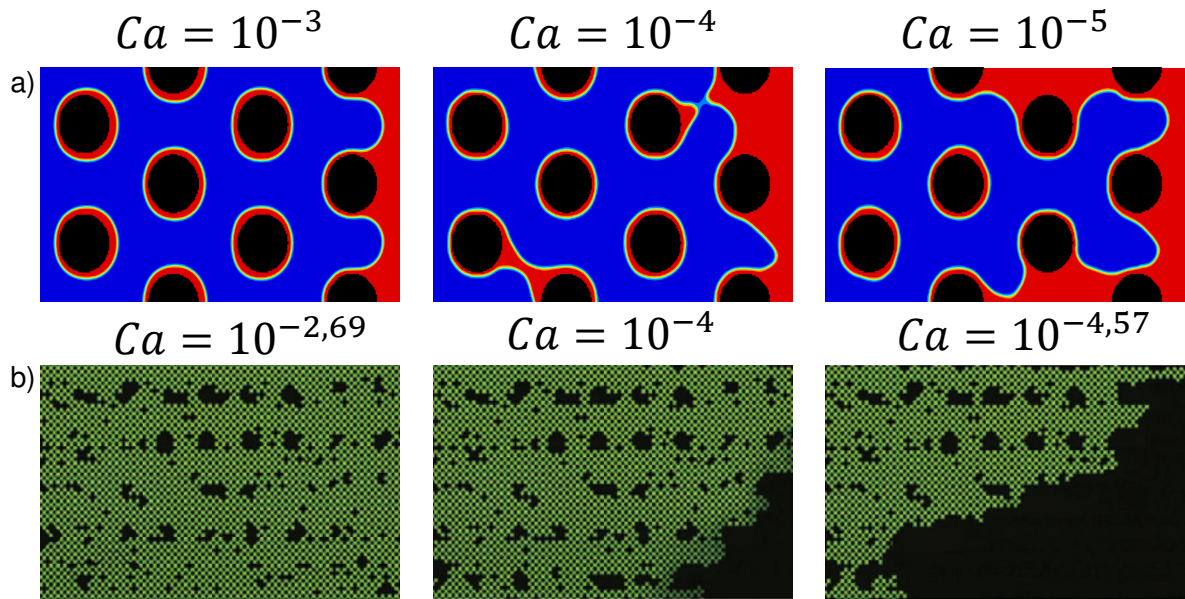


Figura 40 – Transição do estado de deslocamento estável para *capillary fingering*: a) resultados numéricos do presente modelo para $M_\nu = 10^{-3}$ em $Ca = 10^{-3}$, 10^{-4} e 10^{-5} ; b) resultados experimentais de Zhang *et al.* (2011) para $M_\nu = 10^{-1,88}$ em $Ca = 10^{-2,69}$, 10^{-4} e $10^{-4,57}$.

7.3.5 *Capillary Fingering - Viscous Fingering*

Para a representação da transição entre os estados de *capillary fingering* e de *viscous fingering*, foram simulados para $Ca = 10^{-5}$ os casos de $M_\nu = 10^3$, 10^0 e 10^4 , sendo fixado a velocidade constante em $U_c = 0,01$ e a viscosidade do fluido injetado em $\nu_i = 0,0000725$. Na Figura 38 são ilustrados através do número de Atwood os resultados obtidos para o campo de densidade de cada escoamento.

Tendo como referência de *capillary fingering* o caso de $M_\nu = 10^3$, já analisado na subseção anterior, o caso de $M_\nu = 10^0$ demonstra tanto um comportamento de *capillary fingering* como de *viscous fingering*, notando-se no mesmo caso *fingers* com características de movimento aleatório e *fingers* que tendem a avançar na direção do escoamento. Contudo, em $M_\nu = 10^0$ todos os *fingers* mantêm a espessura na ordem de δ_p , sendo está características comum ao comportamento de *capillary fingering*.

Para o caso de $M_\nu = 10^{-4}$, nota-se uma clara característica de *viscous fingering*, com *fingers* de espessura da ordem de $\delta_p/2$ que tendem a avançar na direção do escoamento. Adicionalmente, destaca-se a similaridade dos padrões de deslocamento observados na Figura 38 e 41 para os casos $M_\nu = 10^{-3}$ e $M_\nu = 10^{-4}$.

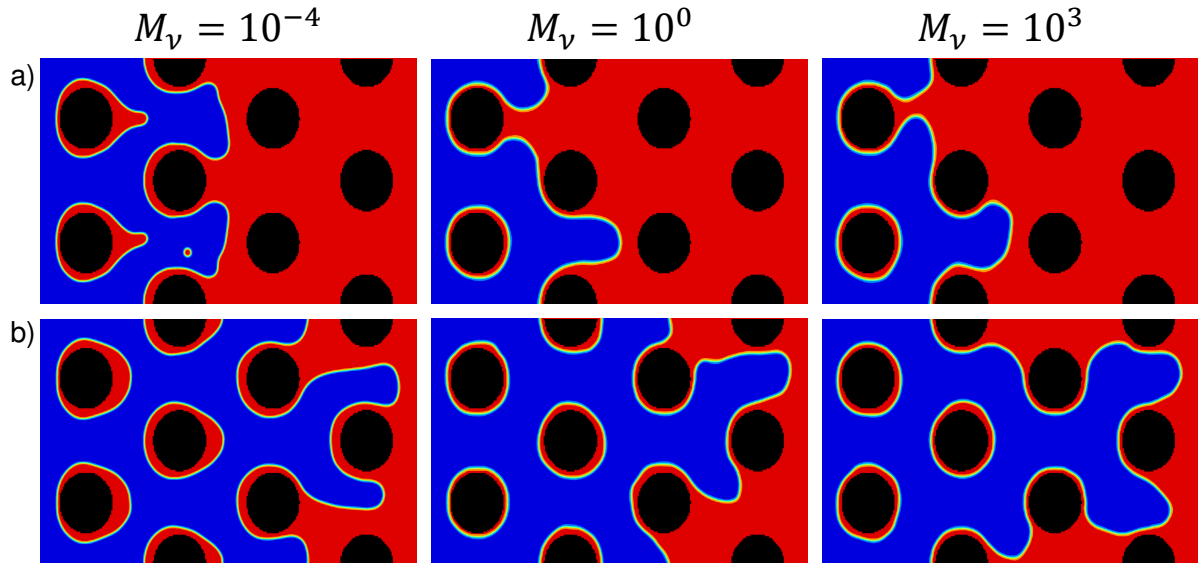


Figura 41 – Transição do estado de *capillary fingering* para *viscous fingering*. As fileiras a) e b) representam os resultados obtidos no ponto em que o fluido injetado alcança os comprimentos do domínio de $L/2$ e $L - L/16$, respectivamente. Os fluidos injetado e deslocado estão representados nas cores azul e vermelha, respectivamente

7.4 Considerações

Nas aplicações do presente modelo para a representação do processo de deslocamento fluido-fluido em meio poroso, observou-se excelente capacidade na caracterização dos diferentes estados de deslocamento pela variação do número de capilaridade e da razão de viscosidade, assim como concordâncias com as análises de Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) e com os resultados experimentais de Zhang *et al.* (2011).

Nas análises das faixas de estabilidade numérica, constatam-se tendências de diminuição da faixa de estabilidade em função da razão de viscosidade. Para as faixas consideradas de $10^{-6} \leq M_v \leq 10^6$ e de $10^0 \leq Ca \leq 10^{-10}$, o modelo demonstrou uma capacidade de simulação de 70% dos casos possíveis. Contudo, destaca-se que o refino de malha e a estrutura poroso podem influenciar tanto o aumento como a diminuição das faixas de estabilidade numérica apresentadas.

Por fim, com base nos resultados obtidos, considera-se o presente modelo uma ferramenta promissora para simulações estáveis da física presente no processo de deslocamento fluido-fluido em meios porosos, podendo ser estendida a sua aplicação para rochas digitalizadas, assim como para a representação de efeitos de molhabilidade.

8 CONCLUSÕES

No presente trabalho foi desenvolvido um modelo numérico *lattice* Boltzmann multicomponente capaz de representar o escoamento de fluidos imiscíveis com altas razões de viscosidade. Para tanto, usou-se como referência em seu desenvolvimento os modelos propostos por Shan e Chen (1993) e Philippi *et al.* (2012).

Através de análises de Chapman-Enskog do modelo pseudo-potencial proposto por Shan e Chen (1993), verificaram-se pontos de discretização e de modelagem que introduzem erros nas representações das equações de balanço de massa e quantidade de movimento, e consequentemente, erros nas simulações numéricas. Com base nos erros observados, obteve-se o presente modelo através de correções e aprimoramentos do modelo pseudo-potencial pela utilização de esquemas de discretização de alta ordem e da adaptação para um modelo de colisão baseado em momentos. Contudo, na comparação do presente modelo com o modelo cinético termodinamicamente consistente proposto por Philippi *et al.* (2012), nota-se ainda uma incapacidade para a correta representação da teoria do campo médio que descreve a dinâmica interfacial de camada difusa entre os componentes.

Nas análises empregadas para o modelo de colisão baseado em momentos, observou-se para os problemas monocomponente de instabilidade de Kelvin-Helmholtz e cavidade com tampa deslizante, que a consideração da hipótese de Stokes na equação de balanço da quantidade de movimento é capaz de aumentar significativamente a estabilidade numérica para elevados números de Reynolds e reduzir os efeitos de compressibilidade característicos do método LBM, ambos mantendo a taxa de convergência de malha num decaimento de segunda ordem.

A validação do modelo multicomponente foi conduzida na verificação dos problemas de bolha estática, escoamento Poiseuille para dois componentes e deslocamento fluido-fluido, onde focou-se nas análises de estabilidade numérica, acurácia e magnitude de correntes espúrias. Na comparação com os demais modelos da literatura, o presente modelo é o único que apresentou estabilidade numérica para razões de viscosidade tendendo ao infinito e a zero, nos problemas de bolha estática e de escoamento de Poiseuille para dois componentes. Enquanto, no problema de deslocamento fluido-fluido Otomo *et al.* (2018) obtiveram estabilidade na ordem 10^2 , o presente modelo estende esta faixa para ordem 10^4 . Nas demais análises de correntes espúrias e acurácia, observaram-se conformidades dos resultados obtidos com os resultados apresentados pelos modelos de Ginzburg (2007), Porter *et al.* (2012), Otomo *et al.* (2018), Liu *et al.* (2016a) e Gharibi e Ashrafizaadeh (2020).

Na representação do problema de deslocamento fluido-fluido em meio poroso, o presente modelo apresentou excelente capacidade na representação dos diferentes estados de deslocamento, demonstrando concordância com as análises de Lenormand, Touboul e Zarccone (1988) e com os resultados experimentais de Zhang *et al.* (2011). Na análise de estabilidade numérica, conduzida nas faixas de número de capilaridade de 10^0 até 10^{-10} e de razão de viscosidade de 10^{-6} até 10^6 no diagrama de estados proposto por Lenormand, Touboul e Zarccone

(1988), observou-se uma tendência de diminuição da estabilidade numérica do número de capilaridade com os valores de razão de viscosidade tendendo aos extremos de infinito e zero. Contudo, o presente modelo demonstrou dentro das faixas consideradas uma porcentagem estável numericamente de 70% dos casos possíveis.

Enfim, o presente estudo demonstrou que a dedução de modelos multicomponentes *lattice* Boltzmann por meio das reduções de erros observados nas análises de Chapman-Enskog, resultaram num modelo mais consistente fisicamente, que conseqüentemente estendeu sua capacidade para a representação dos problemas da engenharia.

Contudo, com base nos resultados observados e nas análises desenvolvidas no decorrer deste documento, destacaram-se alguns possíveis próximos passos para a continuidade deste estudo:

- a utilização de equações de estado na representação de cada componente. Tendo como objetivo a representação de elevados gradientes de densidade com base nas curvas coexistência de cada equação, assim como uma correta representação da teoria do campo médio;
- a aplicação do modelo de correção de Enskog para uma maior redução dos efeitos de compressibilidade característicos do método *lattice* Boltzmann;
- o desenvolvimento de condições de contorno que representem corretamente a interação fluido-fluido nas camadas, as quais satisfaçam as equações de balanço de massa e quantidade de movimento nestes pontos.

REFERÊNCIAS

- ABE, T. Derivation of the lattice boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the boltzmann equation. **Journal of Computational Physics**, v. 131, n. 1, p. 241–246, 1997.
- ANDERSON, D. M.; MCFADDEN, G. B.; WHEELER, A. A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 30, n. 1, p. 139–165, 1998. Disponível em: <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.139>.
- ANDERSON, J. D. Computational fluid dynamics: the basics with applications. **Science/Engineering/Math. McGraw-Hill Science**, 1995.
- BALCI, O. M.; EZAN, M. A.; TURHAN, K. Z. A heat recovery unit with phase change material for combi-boilers. **Energy Storage**, Wiley Online Library, v. 1, n. 5, p. e81, 2019.
- BAO, J.; SCHAEFER, L. Lattice boltzmann equation model for multi-component multi-phase flow with high density ratios. **Applied Mathematical Modelling**, Elsevier, v. 37, n. 4, p. 1860–1871, 2013.
- BAZARIN, R. *et al.* Moments-based method for boundary conditions in the lattice boltzmann framework: A comparative analysis for the lid driven cavity flow. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 230, p. 105142, 2021.
- BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. **Phys. Rev.**, American Physical Society, v. 94, p. 511–525, May 1954. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.94.511>.
- BOLTZMANN, L. **Vorlesungen über Gastheorie**. [S.l.]: J. A. Barth, Leipzig, 1898.
- BOTELLA, O.; PEYRET, R. Benchmark spectral results on the lid-driven cavity flow. **Computers and Fluids**, Pergamon, v. 27, n. 4, p. 421–433, may 1998. ISSN 00457930. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0045793098000024?via%3Dihubhttps://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045793098000024>.
- BRUNEAU, C.-H.; SAAD, M. The 2D lid-driven cavity problem revisited. **Computers and Fluids**, v. 35, n. 3, p. 326–348, mar 2006. ISSN 00457930. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045793005000368>.
- CAHN, J. W.; HILLIARD, J. E. Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy. **The Journal of chemical physics**, American Institute of Physics, v. 28, n. 2, p. 258–267, 1958.
- CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. **The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases**. [S.l.]: Cambridge university press, 1990.
- CHOI, H.; LEE, C.; KANG, S. H. Phase transition between pressure and heat release oscillations in hybrid rocket combustion. **Journal of Mechanical Science and Technology**, Springer, v. 33, n. 12, p. 6095–6102, 2019.
- DONALDSON, E. C.; CHILINGARIAN, G. V.; YEN, T. F. **Enhanced oil recovery, II: Processes and operations**. [S.l.]: Elsevier, 1989.

- ERTURK, E.; CORKE, T. C.; GÖKÇÖL, C. Numerical solutions of 2-d steady incompressible driven cavity flow at high reynolds numbers. **International journal for Numerical Methods in fluids**, Wiley Online Library, v. 48, n. 7, p. 747–774, 2005.
- FARAG, G. *et al.* A pressure-based regularized lattice-boltzmann method for the simulation of compressible flows. **Physics of Fluids**, AIP Publishing LLC, v. 32, n. 6, p. 066106, 2020.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; MITCHELL, J. W. **Fox and McDonald's introduction to fluid mechanics**. [S./]: John Wiley & Sons, 2020.
- FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 56, p. 1505–1508, Apr 1986. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.1505>.
- GHARIBI, F.; ASHRAFIZAADEH, M. Simulation of high-viscosity-ratio multicomponent fluid flow using a pseudopotential model based on the nonorthogonal central-moments lattice boltzmann method. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 101, p. 043311, Apr 2020. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.101.043311>.
- GHIA, U.; GHIA, K. N.; SHIN, C. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. **Journal of computational physics**, Academic Press, v. 48, n. 3, p. 387–411, 1982.
- GINZBURG, I. Lattice boltzmann modeling with discontinuous collision components: Hydrodynamic and advection-diffusion equations. **Journal of Statistical Physics**, Springer, v. 126, n. 1, p. 157–206, 2007.
- GRAD, H. Note on n-dimensional hermite polynomials. **Communications on Pure and Applied Mathematics**, Wiley Online Library, v. 2, n. 4, p. 325–330, 1949.
- GUNSTENSEN, A. K.; ROTHMAN, D. H. Microscopic modeling of immiscible fluids in three dimensions by a lattice boltzmann method. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 18, n. 2, p. 157, 1992.
- GUNSTENSEN, A. K. *et al.* Lattice boltzmann model of immiscible fluids. **Phys. Rev. A**, American Physical Society, v. 43, p. 4320–4327, Apr 1991. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.43.4320>.
- GUO, Z.; LIN, P. A thermodynamically consistent phase-field model for two-phase flows with thermocapillary effects. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 766, p. 226–271, 2015.
- GUO, Z.; SHU, C. **Lattice Boltzmann method and its application in engineering**. [S./]: World Scientific, 2013. v. 3.
- GUO, Z.; ZHENG, C.; SHI, B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice boltzmann method. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 65, p. 046308, Apr 2002. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.65.046308>.
- HALPERN, D.; GAVERIII, D. Boundary element analysis of the time-dependent motion of a semi-infinite bubble in a channel. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 115, n. 2, p. 366–375, 1994.
- HE, X.; CHEN, S.; ZHANG, R. A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh–taylor instability. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 152, n. 2, p. 642–663, 1999.

- HE, X.; DOOLEN, G. D. Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice boltzmann models for multiphase flows. **Journal of Statistical Physics**, Springer, v. 107, n. 1, p. 309–328, 2002.
- HE, X.; LUO, L.-S. Theory of the lattice boltzmann method: From the boltzmann equation to the lattice boltzmann equation. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 56, p. 6811–6817, Dec 1997. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.56.6811>.
- HE, X.; SHAN, X.; DOOLEN, G. D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases. **Phys. Rev. E**, Am. Phys. Soc., v. 57, p. R13–R16, Jan 1998. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.57.R13>.
- HILFER, R.; ØREN, P. Dimensional analysis of pore scale and field scale immiscible displacement. **Transport in Porous Media**, Springer, v. 22, n. 1, p. 53–72, 1996.
- HOHENBERG, P. C.; HALPERIN, B. I. Theory of dynamic critical phenomena. **Rev. Mod. Phys.**, American Physical Society, v. 49, p. 435–479, Jul 1977. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.49.435>.
- HUANG, H.; KRAFCZYK, M.; LU, X. Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 84, p. 046710, Oct 2011. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.84.046710>.
- HUANG, H.; SUKOP, M.; LU, X. Multiphase lattice boltzmann methods: Theory and application. John Wiley & Sons, 2015.
- JAMET, D. Diffuse interface models in fluid mechanics. **GdR CNRS documentation, see pmc.polytechnique.fr/mp/GDR/docu/Jamet.pdf**, 2010.
- JASNOW, D.; VINALS, J. Coarse-grained description of thermo-capillary flow. **Physics of Fluids**, American Institute of Physics, v. 8, n. 3, p. 660–669, 1996.
- KORTEWEG, D. J. Sur la forme que prennent les équations du mouvements des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais connues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. **Archives Néerlandaises des Sciences exactes et naturelles**, v. 6, p. 1–24, 1901.
- KREMER, G. M. **An Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Processes in Gases**. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010. (Interaction of Mechanics and Mathematics).
- KRÜGER, T. *et al.* The lattice boltzmann method. **Springer International Publishing**, Springer, v. 10, n. 978-3, p. 4–15, 2017.
- LADD, A. J. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized boltzmann equation. part 1. theoretical foundation. **Journal of fluid mechanics**, Cambridge University Press, v. 271, p. 285–309, 1994.
- LATT, J.; CHOPARD, B. Lattice Boltzmann method with regularized pre-collision distribution functions. **Math. Comp. Simul.**, v. 72, n. 2, p. 165–168, 2006. ISSN 0378-4754. Discrete Simulation of Fluid Dynamics in Complex Systems. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378475406001583>.
- LATT, J. *et al.* Straight velocity boundaries in the lattice Boltzmann method. **Physical Review E**, v. 77, n. 5, p. 056703, may 2008. ISSN 1539-3755. Disponível em: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.77.056703><https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.77.056703>.

- LEE, T.; LIN, C.-L. A stable discretization of the lattice boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. **Journal of Computational Physics**, v. 206, n. 1, p. 16–47, 2005. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999104004929>.
- LENORMAND, R.; TOUBOUL, E.; ZARCONE, C. Numerical models and experiments on immiscible displacements in porous media. **Journal of fluid mechanics**, Cambridge University Press, v. 189, p. 165–187, 1988.
- LENORMAND, R.; ZARCONE, C.; SARR, A. Mechanisms of the displacement of one fluid by another in a network of capillary ducts. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 135, p. 337–353, 1983.
- LIU, H. *et al.* Multiphase lattice Boltzmann simulations for porous media applications. **Comp. Geosci.**, v. 20, n. 4, p. 777–805, 2016. ISSN 1573-1499.
- LIU, H. *et al.* A lattice boltzmann method for axisymmetric multicomponent flows with high viscosity ratio. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 327, p. 873–893, 2016.
- LUO, L.-S. *et al.* Numerics of the lattice Boltzmann method: Effects of collision models on the lattice Boltzmann simulations. **Physical Review E**, v. 83, n. 5, p. 056710, may 2011. ISSN 1539-3755. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.83.056710>.
- MALASPINAS, O.; CHOPARD, B.; LATT, J. General regularized boundary condition for multi-speed lattice Boltzmann models. **Computers and Fluids**, v. 49, n. 1, p. 29–35, oct 2011. ISSN 00457930. Disponível em: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045793011001447>.
- MATTILA, K. K.; HEGELE JR., L. A.; PHILIPPI, P. C. High-accuracy approximation of high-rank derivatives: isotropic finite differences based on lattice-Boltzmann stencils. **Sci. World J.**, v. 2014, p. 1–16, January 2014. Article ID 142907. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1155/2014/142907>.
- MATTILA, K. K.; PHILIPPI, P. C.; HEGELE, L. A. High-order regularization in lattice-boltzmann equations. **Physics of Fluids**, American Institute of Physics Inc., v. 29, 4 2017. ISSN 10897666.
- MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 61, p. 2332–2335, Nov 1988. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2332>.
- MEI, R. *et al.* Consistent initial conditions for lattice boltzmann simulations. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 35, n. 8-9, p. 855–862, 2006.
- MOHAMMED, S.; REIS, T. Using the lid-driven cavity flow to validate moment-based boundary conditions for the lattice boltzmann equation. **Archive of Mechanical Engineering**, v. 64, n. 1, p. 57–74, 2017.
- MUGGERIDGE, A. *et al.* Recovery rates, enhanced oil recovery and technological limits. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society Publishing., v. 372, n. 2006, p. 20120320, 2014.
- MUGGERIDGE, A. *et al.* Recovery rates, enhanced oil recovery and technological limits. **Phil. Trans. R. Soc. A**, The Royal Society, v. 372, n. 2006, p. 20120320, 2014.
- OTOMO, H. *et al.* Multi-component lattice Boltzmann models for accurate simulation of flows with wide viscosity variation. **Comp. Fluids**, v. 172, p. 674–682, 2018. ISSN 0045-7930. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045793018300513>.

PAN, L. S. *et al.* A diffuse interface model for two-phase flows with phase transition. **Physics of Fluids**, v. 31, n. 9, p. 092112, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.5113922>.

PENG, C. The lattice boltzmann method for fluid dynamics: theory and applications. **M. Math, Department of Mathematics, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne**, v. 2, n. 2, p. 2–4, 2011.

PENG, Y.; WANG, B.; MAO, Y. Study on force schemes in pseudopotential lattice Boltzmann model for two-phase flows. **Math. Probl. Eng.**, Gale Academic OneFile, v. 2018, 2018. ISSN 1024-123X. Disponível em: <https://link.gale.com/apps/doc/A609852780/AONE?u=capes&sid=AONE&xid=6b647bc7>.

PHILIPPI, P. C. *et al.* From the continuous to the lattice boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 73, p. 056702, May 2006. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.056702>.

PHILIPPI, P. C. *et al.* Lattice-Boltzmann equations for describing segregation in non-ideal mixtures. **J. Fluid Mech.**, Cambridge University Press, v. 713, p. 564–587, 2012.

PHILIPPI, P. C. *et al.* Thermodynamic consistency in deriving lattice boltzmann models for describing segregation in non-ideal mixtures. **Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society Publishing, v. 369, n. 1944, p. 2292–2300, 2011.

PORTER, M. L. *et al.* Multicomponent interparticle-potential lattice Boltzmann model for fluids with large viscosity ratios. **Phys. Rev. E**, Am. Phys. Soc., v. 86, p. 036701, Sep 2012. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.86.036701>.

QIU, M. **Computational studies on interfacial dynamics in complex fluids**. 2020. Tese (Doutorado) — University of British Columbia, 2020.

RAYLEIGH, L. Xx. on the theory of surface forces.—ii. compressible fluids. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, Taylor & Francis, v. 33, n. 201, p. 209–220, 1892.

SCHULTZ, W. W.; LEE, N.; BOYD, J. P. Chebyshev pseudospectral method of viscous flows with corner singularities. **Journal of scientific computing**, Springer, v. 4, n. 1, p. 1–24, 1989.

SHAN, X.; CHEN, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 47, p. 1815–1819, Mar 1993. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.47.1815>.

SHAN, X.; CHEN, H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice boltzmann equation. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 49, p. 2941–2948, Apr 1994. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.49.2941>.

SHAN, X.; DOOLEN, G. Multicomponent lattice-boltzmann model with interparticle interaction. **Journal of Statistical Physics**, Springer, v. 81, n. 1, p. 379–393, 1995.

SHAN, X.; DOOLEN, G. Diffusion in a multicomponent lattice boltzmann equation model. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 54, p. 3614–3620, Oct 1996. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.54.3614>.

SHAN, X.; YUAN, X.-F.; CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the navier–stokes equation. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 550, p. 413–441, 2006.

SIEBERT, D. N. **MODELOS CINÉTICOS DISCRETOS PARA FLUIDOS NÃO-IDEAIS COM TRANSIÇÃO DE FASES**. 2013 — Universidade Federal de Santa Catarina, 2013.

SILVA, G.; SEMIAO, V. First- and second-order forcing expansions in a lattice boltzmann method reproducing isothermal hydrodynamics in artificial compressibility form. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 698, p. 282–303, 2012.

STRUCHTRUP, H. Macroscopic transport equations for rarefied gas flows. *In: Macroscopic transport equations for rarefied gas flows*. [S.l.]: Springer, 2005. p. 145–160.

SWIFT, M. R. *et al.* Lattice boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 54, p. 5041–5052, Nov 1996. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.54.5041>.

SWIFT, M. R.; OSBORN, W. R.; YEOMANS, J. M. Lattice boltzmann simulation of nonideal fluids. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 75, p. 830–833, Jul 1995. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.830>.

TSUJI, T.; JIANG, F.; CHRISTENSEN, K. T. Characterization of immiscible fluid displacement processes with various capillary numbers and viscosity ratios in 3d natural sandstone. **Advances in Water Resources**, Elsevier, v. 95, p. 3–15, 2016.

WAALS, J. D. Van der. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density. **Journal of Statistical Physics**, Kluwer Academic Publishers-Plenum Publishers, v. 20, n. 2, p. 200–244, 1979.

WAALS, J. Van der. Thermodynamische theorie der kapillarität unter voraussetzung stetiger dichteänderung. **Zeitschrift für Physikalische Chemie**, De Gruyter Oldenbourg, v. 13, n. 1, p. 657–725, 1894.

WANG, S.-L. *et al.* Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, Elsevier, v. 69, n. 1-2, p. 189–200, 1993.

WENDT, J. F. **Computational fluid dynamics: an introduction**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2008.

WISSOCQ, G.; SAGAUT, P. Hydrodynamic limits and numerical errors of isothermal lattice boltzmann schemes. **arXiv preprint arXiv:2104.14217**, 2021.

YIOTIS, A. G. *et al.* A lattice boltzmann study of viscous coupling effects in immiscible two-phase flow in porous media. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects**, v. 300, n. 1, p. 35–49, 2007. ISSN 0927-7757. Proceedings of the Fourth International TRI/Princeton Workshop "Characterization of Porous Materials: from Angstroms to Millimeters". Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775706009721>.

ZHANG, C. *et al.* Influence of viscous and capillary forces on immiscible fluid displacement: Pore-scale experimental study in a water-wet micromodel demonstrating viscous and capillary fingering. **Energy & Fuels**, ACS Publications, v. 25, n. 8, p. 3493–3505, 2011.

APÊNDICE A – Notações

Neste capítulo são definidas as notações matemáticas utilizadas no decorrer do presente documento.

As variáveis escalares são denotadas com caracteres minúsculo e maiúsculos (e.g., ρ e P), enquanto os vetores com caracteres minúsculos e em negrito (e.g., \mathbf{u}), e os tensores com caracteres maiúsculos e em negrito (e.g., \mathbf{P}). O produto escalar entre vetores e o produto vetorial entre um vetor e um tensor são denotados por “.”, enquanto o produto escalar entre dois tensores é dado por “:”. O produto tensorial entre vetores é representado, utilizando como exemplo dois vetores \mathbf{a} e \mathbf{b} , por \mathbf{ab} .

Para os vetores e tensores também será utilizada a notação indicial, onde subscritos gregos representam as dimensões físicas. Utilizando a convenção de Einstein para somatórios, o produto escalar de vetores é representado pelo subscrito grego repetido dos vetores, sendo um somatório sobre todos índices dimensionais. Exemplificando, tem-se o produto escalar $\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}$ escrito em ambas notações:

$$\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u} = \xi_{\alpha} u_{\alpha} = \xi_x u_x + \xi_y u_y + \xi_z u_z. \quad (237)$$

Em casos de produtos escalares com vetores idênticos é utilizado o símbolo do vetor sem negrito e elevado ao quadrado, e.g., $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = u^2$.

Por fim, na Tabela 7 são exemplificados diferentes casos em notações vetoriais e indiciais.

Tabela 7 – Exemplos de notações para variáveis escalares, vetoriais, tensoriais e produtos.

Variáveis	Notação Vetorial	Notação Indicial
Escalar	ρ, u, V	ρ, u, V
Vetor	\mathbf{u}, \mathbf{a}	u_{α}, a_{α}
Tensor	$\mathbf{\Pi}, \mathbf{P}$	$\Pi_{\alpha\beta}, P_{\alpha\beta}$
Produto Escalar	$\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}$ $\mathbf{\Pi} : \mathbf{P}$	$\xi_{\alpha} u_{\alpha}$ $\Pi_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta}$
Produto Vetorial	$\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u}$	$\Pi_{\alpha\beta} u_{\beta}$
Produto Tensorial	$\boldsymbol{\xi} \mathbf{u}$	$\xi_{\alpha} u_{\beta}$
Nabla	∇	∂_{α}

APÊNDICE B – Polinômios de Hermite

Considerando um espaço D-dimensional, o polinômio de Hermite de grau n é definido pela n -ésima derivada da função peso, função que é dada por

$$\omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} e^{-\frac{\boldsymbol{\xi}^2}{2}}. \quad (238)$$

Assim, o polinômio de Hermite de ordem n é definido por

$$\mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \partial_{\xi_{\alpha}}^n \omega(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \frac{\partial^n \omega(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_{\alpha_1} \partial \xi_{\alpha_2} \dots \partial \xi_{\alpha_n}}, \quad (239)$$

onde $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$. Na notação vetorial o n -ésimo grau do polinômio é denotado por

$$\mathcal{H}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n \omega(\boldsymbol{\xi}). \quad (240)$$

Expandindo a série polinomial até a quarta ordem tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(0)} &= \frac{(-1)^0}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \omega(\boldsymbol{\xi}) = 1, \\ \mathcal{H}_{\alpha_1}^{(1)} &= \frac{(-1)}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \partial_{\xi_{\alpha_1}} \omega(\boldsymbol{\xi}) = \xi_{\alpha_1}, \\ \mathcal{H}_{\alpha_1 \alpha_2}^{(2)} &= \frac{(-1)^2}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \partial_{\xi_{\alpha_1} \alpha_2}^2 \omega(\boldsymbol{\xi}) = \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} - \delta_{\alpha_1 \alpha_2}, \\ \mathcal{H}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3}^{(3)} &= \frac{(-1)^3}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \partial_{\xi_{\alpha_1} \alpha_2 \alpha_3}^3 \omega(\boldsymbol{\xi}) = \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \xi_{\alpha_3} - (\delta_{\alpha_1 \alpha_2} \xi_{\alpha_3} + \delta_{\alpha_1 \alpha_3} \xi_{\alpha_2} + \delta_{\alpha_2 \alpha_3} \xi_{\alpha_1}), \\ \mathcal{H}_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}^{(4)} &= \frac{(-1)^4}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \partial_{\xi_{\alpha_1} \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4}^4 \omega(\boldsymbol{\xi}) = \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \xi_{\alpha_3} \xi_{\alpha_4} - (\delta_{\alpha_1 \alpha_2} \xi_{\alpha_3} \xi_{\alpha_4} + \delta_{\alpha_1 \alpha_3} \xi_{\alpha_2} \xi_{\alpha_4} + \delta_{\alpha_1 \alpha_4} \xi_{\alpha_2} \xi_{\alpha_3} \\ &\quad + \delta_{\alpha_2 \alpha_3} \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_4} + \delta_{\alpha_2 \alpha_4} \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_3} + \delta_{\alpha_3 \alpha_4} \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2}) \\ &\quad + (\delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta_{\alpha_3 \alpha_4} + \delta_{\alpha_1 \alpha_3} \delta_{\alpha_2 \alpha_4} + \delta_{\alpha_1 \alpha_4} \delta_{\alpha_2 \alpha_3}), \end{aligned}$$

onde $\partial_{\xi_{\alpha_1}} \xi_{\alpha_2} = \delta_{\alpha_1 \alpha_2}$ é a função delta de Kronecker, que vale 1 se $\alpha_1 = \alpha_2$ e 0 se $\alpha_1 \neq \alpha_2$. Sendo \tilde{n} um índice cíclico de permutação com n formas diferentes, por exemplo $\xi_{\alpha_1} + \xi_{\alpha_2} = \tilde{2}\boldsymbol{\xi}$, pode-se reescrever os termos de n -ésimo grau dos polinômios

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(0)} &= 1, \\ \mathcal{H}^{(1)} &= \boldsymbol{\xi}, \\ \mathcal{H}^{(2)} &= \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{I}, \\ \mathcal{H}^{(3)} &= \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi} - \tilde{3}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{I}, \\ \mathcal{H}^{(4)} &= \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi} - \tilde{6}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{I} + \tilde{3}\boldsymbol{I}\boldsymbol{I}, \end{aligned}$$

sendo \boldsymbol{I} a matriz identidade equivalente à $\delta_{\alpha_1 \alpha_2}$.

B.1 Relação 1

Tem-se por definição

$$\mathcal{H}^{(n)}\omega(\boldsymbol{\xi}) = (-1)^n \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n \omega(\boldsymbol{\xi}).$$

Derivando o termo acima

$$\nabla_{\boldsymbol{\xi}}(\mathcal{H}^{(n)}\omega(\boldsymbol{\xi})) = -(-1)^{n+1} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^{n+1} \omega(\boldsymbol{\xi}) = -\mathcal{H}^{(n+1)}\omega(\boldsymbol{\xi}),$$

utilizando as propriedades do divergente

$$\mathcal{H}^{(n)}(\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\omega(\boldsymbol{\xi})) + (\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\mathcal{H}^{(n)})\omega(\boldsymbol{\xi}) = -\boldsymbol{\xi}\mathcal{H}^{(n)}\omega(\boldsymbol{\xi}) + (\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\mathcal{H}^{(n)})\omega(\boldsymbol{\xi}),$$

dividindo por $\omega(\boldsymbol{\xi})$, tem-se a relação na forma final

$$\boldsymbol{\xi}\mathcal{H}^{(n)} = \mathcal{H}^{(n+1)} + \nabla_{\boldsymbol{\xi}}\mathcal{H}^{(n)}.$$

Em notação vetorial a relação é representada por

$$\xi_{\alpha_0} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^n = \mathcal{H}_{\alpha_0, \dots, \alpha_n}^{n+1} + \partial_{\xi_{\alpha_0}} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^n.$$

B.2 Relação 2

Considerando a derivada do polinômio, tem-se que

$$\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\mathcal{H}^{(n)} = \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \left(\frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n \omega(\boldsymbol{\xi}) \right),$$

utilizando as propriedades do divergente

$$\underbrace{\nabla_{\boldsymbol{\xi}} \left(\frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n \omega(\boldsymbol{\xi}) \right)}_{\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\mathcal{H}^{(n)}} = \underbrace{\frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \boldsymbol{\xi} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n \omega(\boldsymbol{\xi})}_{\boldsymbol{\xi}\mathcal{H}^n} - \underbrace{\frac{(-1)^{n+1}}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^{n+1} \omega(\boldsymbol{\xi})}_{\mathcal{H}^{n+1}},$$

recupera-se a relação 1. Contudo, expandindo o termo \mathcal{H}^{n+1} , tem-se

$$\underbrace{\nabla_{\boldsymbol{\xi}} \left(\frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n \omega(\boldsymbol{\xi}) \right)}_{\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\mathcal{H}^{(n)}} = \underbrace{\frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \boldsymbol{\xi} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n \omega(\boldsymbol{\xi})}_{\boldsymbol{\xi}\mathcal{H}^n} - \frac{(-1)^n}{\omega(\boldsymbol{\xi})} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^n (\boldsymbol{\xi}\omega(\boldsymbol{\xi})),$$

expandindo novamente o segundo termo do lado direito

$$\underbrace{\nabla_{\xi} \left(\frac{(-1)^n}{\omega(\xi)} \nabla_{\xi}^n \omega(\xi) \right)}_{\nabla_{\xi} \mathcal{H}^{(n)}} = \underbrace{\frac{(-1)^n}{\omega(\xi)} \xi \nabla_{\xi}^n \omega(\xi)}_{\xi \mathcal{H}^n} - \underbrace{\frac{(-1)^n}{\omega(\xi)} \nabla_{\xi}^{n-1} (\omega(\xi) I)}_{\mathcal{H}^{n-1} I} - \frac{(-1)^n}{\omega(\xi)} \nabla_{\xi}^{n-1} (\xi \nabla_{\xi} \omega(\xi)),$$

repetindo a expansão no último termo do lado direito da equação acima por $n - 1$ vezes, tem-se a relação na forma final

$$\nabla_{\xi} \mathcal{H}^{(n)} = \tilde{n} \mathcal{H}^{(n-1)} I.$$

Na forma de notação indexada

$$\partial_{\xi_{\alpha_0}} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_n}^n = \sum_{i=1}^n \delta_{\alpha_0 \alpha_i} \mathcal{H}_{\alpha_1, \dots, \alpha_{i-1}, \alpha_{i+1}, \dots, \alpha_n}^{n-1}.$$

B.3 Propriedade de Ortogonalidade

Uma das principais características dos polinômios de Hermite é sua propriedade de ortogonalidade com relação ao produto interno

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) f(\mathcal{H}) g(\mathcal{H}) d\xi.$$

sendo f e g funções descritas por polinômios de Hermite.

Por sua definição, duas funções f e g são ditas ortogonais se o seu produto interno é nulo, i.e., $\langle f, g \rangle = 0$, para $f \neq g$. Deste modo, a família de polinômios de Hermite satisfaz a ortogonalidade se:

$$\begin{cases} \langle \mathcal{H}^{(n)}(\xi), \mathcal{H}^{(m)}(\xi) \rangle = 0 & , \text{ para } n \neq m \\ \text{e} \\ \langle \mathcal{H}^{(n)}(\xi), \mathcal{H}^{(m)}(\xi) \rangle \neq 0 & , \text{ para } n = m \text{ e } \mathcal{H}^{(n)}(\xi) \neq 0. \end{cases}$$

Provando a ortogonalidade de

$$\langle \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\xi), \mathcal{H}_{\beta}^{(m)}(\xi) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\xi) \mathcal{H}_{\beta}^{(m)}(\xi) d\xi$$

pode-se escrever

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\xi) \mathcal{H}_{\beta}^{(m)}(\xi) d\xi = (-1)^m \int_{-\infty}^{\infty} (\nabla_{\xi_{\beta}}^m \omega(\xi)) \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\xi) d\xi$$

integrando por partes tem-se

$$\begin{aligned} (-1)^m \int_{-\infty}^{\infty} (\nabla_{\xi\beta}^m \omega(\xi)) \mathcal{H}_\alpha^{(n)} d\xi &= (-1)^m \left(\left| (\nabla_{\xi\beta}^{m-1} \omega(\xi)) \mathcal{H}_\alpha^{(n)} \right|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (\nabla_{\xi\beta}^{m-1} \omega(\xi)) \nabla_{\xi\beta_1} \mathcal{H}_\alpha^{(n)} d\xi \right) = \\ &= (-1)^m \left(0 - \int_{-\infty}^{\infty} (\nabla_{\xi\beta}^{m-1} \omega(\xi)) \nabla_{\xi\beta_1} \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi \right) = (-1)^{m+1} \int_{-\infty}^{\infty} (\nabla_{\xi\beta}^{m-1} \omega(\xi)) \nabla_{\xi\beta_1} \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi, \end{aligned}$$

integrando por parte m vezes tem-se

$$(-1)^{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) \nabla_{\xi\beta}^m \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) \nabla_{\xi\beta}^m \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi,$$

sendo $\alpha = \alpha_1, \dots, \alpha_n$ uma permutação de $\beta = \beta_1, \dots, \beta_n$, i.e., tendo o mesmo número de direções de cada componente (como exemplo $\alpha = (x, x, y, z)$ é uma permutação de $\beta = (x, z, x, y)$), tem-se $m = n$ e conseqüentemente

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) \nabla_{\xi\beta}^m \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi = \delta_{\alpha\beta}^{(n)},$$

onde, por exemplo, $\delta_{\alpha\beta}^{(3)} = \delta_{\alpha_1\beta_1} \delta_{\alpha_2\beta_2} \delta_{\alpha_3\beta_3} + \delta_{\alpha_1\beta_1} \delta_{\alpha_2\beta_3} \delta_{\alpha_3\beta_2} + \delta_{\alpha_1\beta_3} \delta_{\alpha_2\beta_2} \delta_{\alpha_3\beta_1} + \delta_{\alpha_1\beta_2} \delta_{\alpha_2\beta_3} \delta_{\alpha_3\beta_1} + \delta_{\alpha_1\beta_3} \delta_{\alpha_2\beta_1} \delta_{\alpha_3\beta_2} + \delta_{\alpha_1\beta_2} \delta_{\alpha_2\beta_1} \delta_{\alpha_3\beta_3}$. Para casos onde $m \geq n$ ou por simetria $m \leq n$ o produto interno igual é zero, i.e., $\langle \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi), \mathcal{H}_\beta^{(m)}(\xi) \rangle = 0$. Enfim, comprova-se a ortogonalidade dos polinômios, tendo como resultado do produto interno

$$\langle \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi), \mathcal{H}_\beta^{(m)}(\xi) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi) \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) \mathcal{H}_\beta^{(m)}(\xi) d\xi = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta}^{(n)}. \quad (241)$$

B.4 Projeção em polinômios de Hermite

Assumindo que a função distribuição contínua $f(\xi)$ seja aproximada por uma série infinita em termos do polinômio de Hermite, tem-se

$$\begin{aligned} f(\xi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{A}_\alpha^{(n)} : \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) \\ &= \mathcal{A}^{(0)} \mathcal{H}^{(0)} + \mathcal{A}_{\alpha_1}^{(1)} \mathcal{H}_{\alpha_1}^{(1)} + \mathcal{A}_{\alpha_1\alpha_2}^{(2)} \mathcal{H}_{\alpha_1\alpha_2}^{(2)} + \dots, \end{aligned}$$

onde $\mathcal{A}_\alpha^{(n)}$ é o coeficiente de expansão de ordem n .

Utilizando a propriedade de ortogonalidade do produto interno na multiplicação de $f(\xi)$ por $\omega(\xi)\mathcal{H}_\beta^{(n)}(\xi)$ e integrando, tem-se

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi)\mathcal{H}_\beta^{(n)}(\xi)f(\xi)d\xi &= \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi)\mathcal{H}_\beta^{(n)}(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{A}_\alpha^{(n)} : \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi)\mathcal{H}_\beta^{(n)}(\xi) \left(\mathcal{A}^{(n-n)}\mathcal{H}^{(n-n)} + \mathcal{A}_{\alpha_{n-n-1}}^{(n-n-1)}\mathcal{H}_{\alpha_{n-n-1}}^{(n-n-1)} + \dots + \mathcal{A}_{\alpha_{n-n-1}\dots\alpha_n}^{(n)}\mathcal{H}_{\alpha_{n-n-1}\dots\alpha_n}^{(n)} + \dots \right) d\xi, \end{aligned}$$

dado a ortogonalidade dos polinômios, tem-se

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi)\mathcal{H}_\beta^{(n)}(\xi)\mathcal{A}_\alpha^{(n)} : \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi = \mathcal{A}_\alpha^{(n)} : \int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi)\mathcal{H}_\beta^{(n)}(\xi)\mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi) d\xi,$$

por fim, com a igualdade na ordem dos polinômios

$$\int_{-\infty}^{\infty} \omega(\xi)\mathcal{H}_\beta^{(n)}(\xi)f(\xi)d\xi = \mathcal{A}_\alpha^{(n)}\delta_{\alpha\beta}^{(n)} = \prod_i^n n_{\alpha_i}!\mathcal{A}_\alpha^{(n)}.$$

Reformulando $f(\xi)$ de modo a recuperar exclusivamente o coeficiente de expansão, tem-se na forma final

$$f(\xi) = \omega(\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathcal{A}_\alpha^{(n)} : \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi),$$

onde

$$\mathcal{A}_\alpha^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi)\mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi)d\xi.$$

APÊNDICE C – Análise de Chapman-Enskog do modelo pseudo-potencial

Pelos princípios físicos de interação das partículas utilizados na dedução da equação de Boltzmann, o modelo de colisão (lado direito da Eq.124) deve satisfazer as conservações de massa e de quantidade de movimento da mistura, como já abordado e discutido nas análises das Eqs. (128), (129) e (130). Tendo como base o trabalho de Shan e Doolen (1995), o procedimento de análise Chapman-Enskog é aplicado nas Eqs. (128), (129) e (130), de modo à se obter as equações de balanço de massa e de quantidade de movimento, tanto dos componentes como da mistura.

Seguindo o procedimento de análise Chapman-Enskog, aplica-se um expansão em séries de Taylor no termo *forward*, resultando em

$$\underbrace{f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1)}_{\text{Termo forward}} - f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j!} D_t^j f_i^{(p)}, \quad (242)$$

sendo $\delta_t = 1$. Expandindo os termos f e ∂_t de acordo com as Eqs. (72) e (73), respectivamente, na Eq. (242) e separando em ordens de Knudsen, tem-se

$$\begin{aligned} f_i^{(p)'} - f_i^{(p)} = & \underbrace{\left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) f_{i(0)}^{(p)}}_{Kn^{(0)}} + \underbrace{\partial_t^{(1)} f_{i(0)}^{(p)} Kn + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) f_{i(1)}^{(p)} Kn}_{Kn^{(1)}} + \\ & + \underbrace{\frac{\left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right)^2 f_{i(0)}^{(p)} Kn}{2}}_{Kn^{(1)}} + \mathcal{O}(Kn^{(2)}), \end{aligned} \quad (243)$$

tendo como destaque os termos de ordem $Kn^{(0)}$ e $Kn^{(1)}$, e truncando a equação nos termos de ordem $Kn^{(2)}$;

Os momentos macroscópicos recuperados pelos somatórios de $f_i^{(p)}$ e $f_{eq,i}^{(p)}$ (momentos que serão utilizados na recuperação das equações macroscópicas), podem ser divididas em ordens de momentos, sendo os momentos de ordem 0:

$$\underbrace{\sum_i f_i^{(p)} = \sum_i f_{i(0)}^{(p)} = \sum_i f_{eq,i}^{(p)} = \rho^{(p)}}_{\text{Densidade: momento } p \text{ de ordem } 0},$$

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_i^{(p)} = \sum_p \sum_i f_{i(0)}^{(p)} = \sum_p \sum_i f_{eq,i}^{(p)}(\rho^p, \mathbf{u}') = \rho}_{\text{Momento da mistura de ordem } 0},$$

$$\underbrace{\sum_i F_{SC,i}^{(p)}}_{\text{Momento } p \text{ do termo de força de ordem } 0} = 0,$$

$$\underbrace{\sum_i f_{i(j)}^{(p)} = 0}_{\text{Momento } p \text{ de não equilíbrio de ordem } 0} \quad \text{para } j \geq 1 .$$

Os momento de primeira ordem, de acordo com Shan e Doolen (1995) são definidos no modelo pseudo-potencial por

$$\underbrace{\sum_i f_i^{(p)} \mathbf{e}_i}_{\text{Momento } p \text{ de ordem } 1} = \rho^{(p)} \mathbf{u}^{(p)},$$

$$\underbrace{\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i}_{\text{Momento } p \text{ de ordem } 1} = \rho^{(p)} \mathbf{u}, \quad (244)$$

$$\underbrace{\sum_i f_{eq,i}^{(p)}(\rho^p, \mathbf{u}') \mathbf{e}_i}_{\text{Momento de equilíbrio (p) de ordem } 1} = \rho^{(p)} \mathbf{u}',$$

$$\underbrace{\sum_i F_{SC,i}^{(p)} \mathbf{e}_i}_{\text{Momento } p \text{ do termo de força de ordem } 0} = \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)},$$

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_i^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{1}{2} \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}}_{\text{Momento da mistura de ordem } 1} = \rho \mathbf{u}, \quad (245)$$

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i}_{\text{Momento da mistura de não equilíbrio de ordem } 1} = -\frac{1}{2} \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}, \quad (246)$$

sendo $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i$ um parâmetro inicialmente desconhecido.

No entanto, algumas inconsistência de modelagem podem ser observadas nas definições dos momento de ordem 1. Na Eq. (244) considera-se que o momento $f_{i(0)}^{(p)}$ é capaz de recuperar a velocidade resultante da mistura \mathbf{u} , contudo, nas análises de escala do procedimento de Chapman-Enskog tem-se a equivalência de $f_{i(0)}^{(p)} = f_{eq,i}^{(p)}$, que resultaria em $f_{i(0)}^{(p)}$ recuperando \mathbf{u}' . Adicionalmente, nas Eqs. (245) e (246) é assumido uma pré-dependência do vetor de aceleração $\mathbf{g}^{(p)}$, sendo que esta deve resultar de uma dependência da função distribuição em relação ao termo de força, comumente aplicada em discretizações de segunda ordem do espaço-tempo, sendo incoerente sua consideração em discretizações do espaço-tempo de primeira ordem. Deste modo, na análise do modelo pseudo-potencia considera-se os momentos de primeira ordem de $f_i^{(p)}$, $f_{i(0)}^{(p)}$ e $f_{i(1)}^{(p)}$ na forma

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_i^{(p)} \mathbf{e}_i}_{\text{Momento de ordem } 1 \text{ da mistura}} = \rho \mathbf{u}, \quad (247)$$

$$\underbrace{\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i}_{\text{Momento } p \text{ de ordem 1}} = \rho^{(p)} \mathbf{u}' , \quad (248)$$

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i}_{\text{Momento da mistura de não-equilíbrio de ordem 1}} = 0 , \quad (249)$$

e $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i$ permanece desconhecido.

As propriedades resultantes dos momentos de segunda ordem não são diretamente definidos em Shan e Doolen (1995), sendo necessário no presente trabalho assumir os momentos

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_{eq,i}^{(p)}(\rho^p, \mathbf{u}') \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i}_{\text{Momento de equilíbrio da mistura de ordem 2}} = \sum_p \left(\underbrace{\rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}' + c_s^2 \rho^{(p)}}_{\text{Momento de equilíbrio (p) de ordem 1}} \right) = \rho \mathbf{u}' \mathbf{u}' + c_s^2 \rho ,$$

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i}_{\text{Momento da mistura de ordem 1 - Baseado na Eq. (248)}} = \sum_p \left(\underbrace{\rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}' + c_s^2 \rho^{(p)}}_{\text{Momento (p) de ordem 2}} \right) = \rho \mathbf{u}' \mathbf{u}' + c_s^2 \rho ,$$

OU

$$\underbrace{\sum_p \sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i}_{\text{Momento da mistura de ordem 1}} = \sum_p \left(\underbrace{\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho^{(p)}}_{\text{Momento (p) de ordem 2 - segundo Shan e Doolen (1995)}} \right) = \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho ,$$

sendo $\sum_i f_i^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i$ e $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i$ parâmetros desconhecidos.

Devido às diferentes interpretações dos momentos recuperados pela funções distribuição, a sequência da análise de Chapman-Enskog é dividida em duas, sendo a primeira parte o desenvolvimento baseado nas propriedades macroscópicas definidas por Shan e Doolen (1995) e numa segunda parte o desenvolvimento baseado nas considerações do presente trabalho.

C.1 Análise de Shan e Doolen (1995)

Substituindo a Eq. (243) na equação de balanço de massa local (Eq. 128) e separando os termos de $Kn^{(0)}$, tem-se os balanços do componente e da mistura:

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i \left[f_{i(0)}^{(p)} + f_{i(1)}^{(p)} - f_{eq,i}^{(p)} \right] + \sum_i F_{SC,i}^{(p)}}_{\text{Balanço de massa de } (p) \text{ para } (Kn^0)} = 0, \quad (250)$$

e

$$\underbrace{\sum_p \left(\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) \right) = \sum_p \left(-\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i \left[f_{i(0)}^{(p)} + f_{i(1)}^{(p)} - f_{eq,i}^{(p)} \right] + \sum_i F_{SC,i}^{(p)} \right),}_{\text{Balanço de massa da mistura para } (Kn^0)} \quad (251)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0.$$

Seguindo o mesmo processo para a Eq. (129) de balanço local da quantidade de movimento, tem-se

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i \left[f_{i(0)}^{(p)} + f_{i(1)}^{(p)} - f_{eq,i}^{(p)} \right] \mathbf{e}_i + \sum_i F_{SC,i}^{(p)} \mathbf{e}_i,}_{\text{Balanço de quantidade de movimento de } (p) \text{ para } (Kn^0)} \quad (252)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} c_s^2 + \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \left[\rho^{(p)} (\mathbf{u} - \mathbf{u}') + \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right] + \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)},$$

e

$$\underbrace{\sum_p \left(\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) \right) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i \left[\underbrace{f_{i(0)}^{(p)} + f_{i(1)}^{(p)}}_{\approx f_i^{(p)}} - f_{eq,i}^{(p)} \right] \mathbf{e}_i + \sum_i F_{SC,i}^{(p)} \mathbf{e}_i,}_{\text{Balanço de quantidade de movimento da mistura para } (Kn^0)} \quad (253)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho c_s^2 + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}.$$

Com base na representação do esquema de interação entre os componentes, a pressão do sistema pode ser descrita no modelo pseudo-potencial por

$$\nabla_x \mathcal{P}_{sc} = \nabla (c_s^2 \rho) - \sum_p \sum_{\bar{p}} G^{p\bar{p}} \rho^{(p)} \sum_i W_i(\mathbf{e}_i) \rho^{(\bar{p})}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t) \mathbf{e}_i,$$

na forma diferencial, descrita pela expansão em séries de Taylor do termo $\rho^{(\bar{p})}(x + e_i, t)$, tem-se

$$\nabla_x \mathcal{P}_{sc} = \nabla(c_s^2 \rho) - c_s^2 \sum_p \sum_{\bar{p}} G^{p\bar{p}} \rho^{(p)} \left(\partial_\alpha \rho^{(\bar{p})} + \frac{c_s^2}{2} \partial_{\alpha\beta\beta} \rho^{(\bar{p})} \right). \quad (254)$$

Deste modo a Eq. (253), considerando as Eqs. (251) e (254), pode ser reescrita para

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x (\mathbf{u})}_{\text{Balanço de quantidade de movimento da mistura para } (Kn^0)} = -\frac{1}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \mathbf{g}^e. \quad (255)$$

Balanço de quantidade de movimento da mistura para (Kn^0)

Adicionalmente, utilizando as Eqs. (250) e (255), pode-se reformular a Eq. (252) para

$$\underbrace{-\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2)}_{\text{Balanço de quantidade de movimento de } (p) \text{ para } (Kn^0)} = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \left[\rho^{(p)} (\mathbf{u} - \mathbf{u}') + \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right] + \rho^{(p)} (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e), \quad (256)$$

Balanço de quantidade de movimento de (p) para (Kn^0)

sendo $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i$ dado por

$$\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i = \tau^{(p)} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \rho^{(p)} (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e) - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) - \rho^{(p)} (\mathbf{u} - \mathbf{u}'). \quad (257)$$

Somando a Eq. (257) sobre todos os componente pode-se determinar a relação $(\mathbf{u} - \mathbf{u}')$ por

$$(\mathbf{u} - \mathbf{u}') = \sum_p \left(\frac{\tau^{(p)}}{\rho} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} - \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) \right) + \sum_p \left(\frac{1}{2} + \tau^{(p)} \right) \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \mathbf{g}^{(p)},$$

assim eliminando sua dependência em $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i$, i.e., $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i$ pode ser reescrito na forma

$$\begin{aligned} \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i &= \tau^{(p)} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \rho^{(p)} (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e) - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) + \\ &\quad - \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \sum_p \left(\tau^{(p)} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} - \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) + \left(\frac{1}{2} + \tau^{(p)} \right) \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right). \end{aligned} \quad (258)$$

Por fim, substituindo a Eq. (257) na Eq. (252), tem-se a equação de balanço da quantidade de movimento do componente (p) na ordem $Kn^{(0)}$ na forma final

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u})}_{\text{Balanço de quantidade de movimento de } (p) \text{ para } (Kn^0)} = -\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e. \quad (259)$$

Balanço de quantidade de movimento de (p) para (Kn^0)

Com as equações de ordem $Kn^{(0)}$ e $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i$ determinadas, estende-se as análises para os termos de ordem Kn^1 . Separando os termos de ordem Kn^1 na Eq. (243), tem-se

$$\begin{aligned}
 \partial_t^{(1)} \sum_i f_{i(0)}^{(p)} &= - \underbrace{\partial_t^{(0)} \sum_i f_{i(1)}^{(p)}}_{=0} - \nabla_x \cdot \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i - \frac{(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x)^2 \sum_i f_{i(0)}^{(p)}}{2}, \\
 \partial_t^{(1)} \rho^{(p)} &= -\tau^{(p)} \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) - \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \nabla_x \cdot \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} - \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) + \\
 &\quad + \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \sum_p \nabla_x \cdot \left(\tau^{(p)} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} - \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) + \left(\frac{1}{2} + \tau^{(p)} \right) \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right) \\
 \partial_t^{(1)} \rho^{(p)} &= - \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u}))
 \end{aligned}$$

Balanço de massa (p) para Kn^1

(260)

e

$$\underbrace{\partial_t^{(1)} \rho^{(p)}}_{=0} = 0, \tag{261}$$

Balanço da mistura para Kn^1

onde o termo do lado direito da Eq. (260) descreve o fluxo de massa relativo entre os componentes (SHAN; DOOLEN, 1996), i.e.,

$$\begin{aligned}
 \rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u}) &= \tau^{(p)} (\rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) + \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} - \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) + \\
 &\quad - \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \sum_p \left(\tau^{(p)} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} - \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) \right) + \left(\frac{1}{2} + \tau^{(p)} \right) \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right).
 \end{aligned}$$

(262)

Separando os termos de ordem $Kn^{(1)}$ na Eq. (129) de balanço local da quantidade de movimento, tem-se

$$\begin{aligned}
 \partial_t^{(1)} \sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \partial_t^{(0)} \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \nabla_x \cdot \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i + \frac{(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x)^2 \sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i}{2} &= 0, \\
 \partial_t^{(1)} (\rho^{(p)} \mathbf{u}) + \partial_t^{(0)} (\rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u})) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) + \\
 + \frac{\nabla_x \cdot \left(\partial_t^{(0)} (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho^{(p)}) + \nabla_x \cdot (c_s^2 \rho^{(p)} (\tilde{\mathfrak{z}} \mathbf{u})) \right)}{2} &= 0,
 \end{aligned}$$

(263)

sendo $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i$ um parâmetro desconhecido. De modo a determinar o $\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i$, estende-se a análise para o balanço de momentos de segunda ordem, dado pela equação

$$\sum_i \left(\underbrace{f_i^{(p)}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1)}_{f_i^{(p)'}} - \underbrace{f_i^{(p)}(\mathbf{x}, t)}_{f_i^{(p)}} \right) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = \sum_i \frac{\left(f_i^{(p)} - f_{eq,i} \left(\rho_\sigma, \mathbf{u}_*^{(p)} \right) \right) \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i}{\tau^{(p)}} = 0, \quad (264)$$

substituindo as expansões assintóticas dadas pelas Eqs. (243), (72) e (73), e truncado nos termos de ordem Kn^0 , tem-se

$$\underbrace{\partial_t^{(0)}(\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho^{(p)}) + \nabla_x \cdot (c_s^2 \rho^{(p)}(\tilde{\mathfrak{z}} \mathbf{u})) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \left[\rho^{(p)}(\mathbf{u} \mathbf{u} - \mathbf{u}' \mathbf{u}') + \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right] +}_{\text{Balanço local do momento } (p) \text{ de segunda ordem para } (Kn^0)} \underbrace{+ \tilde{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}}_{(265)},$$

isolando o termo desconhecido,

$$\sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = -\tau^{(p)} \left(\partial_t^{(0)}(\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho^{(p)}) + \nabla_x \cdot (c_s^2 \rho^{(p)}(\tilde{\mathfrak{z}} \mathbf{u})) - \tilde{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' \right) + \underbrace{-\rho^{(p)}(\mathbf{u} \mathbf{u} - \mathbf{u}' \mathbf{u}') + \tau^{(p)2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}}_{(266)}.$$

Substituindo a Eq. (266) na Eq. (263), tem-se

$$\partial_t^{(1)}(\rho^{(p)} \mathbf{u}) + \partial_t^{(0)}(\rho^{(p)}(\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u})) = \nabla_x \cdot (\rho^{(p)}(\mathbf{u} \mathbf{u} - \mathbf{u}' \mathbf{u}')) - \nabla_x \cdot (\tau^{(p)} \tilde{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}') + \underbrace{-\nabla_x \cdot (\tau^{(p)2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) + \nabla_x \cdot \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \left(\partial_t^{(0)}(\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho^{(p)}) + \nabla_x \cdot (c_s^2 \rho^{(p)} \tilde{\mathfrak{z}} \mathbf{u} \mathbf{I}) \right)}_{(267)},$$

o ultimo termo do lado direito pode ser simplificado, com base nas Eqs. (250), (255) e (259), para

$$\partial_t^{(0)}(\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} + c_s^2 \rho^{(p)}) + \nabla_x \cdot (c_s^2 \rho^{(p)} \tilde{\mathfrak{z}} \mathbf{u} \mathbf{I}) = c_s^2 \rho^{(p)} \tilde{2} \nabla_x \mathbf{u} + \tilde{2} \mathbf{u} \nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)}) - \tilde{2} \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \mathbf{u} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \underbrace{+ \tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^e - \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u})}_{(268)}.$$

Deste modo, obtém-se á equação de balanço de quantidade de movimento do componente na forma

$$\begin{aligned} & \partial_t^{(1)}(\rho^{(p)}\mathbf{u}) + \partial_t^{(0)}(\rho^{(p)}(\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u})) + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)}(\mathbf{u}'\mathbf{u}' - \mathbf{u}\mathbf{u})) = \\ & + \nabla_x \cdot \left(\left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) (c_s^2 \rho^{(p)} (\nabla_x \mathbf{u} + (\nabla_x \mathbf{u})^T)) \right) - \nabla_x \cdot (\tau^{(p)} \tilde{\mathbf{g}}^{(p)} \mathbf{u}') - \nabla_x \cdot (\tau^{(p)2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) + \\ & + \nabla_x \cdot \left(\left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{\mathbf{u}} \nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)}) - \tilde{\frac{\rho^{(p)}}{\rho}} \mathbf{u} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^e - \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u}) \right) \right), \end{aligned}$$

Balanço de quantidade de movimento de (p) para (Kn^1)

(268)

sendo $\nu^{(p)} = c_s^2(\tau^{(p)} - 1/2)$ a viscosidade cinemática do componente. Somando sobre todos os componentes, tem-se o balanço da quantidade de movimento para a mistura em $Kn^{(1)}$ na forma

$$\begin{aligned} & \partial_t(\rho\mathbf{u}) + \nabla_x \cdot (\rho(\mathbf{u}'\mathbf{u}' - \mathbf{u}\mathbf{u})) = \nabla_x \cdot \left(\sum_p \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \rho^{(p)} (\nabla_x \mathbf{u} + \nabla_x \mathbf{u}) \right) + \\ & + \nabla_x \cdot \sum_p \left(\left(\frac{1}{2} - \tau^{(p)} \right) \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u}) \right) - \sum_p \left(\nabla_x \cdot (\tau^{(p)2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) + \nabla_x \cdot (\tau^{(p)} \tilde{\mathbf{g}}^{(p)} \mathbf{u}') \right) \\ & + \sum_p \left(\tau^{(p)} \nabla_x \cdot \left(\tilde{\mathbf{u}} \nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)}) - \tilde{\frac{\rho^{(p)}}{\rho}} \mathbf{u} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \tilde{2} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^e - \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u}) \right) \right) - \nabla_x \cdot \left(\frac{\tilde{2}}{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u} \right) \end{aligned}$$

Balanço de quantidade de movimento de (p) para (Kn^1)

(269)

sendo $\rho\nu = \sum_p (\tau^{(p)} - \frac{1}{2}) c_s^2 \rho^{(p)}$ a viscosidade cinemática da mistura.

Por fim, através dos somatórios das Eqs. (250), (251), (253), (259), (260), (261), (268) e (269), e desconsiderando erros característicos do *lattice* D2Q9 da ordem de Ma^3 , as equações de balanço do modelo pseudo-potencial são recuperados na forma

$$\begin{aligned} & \partial_t \rho^{(p)} + \nabla \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}) = -\tau^{(p)} \nabla \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} + \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \nabla \cdot \left(c_s^2 \nabla \rho^{(p)} - \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla \cdot \mathcal{P}_{sc} \right) + \\ & + \partial_x \cdot \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \left(\sum_p \left(\tau^{(p)} + \frac{1}{2} \right) \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} + \sum_p \tau^{(p)} \rho^{(p)} \frac{\nabla \cdot \mathcal{P}_{sc}}{\rho} - c_s^2 \sum_p \tau^{(p)} \nabla \rho^{(p)} \right), \\ & \partial_t \rho^{(p)} + \nabla \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}) = -\nabla_x \cdot (\rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u})), \end{aligned}$$

Balanço de massa do componente p

$$\underbrace{\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u})}_{\text{Balanço de massa da mistura}} = 0,$$

$$\begin{aligned}
& \partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{u}) + \partial_t^{(0)} (\rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u})) + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} (\mathbf{u}' \mathbf{u}' - \mathbf{u} \mathbf{u})) = -\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \\
& \quad + \nabla_x \cdot \left(\left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) (c_s^2 \rho^{(p)} (\nabla_x \mathbf{u} + (\nabla_x \mathbf{u})^T)) \right) + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e + \\
& \quad + \nabla_x \cdot \left(\left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) \left(\tilde{\mathbf{2}} \mathbf{u} \nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)}) - \tilde{\mathbf{2}} \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \mathbf{u} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \tilde{\mathbf{2}} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^e \right) \right) \\
& \quad \quad \quad \underbrace{- \nabla_x \cdot (\tau^{(p)} \tilde{\mathbf{2}} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}') - \nabla_x \cdot (\tau^{(p)2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)})}_{\text{Erros de discretização}} \\
& \quad \quad \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Balanço de quantidade de movimento do componente } p}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \partial_t^{(0)} \rho \mathbf{u} + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \underbrace{\nabla_x \cdot (\rho (\mathbf{u}' \mathbf{u}' - \mathbf{u} \mathbf{u}))}_{\text{Erros de discretização}} = -\nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e + \\
& + \nabla_x \cdot \left(\sum_p \left(\tau^{(p)} - \frac{1}{2} \right) c_s^2 \rho^{(p)} (\nabla_x \mathbf{u} + \nabla_x \mathbf{u}) \right) - \underbrace{\sum_p \left(\nabla_x \cdot (\tau^{(p)2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) + \nabla_x \cdot (\tau^{(p)} \tilde{\mathbf{2}} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}') \right)}_{\text{Erros de Discretização}} + \\
& \quad + \underbrace{\sum_p \left(\tau^{(p)} \nabla_x \cdot \left(\tilde{\mathbf{2}} \mathbf{u} \nabla_x (c_s^2 \rho^{(p)}) - \tilde{\mathbf{2}} \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \mathbf{u} \nabla_x \mathcal{P}_{sc} + \tilde{\mathbf{2}} \rho^{(p)} \mathbf{u} \mathbf{g}^e \right) \right) - \nabla_x \cdot \left(\frac{\tilde{\mathbf{2}}}{2} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u} \right)}_{\text{Erros de discretização}} \\
& \quad \quad \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Balanço de quantidade de movimento da mistura}}
\end{aligned}$$

C.2 Análise Proposta

Dado a interpretação das propriedades macroscópicas propostas no início deste capítulo, descrito pelas equações (247), (248) e (249), repete-se o processo de análise de Chapman-Enskog. Contudo, na presente análise os termos são separados em ordem de Knudsen, assim como formulado na Seção 3.3.2, consequentemente, a substituição da Eq. (243) na Eq. (126) com a separação em escalas é dada na forma

$$\begin{aligned}
(Kn^{(-1)}) : \quad & f_{i(0)}^{(p)} = f_{eq,i}^{(p)}(\rho^p, \mathbf{u}'), \\
(Kn^{(0)}) : \quad & \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) f_{i(0)}^{(p)} = -\frac{f_{i(1)}^{(p)}}{\tau^{(p)}} + F_{SC,i}^{(p)}, \\
(Kn^{(1)}) : \quad & \partial_t^{(1)} f_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) f_{i(1)}^{(p)} + \frac{\left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right)^2 f_{i(0)}^{(p)}}{2} = -\frac{f_{i(2)}^{(p)}}{\tau^{(p)}}, \quad (270)
\end{aligned}$$

ou

$$(Kn^{(1)}) : \quad \partial_t^{(1)} f_{i(0)}^{(p)} + \left(\partial_t^{(0)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x \right) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) f_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i}{2} \right) = -\frac{f_{i(2)}^{(p)}}{\tau^{(p)}}.$$

Recuperando a equação de balanço de massa local e da mistura para os termos de $Kn^{(0)}$, tem-se

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i f_{i(1)}^{(p)} + \sum_i F_{SC,i}^{(p)},}_{\text{Balanço de massa de } (p) \text{ para } (Kn^0)} \quad (271)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}') = 0,$$

e

$$\underbrace{\sum_p \left(\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) \right) = \sum_p \left(-\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i f_{i(1)}^{(p)} + \sum_i F_{SC,i}^{(p)} \right),}_{\text{Balanço de massa da mistura para } (Kn^0)} \quad (272)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u}') = 0.$$

Seguindo o mesmo processo para o balanço local da quantidade de movimento, tem-se

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \sum_i F_{SC,i}^{(p)} \mathbf{e}_i,}_{\text{Balanço de quantidade de movimento de } (p) \text{ para } (Kn^0)} \quad (273)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u}' + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} c_s^2 + \rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}') = -\frac{\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\tau^{(p)}} + \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)},$$

e

$$\underbrace{\sum_p \left(\partial_t^{(0)} \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \right) + \nabla_x \cdot \left(\sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i \right) \right) = -\frac{1}{\tau^{(p)}} \sum_i f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \sum_i F_{SC,i}^{(p)} \mathbf{e}_i,}_{\text{Balanço de quantidade de movimento da mistura para } (Kn^0)} \quad (274)$$

$$\partial_t^{(0)} \rho \mathbf{u}' + \nabla_x \cdot (\rho c_s^2 + \rho \mathbf{u}' \mathbf{u}') = \sum_p \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}.$$

sendo $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ o momento de ordem 1 de $f_{i(1)}^{(p)}$. Utilizando as Eqs. (254), (271) e (272) para reescrever as Eqs. (273) e (274), têm-se

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \mathbf{u}' + \mathbf{u}' \cdot \nabla_x \mathbf{u}' = -\frac{\nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2)}{\rho^{(p)}} - \frac{\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\rho^{(p)} \tau^{(p)}} + \mathbf{g}^{(p)},}_{\text{Balanço de quantidade de movimento de } (p) \text{ para } (Kn^0)} \quad (275)$$

e

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \mathbf{u}' + \mathbf{u}' \cdot \nabla_x \mathbf{u}' = -\frac{\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc}}{\rho} + \mathbf{g}^e.}_{\text{Balanço de quantidade de movimento da mistura para } (Kn^0)} \quad (276)$$

Utilizando as Eqs. (275) e (276) para isolar o termo $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$, obtém-se

$$\mathbf{m}_{(1)}^{(p)} = \tau^{(p)} \left(\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} - \nabla_x (\rho^{(p)} c_s^2) + \rho^{(p)} (\mathbf{g}^{(p)} - \mathbf{g}^e) \right), \quad (277)$$

substituindo a $\mathbf{m}_{(1)}^{(p)}$ na Eq. (273), tem-se a equação de balanço da quantidade de movimento do componente p na forma

$$\underbrace{\partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{u}' + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}')}_{\text{Balanço de quantidade de movimento de } (p) \text{ para } (Kn^0)} = -\frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e, \quad (278)$$

De modo a determinar os momentos desconhecido de $f_{i(1)}^{(p)}$, isola-se o termo na equação de ordem Kn^0 , i.e,

$$f_{i(1)}^{(p)} = -\tau^{(p)} \left(\partial_t^{(0)} f_{i(0)}^{(p)} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_x f_{i(0)}^{(p)} \right) + \tau^{(p)} F_{SC,i}^{(p)}. \quad (279)$$

Expandindo $f_{i(0)}^{(p)}$ e utilizando as Eqs. (271) e (273), obtém-se por manipulações algébricas:

$$f_{i(1)}^{(p)} = -\frac{\tau^{(p)} W_i}{c_s^2} \left(\rho^{(p)} \nabla_x \mathbf{u}' : \mathcal{Q} - \underbrace{\mathbf{e}_i \cdot \left(\nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}') \right)}_{\text{Termos da ordem de } Ma^2} + \frac{\mathbf{e}_i \cdot (\nabla_x \rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}') : \mathcal{Q}}{2c_s^2} + \right. \\ \left. - \underbrace{\frac{(\nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}' \mathbf{u}') : \mathcal{Q}}{2c_s^2}}_{\text{Termos da ordem de } Ma^3} - \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\tau^{(p)}} - \frac{\left((\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}) + (\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)})^T \right) : \mathcal{Q}}{\tau^{(p)} 2c_s^2} \right). \quad (280)$$

onde $\mathcal{Q} = \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 \mathbf{I}$. Considerando os termos da ordem de Ma^2 e Ma^3 desprezíveis na Eq. (280), tem-se

$$f_{i(1)}^{(p)} = -\frac{\tau^{(p)} W_i}{c_s^2} \left(\rho^{(p)} \nabla_x \mathbf{u}' : \mathcal{Q} - \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}{\tau^{(p)}} - \frac{\left((\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}) + (\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)})^T \right) : \mathcal{Q}}{\tau^{(p)} 2c_s^2} \right). \quad (281)$$

Estendendo a análise para os termos da ordem de Kn^1 , o balanço de massa do componente e da mistura são dados por

$$\begin{aligned} \partial_t^{(1)} \sum_i f_{i(0)}^{(p)} + \sum_i \left(\partial_t^{(0)} + (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_x) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) f_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i}{2} \right) \right) &= -\frac{\sum_i f_{i(2)}^{(p)}}{\tau^{(p)}} \\ \partial_t^{(1)} \rho^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} &= 0, \end{aligned} \quad (282)$$

Balanço de massa do componente p para (Kn^1)

e

$$\begin{aligned} \sum_p \left(\partial_t^{(1)} \sum_i f_{i(0)}^{(p)} + \sum_i \left(\partial_t^{(0)} + (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_x) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) f_{i(1)}^{(p)} + \frac{F_i}{2} \right) \right) \right) &= -\frac{\sum_i f_{i(2)}^{(p)}}{\tau^{(p)}} \\ \partial_t^{(1)} \rho + \sum_p \nabla_x \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \sum_p \left(\frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right) &= 0. \end{aligned}$$

Balanço de massa da mistura para (Kn^1)

(283)

Replicando o mesmo processo para análise do balanço da quantidade de movimento, têm-se

$$\begin{aligned} \partial_t^{(1)} \sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \sum_i \left(\partial_t^{(0)} + (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_x) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{F_i}{2} \mathbf{e}_i \right) \right) &= -\frac{\sum_i f_{i(2)}^{(p)} \mathbf{e}_i}{\tau^{(p)}}, \\ \partial_t^{(1)} \rho^{(p)} \mathbf{u}' + \left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \partial_t^{(0)} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \left(\left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) &+ \\ -\tau^{(p)} \rho^{(p)} \left(\nabla_x \mathbf{u}' + \left(\nabla_x \mathbf{u}' \right)^T \right) + \frac{1}{2} \partial_t^{(0)} \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} + \frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \left(\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right) &= 0, \end{aligned}$$

Balanço de quantidade de movimento do componente p para (Kn^1)

(284)

e

$$\begin{aligned}
& \sum_p \left(\partial_t^{(1)} \sum_i f_{i(0)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \sum_i \left(\partial_t^{(0)} + (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_x) \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) f_{i(1)}^{(p)} \mathbf{e}_i + \frac{F_i}{2} \mathbf{e}_i \right) \right) = - \frac{\sum_i f_{i(2)}^{(p)} \mathbf{e}_i}{\tau^{(p)}} \right), \\
& \partial_t^{(1)} \rho \mathbf{u}' + \sum_p \left(\partial_t^{(0)} \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \sum_p \left(\nabla_x \cdot \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) \right) + \\
& - \sum_p \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \tau^{(p)} \rho^{(p)} \left(\nabla_x \mathbf{u}' + \left(\nabla_x \mathbf{u}' \right)^T \right) \right) + \frac{1}{2} \partial_t^{(0)} \sum_p \left(\rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right) + \\
& + \frac{1}{2} \sum_p \left(\nabla_x \cdot \rho^{(p)} \left(\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right) \right) = 0,
\end{aligned}$$

Balanço de quantidade de movimento da mistura para (Kn^1)

(285)

Por fim, através dos somatórios das Eqs. (271), (272), (278), (274), (282), (283), (284) e (285), as equações de balanço do modelo pseudo-potencial são recuperados na forma

$$\partial_t \rho^{(p)} + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}') = - \underbrace{\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)}}_{\mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \approx \rho^{(p)} (\mathbf{u}^{(p)} - \mathbf{u}')} - \underbrace{\frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}}_{\text{Erro de discretização}},$$

Balanço de massa do componente p

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u}') = - \underbrace{\sum_p \left(\nabla_x \cdot \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) - \sum_p \left(\frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right)}_{\text{Erros de discretização}},$$

Balanço de massa da mistura

$$\begin{aligned}
& \partial_t \rho^{(p)} \mathbf{u}' + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}') = - \frac{\rho^{(p)}}{\rho} \nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} - \left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \partial_t \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \\
& - \left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \left(\left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) + \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) - \tau^{(p)} \rho^{(p)} \left(\nabla_x \mathbf{u}' + \left(\nabla_x \mathbf{u}' \right)^T \right) + \\
& + \rho^{(p)} \mathbf{g}^e - \frac{1}{2} \partial_t \rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} - \frac{1}{2} \nabla_x \cdot \rho^{(p)} \left(\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right),
\end{aligned}$$

Erros de Discretização

Balanço de quantidade de movimento do componente p

e

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho \mathbf{u}' + \nabla_x \cdot (\rho^{(p)} \mathbf{u}' \mathbf{u}') &= -\nabla_x \cdot \mathcal{P}_{sc} - \sum_p \left(\left(1 - \frac{1}{2\tau^{(p)}} \right) \nabla_x \cdot \tau^{(p)} \rho^{(p)} \left(\nabla_x \mathbf{u}' + \left(\nabla_x \mathbf{u}' \right)^T \right) \right) + \\
&+ \sum_p (\rho^{(p)} \mathbf{g}^e) - \underbrace{\sum_p \left(\partial_t \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right) - \sum_p \left(\nabla_x \cdot \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} + \left(\mathbf{u}' \mathbf{m}_{(1)}^{(p)} \right)^T \right) \right)}_{\text{Erros de discretização}} + \\
&\underbrace{-\frac{1}{2} \partial_t \sum_p (\rho^{(p)} \mathbf{g}^{(p)}) - \frac{1}{2} \sum_p \left(\nabla_x \cdot \rho^{(p)} \left(\mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{u}' + \tau^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \mathbf{g}^{(p)} \right) \right)}_{\text{Erros de discretização}}.
\end{aligned}$$

Balço de quantidade de movimento da mistura

APÊNDICE D – Condições de contorno

Os dois modelos de condições de contorno empregados na simulação da cavida de tampa deslizante são o *half-way bounce-back* (HW) e o *moments-based* (MB).

A condição de contorno de *half-way bounce-back* é descrita pela equação

$$f_{\bar{i}}(\mathbf{x}_b, t + \delta) = f_i(\mathbf{x}_b, t) - 2W_i \rho_0 \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_b}{c_s^2} \quad (286)$$

onde \mathbf{x}_b é a posição do nó sólido, ρ_0 a densidade inicial do fluido, e \mathbf{u}_b a velocidade da camada. Na Eq. 286 a função distribuição transmitida para o nó sólido da camada são invertidas e não colididas no processo de colisão, sendo apenas transmitidas novamente no próximo passo de tempo. A forma numérica de implementação para cada camada e quina pode ser vista na Tabela 8.

A segunda condição de contorno é um modelo baseado nas condições *moments-based* apresentadas no trabalho de Bazarin *et al.* (2021). Deste modo, é proposto no presente trabalho uma condição de contorno baseada em momentos para representação de condições de velocidades constantes, sendo caracterizada pela determinação dos momentos desconhecidos ρ e τ_{xy} , os demais momentos $\tau_{xx} = \tau_{yy} = 0$ são impostos nas camadas e quinas. A densidade ρ é determinada pela relação entre as Eqs. (89) e (90), enquanto a tensão τ_{xy} é dada por

$$\tau_{xy} = \sum_{i \in \mathcal{K}} (f_i - f_i^{eq}) + \sum_{i \in \mathcal{U}} f_i^{neq} \quad (287)$$

onde os conjuntos \mathcal{K} e \mathcal{U} indicam as direções *lattice* que as funções distribuição são conhecidas e desconhecidas, respectivamente. Nas quinas τ_{xy} é também considerado nulo e apenas ρ é resolvido considerando as Eqs. (89, 90, 166). A forma numérica de implementação para cada camada e quinar pode ser vista na Tabela 8.

Tabela 8 – Formulação das condições de contorno implementadas nas camadas e quinas do problema de tampa deslizante.

Norte (1)	HW	$f_4 = f_2 - 6W_2\rho(e_{x2}U_0)$ $f_7 = f_5 - 6W_5\rho(e_{x5}U_0)$ $f_8 = f_6 - 6W_6\rho(e_{x6}U_0)$	Nordeste (5)	HW	$f_7 = f_5$ $f_3 = f_1$ $f_4 = f_2$
	MB	$\rho = f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 + f_6)$ $\tilde{\tau}_{xy} = -\rho U_0/3 + 2(f_5 - f_6)$		MB	$\rho = f_0 + 2f_1 + 2f_2 + 4f_5$ $\tilde{\tau}_{xy} = 0$
Leste (2)	HW	$f_3 = f_1$ $f_6 = f_8$ $f_7 = f_5$	Suldeste (6)	HW	$f_6 = f_8$ $f_3 = f_1$ $f_2 = f_4$
	MB	$\rho = f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_1 + f_5 + f_8)$ $\tilde{\tau}_{xy} = 2(f_5 - f_8)$		MB	$\rho = f_0 + 2f_1 + 2f_4 + 4f_8$ $\tilde{\tau}_{xy} = 0$
Oeste (3)	HW	$f_1 = f_3$ $f_5 = f_8$ $f_8 = f_6$	Suldoeste (7)	HW	$f_5 = f_7$ $f_1 = f_3$ $f_2 = f_4$
	MB	$\rho = f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_8)$ $\tilde{\tau}_{xy} = 2(f_7 - f_6)$		MB	$\rho = f_0 + 2f_3 + 2f_4 + 4f_7$ $\tilde{\tau}_{xy} = 0$
Sul (4)	HW	$f_2 = f_4$ $f_5 = f_7$ $f_6 = f_8$	Noroeste (8)	HW	$f_8 = f_6$ $f_1 = f_2$ $f_4 = f_2$
	MB	$\rho = f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_4 + f_7 + f_8)$ $\tilde{\tau}_{xy} = 2(f_7 - f_8)$		MB	$\rho = f_0 + 2f_3 + 2f_2 + 4f_6$ $\tilde{\tau}_{xy} = 0$