

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA E DE MATERIAIS**

RICARDO LEITE MARTINS BAZARIN

**ESTUDO NUMÉRICO DO PROCESSO DE DESLOCAMENTO DE
FLUIDOS EM MEIO POROSO HETEROGÊNEO USANDO O MÉTODO
DE LATTICE BOLTZMANN**

DISSERTAÇÃO

**CURITIBA
2018**

RICARDO LEITE MARTINS BAZARIN

**SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO PROCESSO DE DESLOCAMENTO DE
FLUIDOS EM MEIO POROSO USANDO O MÉTODO DE LATTICE
BOLTZMANN**

Projeto de dissertação apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais da Universidade Tecnológica Federal do Paraná como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica. Área de Concentração: Ciências Térmicas.

Orientador: Prof. Dr. Silvio L. M. Junqueira

Coorientador: Prof. Dr. Christian Naaktgeboren

CURITIBA

2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

B362e Bazarin, Ricardo Leite Martins
2018 Estudo numérico do processo de deslocamento de fluidos
em meio poroso heterogêneo usando o método de Lattice-
Boltzmann / Ricardo Leite Martins Bazarin.-- 2018.
130 f.: il.; 30 cm.

Disponível também via World Wide Web.
Texto em português, com resumo em inglês.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Tecnológica
Federal do Paraná. Programa de Pós-Graduação em Engenharia
Mecânica e de Materiais, Curitiba, 2018.
Bibliografia: p. 103-108.

1. Mecânica dos fluidos. 2. Materiais porosos - Dinâmica
dos fluidos. 3. Método Lattice Boltzmann. 4. Engenharia
térmica. 5. Engenharia mecânica - Dissertações. I. Junqueira,
Silvio Luiz de Mello, orient. II. Naaktgeboren, Christian,
coorient. III. Universidade Tecnológica Federal do Paraná -
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de
Materiais, inst. IV. Título.

CDD: Ed. 22 -- 620.1

Biblioteca Ecoville da UTFPR, Câmpus Curitiba
Bibliotecária Lucia Ferreira Littiere - CRB 9/1271

TERMO DE APROVAÇÃO DE DISSERTAÇÃO Nº 320

A Dissertação de Mestrado intitulada: **Estudo numérico do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso heterogêneo usando o método de Lattice-Boltzmann**, defendida em sessão pública pelo Candidato **Ricardo Leite Martins Bazarin**, no dia 13 de abril de 2018, foi julgada para a obtenção do título de Mestre em Engenharia, área de concentração: Engenharia Térmica, e aprovada em sua forma final, pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais – PPGEM.

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Silvio Luiz de Mello Junqueira - Presidente - UTFPR

Prof. Dr. Paulo Cesar Philippi - PUC/PR

Prof. Dr. Admilson Teixeira Franco - UTFPR

Prof. Dr. José Aguiomar Foggiatto - UTFPR

A via original deste documento encontra-se arquivada na Secretaria do Programa, contendo a assinatura da Coordenação após a entrega da versão corrigida do trabalho.

Curitiba, ____ de _____ de 20 ____.

Carimbo e assinatura do Coordenador do Programa

RESUMO

No presente trabalho, o processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo é numericamente estudado com o propósito de investigar a eficiência de varredura durante o processo de recuperação do petróleo. Objetivando-se entender a influência dos parâmetros viscosos e capilares (razão de viscosidade e número de capilaridade), do efeito de molhabilidade (ângulo de contato estático) e das propriedades do meio poroso (porosidade e forma de poros). Para isto, o deslocamento de fluidos imiscíveis é simulado considerando a injeção de fluido em canal poroso preenchido por outro fluido. O canal poroso é idealizado para o plano bidimensional, onde o meio poroso heterogêneo é representado por ordens da geometria fractal do tapete de Sierpinski. As condições de contorno são prescritas como um escoamento plenamente desenvolvido do fluido injetado na entrada do canal, pressão constante na saída do canal e não deslizamento dos fluidos nas superfícies sólidas. Hipoteticamente, considera-se ambos fluidos newtonianos e incompressíveis, escoamento laminar, sistema isotérmico e molhabilidade homogênea. O deslocamento de fluidos através do meio poroso é modelado numericamente utilizando o método de *Lattice-Boltzmann*, que possui uma abordagem mesoscópica fundamentada na teoria cinética de partículas, consistindo de uma forma discretizada da equação de Boltzmann que simula o problema através da colisão e propagação de partículas. Os resultados obtidos demonstram concordância no comportamento dos efeitos do número de capilaridade e razão de viscosidade, com outros resultados observados na literatura, sendo possível identificar a transição entre os estados de *viscous fingering*, *capillary fingering* e deslocamento estável. Em relação à influência da molhabilidade é observado o aumento da eficiência de varredura com diminuição do ângulo de contato estático tanto para o processo de imbibição como o de drenagem. Na análise dos parâmetros relacionados à estrutura do meio poroso, em geral, é observada uma diminuição da eficiência de varredura com a redução da porosidade, porém observa-se o aumento da eficiência de varredura para a segunda ordem do tapete de Sierpinski, interpretado como resultado da diminuição das regiões de recirculação do escoamento devido a redução da porosidade.

Palavras-chave: deslocamento de fluidos imiscíveis, meio poroso, método de *Lattice-Boltzmann*.

ABSTRACT

In the present work, the process of immiscible fluids displacement in a heterogeneous porous medium is numerically studied for the purpose of investigating the sweep efficiency during the oil recovery process. The objective of this work is to understand the influence of viscous and capillary parameters (viscosity ratio and capillarity number), wetting effect (static contact angle) and porous media properties (porosity and pore shape). For this, the immiscible fluids displacement is simulated considering the injection of fluid into a porous channel filled by another fluid. The porous channel is idealized to two-dimensional plane, where the heterogeneous porous medium is represented by fractal geometry orders of the Sierpinski carpet. The boundary conditions are applied as a fully developed flow of the injected fluid at the inlet of the channel, constant pressure at the outlet of the channel and no slip of the fluids on the solid surfaces. The fluids displacement through the porous medium is modeled numerically using the Lattice-Boltzmann method, which has a mesoscopic approach based on kinetic particle theory, consisting of a discretized form of the Boltzmann equation that simulates the problem by collision and streaming of particles. The results obtained demonstrate agreement on the behavior of the capillary number and viscosity ratio effects, with other results observed in the literature, and it is possible to identify the transition between the states of viscous fingering, capillary fingering and stable displacement. In relation to the influence of the wettability it is observed the increase of the sweep efficiency with decrease of the static contact angle for both the imbibition and the drainage process. In the analysis of the parameters related to the structure of the porous medium, in general, a reduction of the sweep efficiency with the reduction of the porosity is observed, however, it is observed the increase of the sweep efficiency for the second order of the Sierpinski carpet, interpreted as a result of the decrease of the recirculation regions of the flow due to the reduction of the porosity.

Key-words: immiscible fluids displacement, porous media, Lattice-Boltzmann method.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1 – Processo de deslocamento de petróleo no reservatório (Adaptado de : Donaldson e Yen, 1989).	20
Figura 1.2 – Representação esquemática das fases do deslocamento de petróleo no substrato poroso. Inicialmente, na etapa 1, o fluido é injetado pelo lado esquerdo do meio poroso, nas etapas 2 e 3 observa-se o avanço do fluido no canal enquanto uma fração do petróleo permanece retida no meio, e por fim, na etapa 4 pode-se observar a percolação do fluido injetado. . .	21
Figura 1.3 – Esboço do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis através do canal poroso heterogêneo.	22
Figura 2.1 – Classificação da interface de interação de sistema bifásico.	27
Figura 2.2 – Balanço de força na interface de bolha estática.	28
Figura 2.3 – Configurações do ângulo de contato estático de uma gota sobre uma superfície sólida plana. a) fluido 2 fortemente molhante; b) fluido 2 molhante; c) fluido 1 molhante; d) fluido 1 fortemente molhante.	29
Figura 2.4 – Diagrama de tensões no ângulo de contato.	30
Figura 2.5 – Estados de deslocamento bifásico em meio poroso: a) <i>viscous fingering</i> ; b) <i>capillary fingering</i> ; c) deslocamento estável (Adaptado de : Tsuji, Jiang e Christensen (2016)).	32
Figura 2.6 – Diagrama de estado de deslocamento (Adaptado de : Lenormand, Touboul e Zarcone (1988)).	33
Figura 2.7 – Escala homogênea e escala do poro (Fonte : Meira, 2016).	35
Figura 2.8 – Escala de análise microscópica e macroscópica da interface fluido-porosa (Adaptado de : Meira, 2016).	36
Figura 3.1 – Micro modelo de meio poroso: (a) Representação esquemática; (b) Micro modelo em silício (Adaptado de : Chomsurin e Werth (2003)).	38
Figura 3.2 – O diagrama de fases indica as faixas de número de capilaridade e razão de viscosidade estudadas pelos seguintes trabalho, (◦) Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) (Numérico), (◊) Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) (Experimental), (△) Zhang <i>et al.</i> (2011b) (Experimental), (▷) Liu <i>et al.</i> (2013) (Numérico), (◁) Dong, Yan e Li (2011) (Numérico).	43
Figura 4.1 – Hipóteses simplificadoras de representação do meio poroso.	45
Figura 4.2 – Condição Inicial do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso.	47
Figura 4.3 – Condições de contorno do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso.	48

Figura 4.4 – Caracterização das ordens de interação da geometria fractal do tapete de Sierpinski: (a) Primeira ordem; (b) Segunda ordem; (c) Terceira ordem.	49
Figura 4.5 – Geometrias do canal poroso para a terceira ordem do tapete de Sierpinski.	49
Figura 4.6 – Condições de contorno do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso.	50
Figura 5.1 – Evolução do sistema no método de <i>Lattice-Gas Automata</i> : (a) colisão; (b) transmissão (Adaptado de: Krüger <i>et al.</i> (2017)).	51
Figura 5.2 – Conversão da função distribuição contínua em discreta, no espaço de Hilbert	53
Figura 5.3 – Retículos: 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)).	54
Figura 5.4 – Malha bidimensional de pontos para cada ordem (Fonte: Sbragaglia <i>et al.</i> (2007)).	61
Figura 5.5 – Representação da condição de contorno em fronteira: bounce-back padrão e entre <i>lattices</i>	62
Figura 5.6 – Condição de contorno de periodicidade.	63
Figura 5.7 – Fluxograma da estrutura computacional do método de <i>Lattice-Boltzmann</i> .	66
Figura 6.1 – Geometria e condições de contorno da bolha estática.	69
Figura 6.2 – Variação da densidade ρ_1 e ρ_2 , no centro do volume em relação à G_c : $M = 1$ (–); $M = 100$ (–); $M = 500$ (–).	69
Figura 6.3 – Campo de densidade do fluido 2: (a) faixa miscível $G_c \leq 2$; (b) faixa de transição $2 < G_c \leq 2,5$ e; (c) faixa imiscível $2,5 < G_c$	70
Figura 6.4 – Região de separação dos fluidos na interface de interação: (a) Densidade total do meio, $\rho = \rho_1 + \rho_2$; (b) Densidade ao longo de x em $y = H/2$. . .	70
Figura 6.5 – Variação da diferença de pressão em relação ao raio da bolha, para diferentes razões de viscosidade.	71
Figura 6.6 – Variação da tensão interfacial em relação ao coeficiente de coesão. . . .	72
Figura 6.7 – Geometria e condições de contorno do escoamento de fluidos paralelos imiscíveis entre placas planas.	73
Figura 6.8 – Comparação dos perfis velocidade numérico (o) e analítico (–), para faixa de $2 \cdot 10^{-2} \leq M \leq 10^2$. O perfil de velocidade é apresentado na forma adimensional, onde u é dividido pela velocidade analítica no centro do canal $u_{ana}(L/2, H)$	74
Figura 6.9 – Geometria e condições de contorno do deslocamento de fluidos imiscíveis.	75
Figura 6.10 – Comparação entre os resultados do presente trabalho e de Kang, Zhang e Chen (2004). Os intervalos de tempo para $Ca = 2,38 \cdot 10^{-2}$, $Ca = 1,19 \cdot 10^{-1}$ e $Ca = 2,38 \cdot 10^{-1}$, são 5000, 1000 e 500[s] ^{LB} , respectivamente.	76

Figura 6.11–Geometria e condições de contorno do problema de ângulo de contato estático.	78
Figura 6.12–Medição geométrica do ângulo de contato estático.	78
Figura 6.13–Valores do ângulo de contato estático (θ_c) pelo coeficiente de adesão (G_{ads}), para diferentes valores de G_c	79
Figura 6.14–Geometria da gota, onde o fluido 1 e o fluido 2 são representados pela cor branca e preta, respectivamente.	80
Figura 6.15–Valores de ângulo de contato estático pela variação (θ_c) pelo coeficiente de adesão (G_{ads}), para diferentes viscosidades e razão de viscosidades.	80
Figura 7.1 – Comparação da evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações ($[s]^{LB}$), para os canais porosos normal (a) e estendido (b). As cores branca, preta e cinza, representam o fluido injetado, fluido deslocado e a matriz sólida, respectivamente. A região em vermelho destaca a área de cálculo da eficiência de varredura no canal estendido.	85
Figura 7.2 – Faixas de análise do número de capilaridade e da razão de viscosidade por Zhang <i>et al.</i> (2011b) e pelo presente trabalho.	87
Figura 7.3 – Representação do processo de deslocamento para faixa de variação do número de capilaridade e da razão de viscosidade, no ponto de eficiência de varredura ($t = [s]^{LB}$).	88
Figura 7.4 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento de <i>viscous fingering</i> ($Ca = 10^{-2}$) e de <i>capillary fingering</i> ($Ca = 10^{-4}$), para $M = 1/10$	89
Figura 7.5 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento de deslocamento estável ($Ca = 10^{-2}$) e de <i>capillary fingering</i> ($Ca = 10^{-4}$), para $M = 20$	90
Figura 7.6 – Valores da eficiência de varredura pelo número de capilaridade, obtidos pelo presente trabalho, por Zhang <i>et al.</i> (2011b) e por Bandara <i>et al.</i> (2013), para diferentes razões de viscosidade.	91
Figura 7.7 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento de <i>viscous fingering</i> ($M = 1/10$) e de deslocamento estável ($M = 20$), para $Ca = 10^{-2}$	92
Figura 7.8 – Valores da eficiência de varredura pela razão de viscosidade obtidos pelo presente trabalho e por Zhang <i>et al.</i> (2011b), para diferentes números capilaridade.	92
Figura 7.9 – Representação do processo de deslocamento para variação de $0^\circ \leq \theta_c \leq 90^\circ$, no ponto de eficiência de varredura constante em $t = 6, 0.10^4 [s]^{LB}$	93
Figura 7.10–Valores da eficiência de varredura em função ângulo de contato estático para processo de imbibição.	94
Figura 7.11–Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\theta_c = 90^\circ$ e $\theta_c = 0^\circ$	94

Figura 7.12–Representação do processo de deslocamento para variação de $90^\circ \leq \theta_c \leq 180^\circ$ no ponto de eficiência de varredura constante em $t = 6, 0.10^4$.	95
Figura 7.13–Valores da eficiência de varredura pelo ângulo de contato estático para o processo de drenagem.	95
Figura 7.14–Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\theta_c = 90^\circ$ e $\theta_c = 180^\circ$.	96
Figura 7.15–Representação do processo de deslocamento para variação de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,88$ no ponto de eficiência de varredura constante ($t = 120000[s]^{LB}$).	97
Figura 7.16–Representação das linhas de corrente para variação de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,88$, no ponto de eficiência de varredura constante em $t = 120000[s]^{LB}$.	97
Figura 7.17–Valores da eficiência de varredura pela porosidade para a primeira ordem do tapete de Sierpinski.	98
Figura 7.18–Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\phi = 0,88$ e $\phi = 0,5$.	98
Figura 7.19–Representação do processo de deslocamento para a segunda ordem do tapete de Sierpinski na faixa de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,79$. O ponto de eficiência de varredura constante é dado em $t = 120000[s]^{LB}$.	99
Figura 7.20–Valores da eficiência de varredura pela porosidade da segunda ordem do tapete de Sierpinski.	99
Figura 7.21–Representação das linhas de corrente para a segunda ordem do tapete de Sierpinski na faixa de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,79$. O ponto de eficiência de varredura constante é dado em $t = 120000[s]^{LB}$.	100
Figura 7.22–Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\phi = 0,79$ e $\phi = 0,5$.	100
Figura 7.23–Representação do processo de deslocamento para as três primeiras ordens do tapete de Sierpinski, no ponto de eficiência de varredura constante.	101
Figura 7.24–Valores da eficiência de varredura pela porosidade para as três primeiras ordens do tapete de Sierpinski.	101
Figura 7.25–Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para as três primeiras ordens do tapete de Sierpinski.	102
Figura C.1 – Refinamento de dt para malha fixa 50×50 , em toda faixa simulável de G_c .	126
Figura C.2 – Teste de refinamento de dx em toda faixa simulável de G_c .	126
Figura C.3 – Evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para diferentes malhas	129
Figura C.4 – Evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para diferentes malhas.	131
Figura C.5 – Evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para diferentes malhas.	132

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 – Número de citações por artigo referente aos modelos multifásicos.	57
Tabela 5.2 – Comparação entre modelos multifásicos.	58
Tabela 5.3 – Pesos para aproximações até a décima ordem em casos bidimensionais.	61
Tabela 5.4 – Pesos para aproximações de até décima ordem em casos bidimensionais.	64
Tabela 6.1 – Erro percentual médio entre os perfis analíticos e numéricos, para variação de M	73
Tabela 6.2 – Comparação dos parâmetros geométricos adimensionais obtidos no presente trabalho com os obtidos por Kang, Zhang e Chen (2004), em $5000[s]^{LB}$	77
Tabela 7.1 – Parâmetros de análise da influência do número de capilaridade e razão de viscosidade	82
Tabela 7.2 – Parâmetros de análise da influência da molhabilidade	83
Tabela 7.3 – Parâmetros de análise da influência da porosidade e forma de poro	83
Tabela A.1 – Notações escalar, vetorial, tensorial e produtos.	112
Tabela C.1 – Relação de escala aplicada ao teste de imiscibilidade.	123
Tabela C.2 – Relação de escala aplicada ao teste de variação de r_b para obtenção da tensão interfacial.	124
Tabela C.3 – Relação de escala aplicada ao teste de variação de G_c para obtenção das tensões interfaciais.	124
Tabela C.4 – Comparação de $u(L/2, H)$ no refinamento de dt para $G_c = 4$	125
Tabela C.5 – Comparação de $u(L/2, H)$ para o refinamento dx em $G_c = 5, 5$	127
Tabela C.6 – Relação de escala aplicada a variação de M no escoamento de dois fluidos paralelos entre placas planas.	127
Tabela C.7 – Relação de escala aplicada por Kang, Zhang e Chen (2004).	128
Tabela C.8 – Teste de malha para o caso crítico de deslocamento de fluidos ($M = 10$ e $Ca = 0, 256$).	128
Tabela C.9 – Teste de malha para o ângulo de contato estático.	129
Tabela C.10 – Relação de escala aplicada a malha de referência 200×100	129
Tabela C.11 – Comparação da eficiência de varredura.	130
Tabela C.12 – Relação de escala aplicada a malha de referência 144×576	130
Tabela C.13 – Comparação da eficiência de varredura.	131
Tabela C.14 – Relação de escala aplicada a malha de referência 288×1152	131
Tabela C.15 – Comparação da eficiência de varredura.	132
Tabela C.16 – Relação de escala aplicada a malha de referência 432×1728	132

LISTA DE SÍMBOLOS

c_s	fator de escala	$[-]$
Ca	número de capilaridade	$[-]$
dx	fator de escala espacial	$[m]$
dt	fator de escala temporal	$[s]$
dm	fator de escala de massa	$[kg]$
d	diâmetro	$[m]$
D	dimensão	$[-]$
e	vetor velocidade de rede	$[-]$
E	erro	$[-]$
f	função distribuição	$\left[\left(\frac{1}{m^D} \right) \left(\frac{m}{s} \right)^D \right]$
\mathbf{f}	força por unidade de volume	$[N/m^3]$
F	termo de força externa	$\left[\left(\frac{1}{s \cdot m^D} \right) \left(\frac{m}{s} \right)^D \right]$
g	força por unidade de massa	$[N/kg]$
G_{ads}	coeficiente de adesão	$[-]$
G_c	coeficiente de coesão	$[-]$
H	altura	$[m]$
\mathcal{H}	polinômio de Hermite	$[-]$
\mathbf{I}	matriz identidade	$[-]$
K	permeabilidade	$[m^2]$
L	comprimento	$[m]$
M	razão de viscosidade dinâmica	$[-]$
M_ν	razão de viscosidade cinemática	$[-]$
Ma	número de Mach	$[-]$
\mathbf{n}	vetor unitário	$[-]$
p	pressão	$[Pa]$
\mathbf{P}	tensor pressão	$[Pa]$
r	raio	$[m]$
rel	razão de escala	$[m/s]$
Re	número de Reynolds	$[-]$
s	função indicador	$[-]$
Se	eficiência de varredura	$[-]$
t	tempo	$[s]$

\mathbf{u}	vetor velocidade	$[m/s]$
U	velocidade escalar na componente x	$[m/s]$
V	volume	$[m^3]$
x	coordenada cartesiana	$[m]$
\mathbf{x}	vetor posição	$[m]$
X	variável arbitrária	$[-]$
w	fator de ponderação de força	$[-]$
W	fator de ponderação	$[-]$
y	coordenada cartesiana	$[m]$
z	coordenada cartesiana	$[m]$

Letras Gregas

γ	tensão interfacial	$[N/m]$
Γ	escala de tempo	$[s]$
δ	passo de tempo	$[-]$
ϵ	energia cinética de flutuação	$[N.m]$
ε	relação do comprimento de escala	$[-]$
θ_c	ângulo de contato estático	$[N/m]$
Θ	desvio relativo de temperatura	$[-]$
κ	curvatura da interface	$[m^{-1}]$
μ	viscosidade dinâmica	$[Pa.s]$
ν	viscosidade cinemática	$[m^2/s]$
ξ	vetor velocidade da partícula	$[m/s]$
ρ	densidade	$[kg/m^3]$
∇	operador Nabla	$[-]$
ϕ	porosidade	$[-]$
τ	tempo de relaxação	$[s]$
χ	relação da escala de tempo	$[-]$
ω	função peso	$[-]$
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>Da</i>	referente à Darcy
<i>e</i>	referente escala
<i>fi</i>	referente ao fluido injetado
<i>finger</i>	referente ao <i>finger</i>
<i>fd</i>	referente ao fluido deslocado
<i>g</i>	referente à gota
<i>i</i>	refente aos pontos de discretização
<i>med</i>	refente ao valor médio
<i>p</i>	refentes ao poro
<i>ref</i>	referente à um parâmetro de referência
<i>total</i>	refente 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

<i>eq</i>	referente ao estado de equilíbrio
<i>it</i>	referente à iteração
<i>LB</i>	referente à escala do método de <i>Lattice-Boltzmann</i>
<i>neq</i>	referente ao estado de não equilíbrio
$\hat{\quad}$	referente à função distribuição de segunda ordem no espaço-tempo
$\hat{\quad}$	referente aos parâmetro adimensionais na escala macroscópica
*	referente aos parâmetros adimensionais na escala mesoscópica

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Motivação	18
1.2	Processo de Recuperação	19
1.3	Caracterização do Problema	22
1.4	Abordagem do Problema	23
1.5	Objetivos	24
1.6	Organização do Trabalho	24
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	26
2.1	Sistemas Multifásicos	26
2.2	Tensão Interfacial	27
2.3	Molhabilidade	28
2.3.1	Equação de Young	30
2.3.2	Espalhamento Dinâmico	30
2.3.3	Molhabilidade Heterogênea	31
2.4	Estados de Deslocamento	31
2.5	Meio Poroso	34
2.5.1	Lei de Darcy	34
2.5.2	Escala de Análise	35
2.6	Eficiência de Varredura	36
2.7	Síntese do Capítulo	36
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	38
3.1	Trabalhos Experimentais	38
3.2	Trabalhos Numéricos	40
3.3	Síntese do Capítulo	43
4	FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	45
4.1	Hipóteses e Equações de Conservação	45
4.2	Condições de Contorno e Inicial	47
4.3	Geometrias	48
4.4	Síntese do Capítulo	50
5	MÉTODO DE LATTICE BOLTZMANN	51
5.1	Histórico	51

5.2	Equação de <i>Lattice-Boltzmann</i>	52
5.2.1	Discretização do Espaço de Velocidades	52
5.2.2	Discretização do Espaço-Tempo	54
5.3	Modelos Multifásicos	55
5.3.1	Modelo Potencial Inter-Partícula	58
5.3.2	Modelo Modificado	60
5.4	Condições de Contorno	61
5.4.1	<i>Bounce-back</i>	62
5.4.2	Condição de Contorno de Zou e He	62
5.4.3	Periodicidade	63
5.5	Relação de Escala	63
5.6	Teste de Malha	64
5.7	Estrutura do Código Computacional	65
5.8	Síntese do Capítulo	67
6	PROBLEMAS DE VERIFICAÇÃO	68
6.1	Bolha Estática	68
6.1.1	Teste de Imiscibilidade	68
6.1.2	Tensão Interfacial	71
6.2	Escoamento de Dois Fluidos Paralelos entre Placas Planas	72
6.3	Deslocamento de Fluidos Imiscíveis num Canal	75
6.4	Ângulo de Contato Estático	77
6.5	Síntese do Capítulo	81
7	RESULTADOS E DISCUSSÕES	82
7.1	Parâmetros de Análise do Problema	82
7.2	Considerações do Problema	84
7.3	Testes de Malha	86
7.4	Influência do Número de Capilaridade e Razão de Viscosidade	87
7.4.1	Análise do Número de Capilaridade	89
7.4.2	Análise da Razão de Viscosidade	91
7.5	Influência da Molhabilidade	92
7.5.1	Imbibição	93
7.5.2	Drenagem	94
7.6	Influência da Porosidade e Forma de Poros	96
7.6.1	Primeira Ordem do Tapete Sierpinski	97
7.6.2	Segunda Ordem do Tapete Sierpinski	98
7.6.3	Três Primeira Ordens do Tapete de Sierpinski	100
7.6.4	Síntese do Capítulo	102

8	CONCLUSÕES	104
8.1	Sugestões para Trabalhos Futuros	104
	REFERÊNCIAS	106
	APÊNDICE A – NOTAÇÕES	112
	APÊNDICE B – FUNDAMENTOS DA TEORIA CINÉTICA DOS GASES	113
B.1	Espaço de Fase	113
B.2	Função Densidade de Probabilidade	113
B.3	Equação de Liouville	114
B.4	Hierarquia BBGKY	114
B.5	Equação de Boltzmann	116
B.6	Função Distribuição de Equilíbrio	117
B.7	Modelo de Colisão	118
B.8	Propriedades Macroscópicas	119
B.9	Adimensionalização	120
B.10	Equações de Conservação	121
	APÊNDICE C – DETALHES DAS SIMULAÇÕES	123
C.1	Bolha Estática	123
C.1.1	Teste de Imiscibilidade	123
C.1.2	Tensão Interfacial	124
C.2	Escoamento de Dois Fluidos Paralelos entre Placas Planas	125
C.3	Deslocamento de Fluido Imiscível num Canal	127
C.4	Ângulo de Contato Estático	128
C.5	Teste 1: Efeito do Número de Capilaridade, Razão de Viscosidade e Molhabilidade	129
C.6	Teste 2: Variação da Porosidade para Primeira e Segunda ordem do Tapete de Sierpinski	130
C.7	Teste 3: Terceira ordem do tapete de Sierpinski	131

1 INTRODUÇÃO

Problemas que envolvem a interação de fluidos imiscíveis em contato com substratos sólidos estão presentes tanto na natureza como em processos industriais. Tais problemas foram observados desde a antiguidade, a exemplo do registro de Leonardo da Vinci na ascensão de líquidos em capilares estreitos (LYKLEMA, 2000). Com o desenvolvimento tecnológico, a utilização de métodos numéricos que possibilitam simulações realísticas e complexas, e de técnicas experimentais de visualização de fluidos e medições de velocidade, a análise de escoamentos de fluidos imiscíveis em contato com substratos sólidos vem sendo diversificadamente aplicada em áreas como engenharia de petróleo, hidrologia de águas subterrâneas, ciências do solo e desenvolvimento de energia geotérmica (UNVERDI; TRYGGVASON, 1992; WU, 2016; TORRECILLA, 2010).

Na interface de interação de dois ou mais fluidos imiscíveis com substratos sólidos ocorrem fenômenos de superfície que representam efeitos macroscópicos, como a molhabilidade e a capilaridade, amplamente estudados na literatura. Tais efeitos são representações macroscópicas das interações microscópicas de partículas presentes nos substratos sólidos e nos fluidos. A interação destas partículas resultam em competições de forças, sendo forças adesivas da interação fluido-sólido e forças coesivas presentes no interior de cada fluido (LYKLEMA, 2000).

Macroscopicamente, o efeito de molhabilidade segundo Craig (1971) refere-se ao fenômeno de contato entre duas fases fluidas com uma sólida, que resulta na tendência de um dos fluidos se espalhar sobre o outro ou aderir à superfície sólida. Já Agbalaka *et al.* (2008) definem a molhabilidade com a visão mais voltada para a engenharia de petróleo, sendo portanto a preferência de contato da superfície rochosa do reservatório de petróleo para um dos fluidos presentes. O efeito de capilaridade pode ser considerado como consequência da molhabilidade, em condições onde o substrato sólido passa a ter geometrias específicas como meios porosos e tubos (LYKLEMA, 2000).

1.1 Motivação

Segundo Muggeridge *et al.* (2014), na área de engenharia de petróleo tem-se tornado crescente a dificuldade de descoberta de novos reservatórios de petróleo. Em meio as descobertas de novos reservatórios, muitos permanecem inexplorados devido à localização em áreas remotas e sensíveis ambientalmente, dificultando a viabilidade de sua exploração tanto na parte tecnológica como financeira. Dentre os reservatórios em exploração pelo mundo a média da fração de petróleo recuperado fica entorno de 20% e 40%, esta baixa porcentagem é resultado de várias adversidades que ocorrem durante o processo de

recuperação (MUGGERIDGE *et al.*, 2014).

Visto a dificuldade da descoberta de novos reservatórios, a inviabilidade da exploração de reservatórios em áreas remotas e a baixa fração de recuperação do petróleo, o desenvolvimento de estudos que possibilitem o aumento da taxa de produção e conseqüentemente o aumento da fração de petróleo recuperado, contribuem para o prolongamento da viabilização do petróleo como fonte energética, enquanto outras fontes de energia alternativa são desenvolvidas (MUGGERIDGE *et al.*, 2014).

Entre as inúmeras adversidades que ocorrem durante o processo de recuperação do petróleo, uma das principais é caracterizada pela interação de fluidos imiscíveis em contato com substratos sólidos. Tal adversidade está presente nas etapas secundária e terciária do processo de recuperação, que simplificada, são baseadas na injeção de fluidos como água e gases específicos, nas formações rochosas porosas que constituem o reservatório (CRAIG, 1971; MUGGERIDGE *et al.*, 2014).

Um dos primeiros trabalhos, que relata a importância dos fenômenos que envolvem a interação de fluidos imiscíveis em meios porosos no processo de recuperação de petróleo por injeção de fluido, foi publicado por Buckley e Leverett (1942). Desde então, diversos trabalhos tem sido publicados analisando diferentes problemas e parâmetros, relacionados ao processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meios porosos.

1.2 Processo de Recuperação

Na indústria de petróleo, o processo de recuperação em reservatórios pode ser dividido em três etapas: primária, secundária e terciária, ou também chamada de melhoramento de recuperação de petróleo (*Enhanced Oil Recovery*) (CHAVENT; JAFFRÉ, 1986; DONALDSON; CHILINGARIAN; YEN, 1989; MUGGERIDGE *et al.*, 2014).

Na etapa primária de recuperação o reservatório, composto por uma formação rochosa porosa preenchida por petróleo e gás, é perfurado e o deslocamento do petróleo é dado pela diferença de pressão entre o reservatório e a atmosfera (CHAVENT; JAFFRÉ, 1986). A alta pressão do reservatório é resultante das forças de expansão dos gases, gravitacional, de empuxo em casos de invasão de água e forças expulsivas devido à compactação de rochas mal consolidadas do reservatório (DONALDSON; CHILINGARIAN; YEN, 1989).

No momento em que a diferença de pressão entre a atmosfera e o reservatório diminui, a taxa de recuperação do petróleo cai até uma faixa determinada onde a etapa primária é encerrada. Iniciando a etapa secundária tenta-se manter uma diferença de pressão entre o reservatório e a atmosfera pela injeção de fluidos no reservatório, de modo que o deslocamento de petróleo continue (DONALDSON; CHILINGARIAN; YEN, 1989). O reservatório é dividido em poços de injeção e produção, nos poços de injeção é injetado fluido no reservatório, geralmente água (miscível) ou gases específicos (nem sempre miscíveis), que empurra o petróleo presente na formação rochosa porosa para fora em

direção aos poços de produção, onde a duração desta etapa permanece até o ponto que o fluido injetado alcança os poços de produção (CHAVENT; JAFFRÉ, 1986). A Figura 1.1 ilustra a etapa secundária do processo nas fases de A até D, onde, na fase A é localizado o poço de injeção no ponto 5 e o meio poroso encontra-se preenchido por petróleo, na fase B o fluido é injetado e inicia-se o deslocamento do petróleo, na fase C o petróleo é recuperado pelos poços de produção nos pontos de 1 a 4, e na fase D pode-se observar o ponto em que o fluido injetado alcança os poços de produção deixando uma porcentagem de petróleo retida nas formações porosas e em regiões não alcançadas.

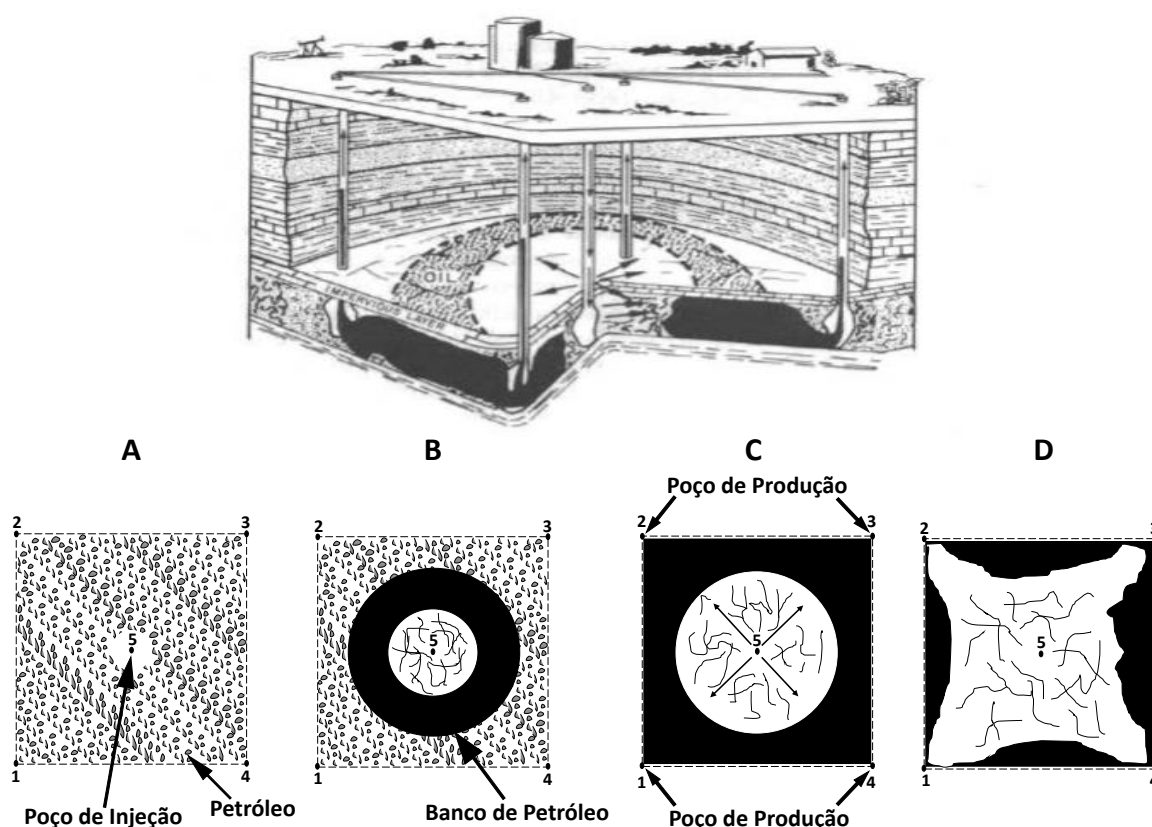


Figura 1.1 – Processo de deslocamento de petróleo no reservatório (Adaptado de : Donaldson e Yen, 1989).

Segundo Chavent e Jaffré (1986), a etapa secundária permite a recuperação de até 40% do petróleo presente no início desta etapa, já o trabalho mais recente de Muggeridge *et al.* (2014) indica uma recuperação de até 70%. Porém, as frações de petróleo recuperadas na etapa secundária são influenciadas pelo fato de o fluido injetado não alcançar todas as regiões do reservatório. Adicionalmente, nas regiões alcançadas parte do petróleo permanece retido no meio poroso pela ação dos efeitos de molhabilidade e capilaridade. As influências destes efeitos no comportamento do deslocamento do petróleo são complexas e variam de acordo com as características do reservatório e do processo de injeção do fluido. A Figura 1.2 ilustra a influência dos efeitos de molhabilidade e capilaridade, no desenvolvimento do processo de deslocamento do fluido presente no meio poroso (representado pela cor preta)

por um fluido injetado (representado pela cor azul) pelo lado esquerdo. Pode-se observar em quatro etapas enumeradas a evolução do deslocamento, partindo da etapa inicial de injeção do fluido e indo até o ponto de percolação do fluido injetado. Nas ampliações do meio poroso é possível observar a presença de regiões não acessadas pelo fluido injetado e pontos de aderência do fluido deslocado em superfícies sólidas.

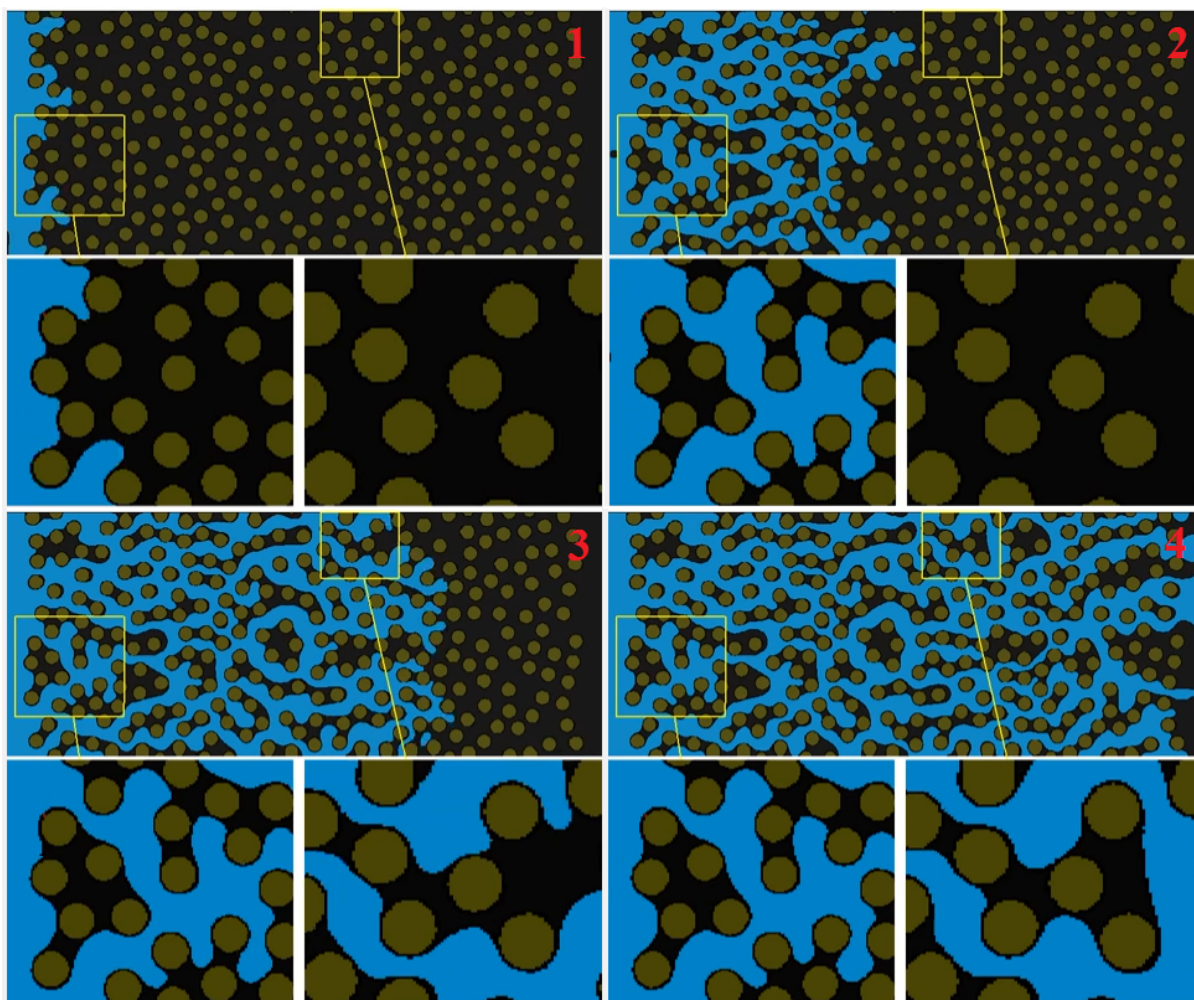


Figura 1.2 – Representação esquemática das fases do deslocamento de petróleo no substrato poroso. Inicialmente, na etapa 1, o fluido é injetado pelo lado esquerdo do meio poroso, nas etapas 2 e 3 observa-se o avanço do fluido no canal enquanto uma fração do petróleo permanece retida no meio, e por fim, na etapa 4 pode-se observar a percolação do fluido injetado.

Terminados os processos primário e secundário, parte da quantidade inicial de petróleo presente no reservatório ainda permanece retida. Desta forma, inicia-se a etapa terciária, a qual, segundo Donaldson e Yen (1989) pode ser dividida em três processos: químico, térmico e de deslocamento miscível. A maioria das técnicas dentro dos três processos citados, assim como a etapa secundária, consistem da injeção de fluidos no reservatório, porém com alguns diferenciais que buscam aumentar a quantidade de petróleo deslocado (DONALDSON; CHILINGARIAN; YEN, 1989; FULCHER-JR *et al.*, 1985; MUGGERIDGE *et al.*, 2014).

Outras técnicas denominadas de aperfeiçoamento de recuperação petróleo (*Improved Oil Recovery*) podem ser aplicadas na etapa terciária, ou também, denominadas como uma quarta etapa do processo de recuperação. O processo de aperfeiçoamento de recuperação consiste basicamente em identificar bolsões de petróleo através de uma análise sísmica e então perfurar novos poços (MUGGERIDGE *et al.*, 2014).

1.3 Caracterização do Problema

Nesta trabalho, a análise da interação de fluidos imiscíveis escoando no meio poroso é realizada através do estudo de deslocamento do fluido presente num canal poroso pela injeção de outro fluido. Tal canal poroso é formado por duas placas paralelas entre as quais se faz presente um meio poroso heterogêneo representado pela segunda ordem do tapete de Sierpinski, que é uma geometria fractal comumente utilizada na representação de meios porosos (DULLIEN, 1991; JIAN-HUA; BO-MING, 2011; BAZARIN; NAAKTGEBOREN; JUNQUEIRA, 2017). No interior do canal poroso é possível fazer a distinção das fase fluidas e sólidas, como ilustrado na Figura 1.3.

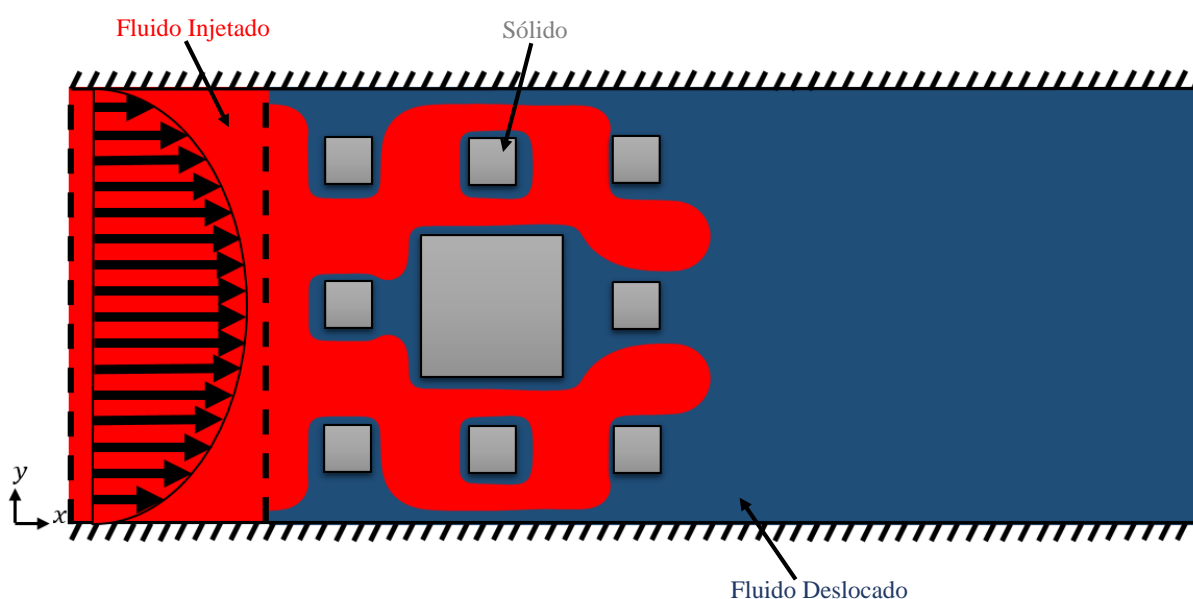


Figura 1.3 – Esboço do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis através do canal poroso heterogêneo.

Tal geometria remete às etapas secundária e terciária do processo de recuperação, onde o petróleo é deslocado através da formação porosa do reservatório pela injeção de outro fluido. A principal questão a ser investigada é a influência do meio poroso e dos efeitos de interação fluido-sólido no deslocamento dos fluidos, a qual se traduz na fração do fluido de interesse deslocado, ou seja, na eficiência do processo.

1.4 Abordagem do Problema

No presente trabalho a abordagem do problema em específico busca a representação dos fenômenos hidrodinâmicos presentes no processo de deslocamento de fluidos imiscíveis no meio poroso, de maneira que viabilize a análise e estudo de seus comportamentos. Para representação destes fenômenos este problema permite a utilização de três diferentes abordagens, sendo as metodologias analítica, experimental e numérica. Da parte analítica, segundo Wu (2016), tem uma limitada aplicação de soluções para problemas de escoamento de fluidos imiscíveis em meios porosos, devido à não-linearidade inerente às equações de conservação. Do ponto de vista experimental, mesmo com o desenvolvimento de técnicas que permitem uma melhor análise do problema, como mencionado por Unverdi e Tryggvason (1992), o alto custo relacionado à instrumentação e operação de bancadas experimentais, acaba deixando o experimento inviável em certos casos. Frente às dificuldades associadas tanto à técnica analítica quanto experimental, a solução numérica surge como caminho alternativo que permite não somente a variação de parâmetros específicos, mas também a análise do problema em diferentes escalas e representação de sistemas físicos relativamente complexos.

Ressalta-se, no entanto, que a utilização de métodos de solução numérica devem ser coerentes com o sistema físico investigado, de modo eficiente para permitir uma demanda computacional que viabilize a análise. Nesse contexto, a utilização de métodos de dinâmica molecular que simulam diretamente a interação microscópica de atração e repulsão de partículas do fluido se faz necessária. Para tanto a simulação das interações de partículas e determinação das propriedades macroscópicas através de médias estatísticas, necessitam de grande demanda computacional devido ao alto número de partículas necessárias para representação do fenômeno em pequenas escalas de espaço e tempo (SIKKENK *et al.*, 1987; ALLEN; TILDESLEY, 1989; RAHMAN, 2002; PHILIPPI *et al.*, 2012). Os métodos de discretização de equações puramente macroscópicos, como elementos finitos e volumes finitos, necessitam de menor demanda computacional, porém, devido a sua abordagem contínua são insensíveis a dinâmica molecular necessitando do auxílio de equações de estado (MOHAMAD, 2011; GUO; SHU, 2013). Já os métodos mesoscópicos preservam características tanto da dinâmica molecular, pois se baseiam na teoria cinética de partículas, como dos métodos macroscópicos na discretização do espaço, possuindo demanda computacional intermediária em relação aos dois métodos.

Em meio aos métodos mesoscópicos, o relativamente recente método de *Lattice-Boltzmann*, proposto por McNamara e Zanetti (1988), se destaca na literatura como ferramenta alternativa para simulação de sistemas físicos complexos. Fundamentado na teoria cinética de gases o método faz uso da abordagem lagrangiana baseada na distribuição das partículas através de *lattices*, também chamadas de retículos, que discretizam o espaço de velocidades, de modo que partículas interagem em colisões binárias e se deslocam para outros retículos vizinhos a cada passo de tempo. Apesar desta descrição simplificada o mé-

todo recupera apropriadamente as equações de conservação hidrodinâmicas, que podem ser ampliadas de maneira a representar problemas de escoamento em meios porosos e de escoamentos multifásicos (GUO; SHU, 2013).

1.5 Objetivos

Neste trabalho objetiva-se avaliar a eficiência e o comportamento do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis através de um canal poroso representado por ordens de iteração do tapete de Sierpinski. Para tanto, propõe-se desenvolver um código numérico utilizando o método de *Lattice-Boltzmann*, capaz de representar as interações fluido-fluido e fluido-sólido presentes no problema caracterizado. O desenvolvimento do código numérico é feito utilizando a linguagem de programação Fortran 95.

Especificamente, são realizadas análises paramétricas do problema, nas quais são estudadas as influências de parâmetros adimensionais relacionadas à região porosa (i.e., porosidade e forma de poros), às forças viscosas e capilares da interação fluido-fluido (i.e., razão de viscosidade e número de capilaridade) e ao efeito de molhabilidade da interação fluido-sólido (i.e., ângulo de contato estático), sobre a eficiência e o comportamento do processo de deslocamento dos fluidos.

No Quadro 1.1 pode-se observar os parâmetros adimensionais de influência, sendo seus conceitos e definições estabelecidos no decorrer deste trabalho.

Quadro 1.1 - Parâmetros de variação relacionados ao processo deslocamento de fluidos.

Razão de Viscosidade	M
Número de Capilaridade	Ca
Ângulo de Contato Estático	θ_c
Porosidade	ϕ
Forma de Poros	Ordens de Iteração do Tapete de Sierpinski

As faixas de variação de cada parâmetro serão estabelecidas no Capítulo 7, com base nos resultados de verificação e numa pré-análise do problema. Dentre as faixas variadas destaca-se a variação dos parâmetros de porosidade e forma de poros, que estão diretamente relacionados pelas ordens de iteração da geometria fractal do tapete de Sierpinski.

1.6 Organização do Trabalho

Este trabalho está dividido em oito capítulos, incluindo o presente capítulo que apresenta o cenário e os objetivos. De maneira a atingir os objetivos propostos os demais capítulos

estão dispostos na seguinte forma:

- No capítulo 2 é apresentada a fundamentação teórica sobre o escoamento de fluidos imiscíveis em meios porosos, onde de forma objetiva apresenta-se definições e conceitos necessários para a construção do entendimento deste trabalho.
- Em seguida, no capítulo 3 de revisão bibliográfica, é feita uma revisão de trabalhos da literatura relacionados ao processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso, tanto como trabalhos que contribuíram para o desenvolvimento do presente estudo.
- A formulação do problema é feita no capítulo 4, abordando as hipóteses de simplificação, equações de conservação, condições de contorno e inicial, geometrias e objetivos específicos do trabalho.
- O método de *Lattice-Boltzmann* é descrito no capítulo 5, destacando o surgimento histórico do método, aspectos de discretização a partir da equação de Boltzmann, análise dos modelos de representação de sistemas multifásicos, descrição do modelo de potencial inter-partícula, modificações do modelo, condições de contorno, relação de escala, teste de malha e estrutura do código computacional.
- No capítulo 6 são exibidos os resultados de verificação necessários para a aplicação do método de *Lattice-Boltzmann* ao problema principal.
- No capítulo 7 são apresentados os resultados das simulações numéricas do processo de deslocamento de fluido imiscível em meio poroso. Adicionalmente é discutida a influência dos parâmetros adimensionais na eficiência de varredura, bem como no comportamento do processo de deslocamento através do meio poroso.
- Por último, no capítulo 8 é feita a conclusão do trabalho, sendo sugeridas diferentes oportunidades e aspectos, para a continuidade dos estudos e desenvolvimento de trabalhos futuros.
- Nos apêndices são abordadas as notações utilizadas, fundamentos da teoria cinética dos gases e detalhes das simulações.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

No presente capítulo destaca-se de forma objetiva definições e conceitos, necessários para o desenvolvimento deste trabalho. Nas seções a seguir são abordados conceitos referentes à sistemas multifásicos, tensão interfacial, molhabilidade, estados de deslocamento, meios porosos e eficiência de varredura.

2.1 Sistemas Multifásicos

Sistemas multifásicos podem ser definidos como meios onde ocorrem interações de diferentes fases da matéria de um único componente ou de diferentes componentes, sendo que as fases consideradas neste trabalho são a gasosa, a líquida e a sólida (ISHII; HIBIKI, 2010). Um exemplo de sistema multifásico de único componente é a interação de água líquida e vapor de água, já a interação de diferente componentes, denominado de sistema multicomponente, é exemplificada pela interação de gás carbônico e água líquida, no caso dois diferentes componentes, CO₂ gasoso e H₂O líquido.

As classificações dos sistemas multifásicos envolvem tanto a interface de interação entre as fases, quanto os tipos e quantidades de fases envolvidas. Considerando os tipos de interface de interação, os sistemas classificam-se como sendo disperso, onde o sistema consiste de finitas partículas, gotas ou bolhas distribuídas em fase contínua e conectada; ou como separado, onde o sistema consiste de fases separadas pela interface contínua (ISHII; HIBIKI, 2010). Na Figura 2.1 é possível observar a ilustração simples em duas fases para os sistemas disperso e separado.

As classificações no que se refere à quantidade de fases envolvidas nos sistemas são determinadas como bifásico, se possui apenas duas fases envolvidas, trifásico, com três fases envolvidas, e assim por diante de acordo com a quantidade de fases consideradas. Ishii e Hibiki (2010) classificam como sistema bifásico o conjunto de fases de interação líquido-gás, gás-sólido, líquido-sólido e líquido-líquido imiscíveis. Mesmo que tecnicamente a interação de líquidos imiscíveis não seja um caso bifásico estes autores a incluem na definição devido às semelhanças com relação aos fenômenos multifásicos.

Neste trabalho o foco é voltado para a interação de fluidos imiscíveis, os quais podem ser gás ou líquido, onde a presença do meio poroso no problema pode ser considerado tanto uma terceira fase (sólida) do sistema, como condição de contorno para a interação do sistema bifásico.

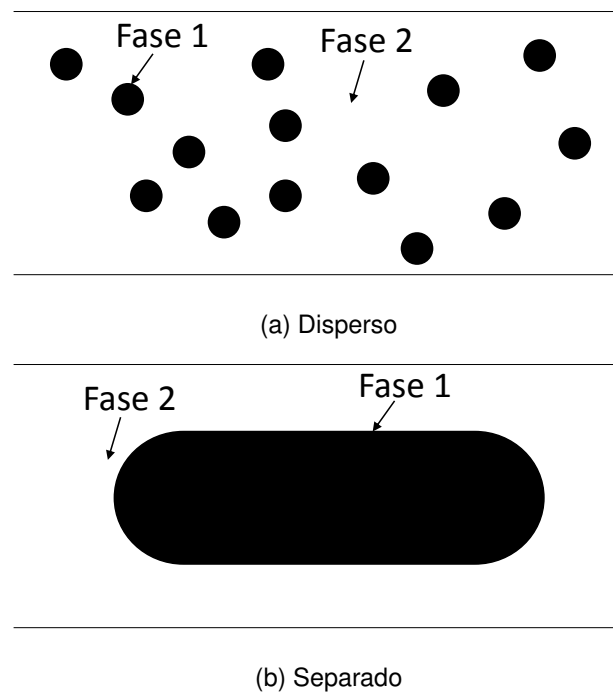


Figura 2.1 – Classificação da interface de interação de sistema bifásico.

2.2 Tensão Interfacial

Em sistemas multifásicos com interação de fluidos imiscíveis uma tensão na interface de contato das fases é observada. Tal tensão, denominada de tensão interfacial, resulta especificamente do nível de interação das partículas presentes na interface entre as diferentes fases. Conseqüentemente, na escala macroscópica a tensão interfacial é um parâmetro dependente das fases envolvidas e da temperatura do meio. Considerando o caso específico onde ocorre a interação isotérmica entre dois fluidos imiscíveis específicos, a tensão presente na interface dos fluidos pode ser considerada constante e medida mais facilmente, sendo que a utilização de interpretações tanto mecânicas como termodinâmicas, permitem medições da tensão interfacial (LYKLEMA, 2000).

A tensão interfacial pode ser encarada mecanicamente como a força necessária para estender a interface de interação dos fluidos. Portanto, aplicando um balanço de forças num sistema estático de interação de fluidos imiscíveis, Young e Laplace obtiveram a relação, dada por

$$\Delta p = \gamma \left(\frac{1}{r_x} + \frac{1}{r_y} \right), \quad (2.1)$$

onde $\Delta p = p_1 - p_2$ é a diferença de pressão entre o fluido 1 e do fluido 2, γ é a tensão interfacial entre os fluidos, r_x é o raio de curvatura no plano x e r_y é o raio de curvatura no plano y . A Equação 2.1 é denominada de equação de Young-Laplace (LYKLEMA, 2000). Para o caso específico de bolha estática bidimensional imersa em outro fluido, como mostra

a Figura 2.2, a Equação 2.1 se reduz a

$$\Delta p = \frac{\gamma}{r}. \quad (2.2)$$

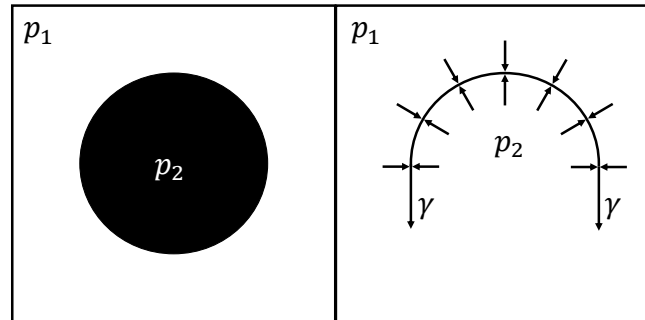


Figura 2.2 – Balanço de força na interface de bolha estática.

2.3 Molhabilidade

O efeito de molhabilidade, presente em sistemas multifásicos, é um fenômeno resultante do contato de dois ou mais fluidos imiscíveis com um substrato sólido, sendo que, na escala microscópica pode ser observado como a interação entre as partículas presentes nas diferentes fases, ou seja, fases fluidas e sólida. Tais interações resultam na competição de forças coesivas de cada fluido imiscível (i.e. força proporcional a tensão interfacial dos fluidos), com forças adesivas da interação de cada fluido com o substrato sólido. Na escala macroscópica a interação entre fluidos imiscíveis e o substrato sólido apresenta uma tendência de um fluido se espalhar sobre outro aderindo à superfície do substrato sólido. Tal efeito é observado em problemas como o espalhamento de uma gota sobre a superfície, ascensão de fluidos em tubos capilares e penetração de fluido em meios porosos (CRAIG, 1971; LYKLEMA, 2000; AGBALAKA *et al.*, 2008).

A ilustração do efeito de molhabilidade é frequentemente exemplificada pelo problema da gota de um fluido 1 imersa num fluido 2 onde ambos estão em contato com uma superfície sólida plana, conforme ilustrado na Figura 2.3. Quando os fluidos 1 e 2 atingem o estado de equilíbrio em contato com a superfície sólida, pode ser observado um ângulo de contato estático θ_c definido por uma linha tangente entre as fases fluidas 1 e 2, e a fase sólida. O ângulo de contato estático é um parâmetro comumente utilizado na medição da molhabilidade, visto que, na Figura 2.3 é possível observar a esquematização da medição da molhabilidade pelo θ_c , partindo do ponto onde o fluido 2 é fortemente molhante até o ponto onde o fluido 1 é fortemente molhante (CRAIG, 1971), nas configurações pode-se observar os seguintes casos:

- (a) A gota toca a superfície sólida atingindo ângulo de contato estático igual 180° . Nesta configuração o fluido 2 é dito fortemente molhante e o fluido 1 fortemente não molhante;
- (b) A gota se espalha sobre a superfície sólida atingindo ângulo de contato estático maior que 90° . Nesta configuração o fluido 2 é dito molhante e o fluido 1 não molhante;
- (c) A gota se espalha sobre a superfície sólida atingindo ângulo de contato estático menor que 90° . Nesta configuração o fluido 1 é dito molhante e o fluido 2 não molhante;
- (d) A gota se esparrama sobre a superfície sólida atingindo ângulo de contato estático igual a 0° . Nesta configuração o fluido 1 é dito fortemente molhante e o fluido 2 fortemente não molhante.

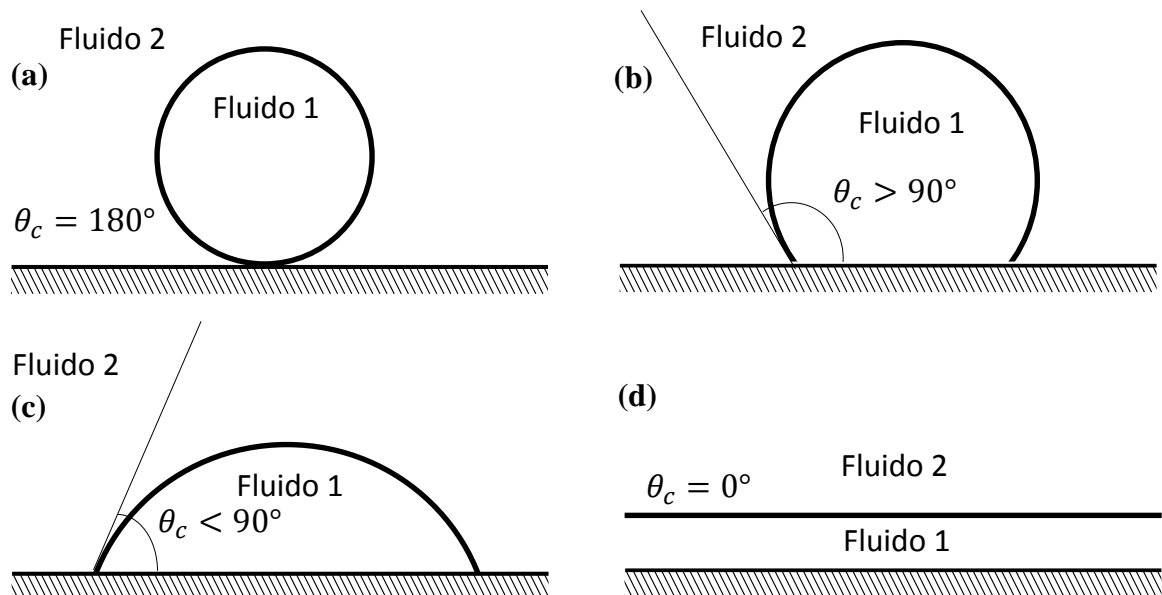


Figura 2.3 – Configurações do ângulo de contato estático de uma gota sobre uma superfície sólida plana. a) fluido 2 fortemente molhante; b) fluido 2 molhante; c) fluido 1 molhante; d) fluido 1 fortemente molhante.

Quando $\theta_c = 90^\circ$ a molhabilidade é considerada intermediária, ou seja, não existe preferência de contato, entre fluido e sólido, para nenhum dos fluidos.

Entre os métodos de medição da molhabilidade o ângulo de contato estático é considerado o principal, porém outras técnicas como exame microscópica, métodos de permeabilidade relativa e métodos de flutuação, podem ser utilizados de acordo com as necessidades do problema analisado (ANDERSON *et al.*, 1986).

2.3.1 Equação de Young

O ângulo de contato estático entre os fluidos e a superfície sólida também pode ser estimado analiticamente através da equação de Young, dada por

$$\cos(\theta_c) = \frac{\gamma_{s2} - \gamma_{s1}}{\gamma_{12}}, \quad (2.3)$$

onde γ_{12} , γ_{s1} e γ_{s2} , representam a tensão interfacial entre os fluidos 1 e 2, a tensão interfacial entre o fluido 1 e a superfície sólida, e a tensão interfacial entre o fluido 2 e a superfície sólida, respectivamente (LYKLEMA, 2000). Na Figura 2.4 é possível observar a relação entre os vetores de tensão interfacial e o ângulo de contato estático.

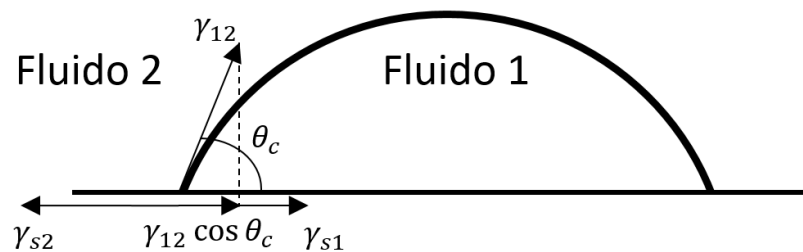


Figura 2.4 – Diagrama de tensões no ângulo de contato.

2.3.2 Espalhamento Dinâmico

Diferente dos casos estáticos, como na medição do ângulo de contato, alguns problemas exigem análise da molhabilidade em condições dinâmicas. Experimentos em condições dinâmicas envolvem algumas dificuldades, mas em geral, buscam estabelecer relações para variação da área de contato entre o líquido e o sólido ou do ângulo de contato em função do tempo (DUSSAN, 1979). Não obstante, no presente trabalho o interesse não é analisar a variação de contato entre fluido e sólido ou a formação de ângulo de contato dinâmico no deslocamento de fluidos imiscíveis em formações porosas e sim o resultado da relação entre as forças viscosas resultantes do processo dinâmico e forças interfaciais presentes na interface de deslocamento dos fluidos.

No caso de escoamentos forçados em canais e meios porosos, com duas fases fluidas, a relação entre forças viscosas resultantes do escoamento e forças interfaciais também chamadas de forças capilares, presentes na interface das diferentes fases fluidas, tornam-se importantes para análise do problema. Como já mencionado anteriormente, o efeito de capilaridade é consequência da molhabilidade para geometrias específicas do substrato sólido como meios porosos e tubos (LYKLEMA, 2000). Portanto, no presente trabalho a influência do efeito de capilaridade será determinada pelo parâmetro adimensional definido

como número de capilaridade, que possibilita a análise da razão entre forças viscosas e capilares,

$$Ca = \frac{U_{ref}\mu}{\gamma} \quad (2.4)$$

onde U_{ref} é a velocidade de referência, μ é a viscosidade dinâmica. Para casos de escoamento por diferença de pressão a razão entre as forças viscosas e capilares é rearranjada para representar o número de capilaridade, dado por

$$Ca = \frac{L_{ref}\Delta p}{\gamma} \quad (2.5)$$

onde L_{ref} é um comprimento de referência do problema (FULCHER-JR *et al.*, 1985; LENORMAND; TOUBOUL; ZARCONI, 1988; LYKLEMA, 2000). Algumas variações da Equação 2.4 podem ser feitas incorporando termos como porosidade e ângulo de contato estático, porém no presente trabalho o número de capilaridade será utilizado no formato apresentado.

2.3.3 Molhabilidade Heterogênea

Diversos estudos da molhabilidade de substratos sólidos são baseados em forças adesivas (entre sólido e fluido) constantes e uniformes, em qualquer ponto da superfície, caracterizando uma molhabilidade homogênea do substrato. Porém, a molhabilidade heterogênea está frequentemente presente em reservatórios de petróleo e estas distribuições não uniformes da molhabilidade permitem uma variedade de classificações, como a molhabilidade mista e fracional, que definem características do meio. Para mais detalhes das classificações ver McDougall, Sorbie *et al.* (1995) e Salathiel *et al.* (1973). Entretanto, a molhabilidade heterogênea é caracterizada pela variação das forças adesivas, podendo ter até regiões molhantes e não molhantes ao mesmo fluido, sendo que tal efeito de variação da molhabilidade ocorre devido à variações da composição química do substrato (MCDUGALL; SORBIE *et al.*, 1995).

2.4 Estados de Deslocamento

O deslocamento imiscível de fluidos através de meios porosos, como já mencionado, envolve a competição de forças capilares e viscosas. Consequentemente, a relação entre estas forças influencia diretamente o comportamento do deslocamento dos fluidos. No deslocamento de fluidos as forças capilares atuam localmente nas interfaces, enquanto as forças viscosas atuam através de toda a fase fluida. Deste modo, as forças viscosas envolvendo as fases fluidas são fundamentais para análise do processo. Portanto, a relação das forças viscosas é estimada pelo parâmetro adimensional de razão de viscosidade M ,

o qual pode ser calculada tanto em razão da viscosidade dinâmica como em razão da viscosidade cinemática,

$$M = \frac{\mu_{fi}}{\mu_{fd}}, \quad (2.6)$$

$$M_\nu = \frac{\nu_{fi}}{\nu_{fd}}, \quad (2.7)$$

onde ν é a viscosidade cinemática, M_ν é a razão de viscosidade cinemática e os subíndices fi e fd indicam fluido injetando e fluido deslocado, respectivamente (LENORMAND; TOUBOUL; ZARCONI, 1988; LIU *et al.*, 2013).

Segundo Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) três diferentes comportamentos ou estados, podem ser observados no processo de deslocamento de fluidos, sendo eles *viscous fingering*, *capillary fingering* e deslocamento estável. Na Figura 2.5 é possível observar a ilustração dos três diferentes estados num meio poroso bidimensional, sendo que a seta indica o lado de injeção do fluido não molhante. Visualmente o *viscous fingering* é caracterizado pela formação de múltiplos *fingers* que avançam na direção do escoamento percolando o canal com uma largura da escala do diâmetro do poro (Figura 2.5 a). Já o *capillary fingering* é representado por múltiplos *fingers* se espalhando através dos poros em todas as direções, até mesmo contra a direção do deslocamento, formando regiões de circulação que armazenam o fluido deslocado (Figura 2.5 b). Por último, o estado de deslocamento estável é caracterizado por uma frente de escoamento plana com algumas irregularidades da escala do diâmetro de poro (Figura 2.5 c) (LENORMAND; TOUBOUL; ZARCONI, 1988).

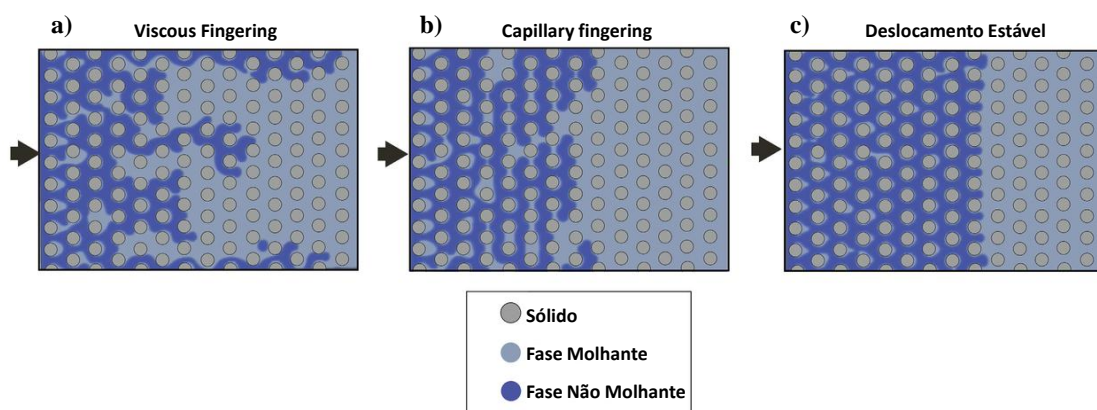


Figura 2.5 – Estados de deslocamento bifásico em meio poroso: a) *viscous fingering*; b) *capillary fingering*; c) deslocamento estável (Adaptado de : Tsuji, Jiang e Christensen (2016)).

A indicação dos estados de deslocamento pode ser feita através de um diagrama, utilizando os parâmetros adimensionais de razão de viscosidade M e número de capilaridade Ca (LENORMAND; TOUBOUL; ZARCONI, 1988). Na Figura 2.6 é possível observar o dia-

grama de indicação dos estados de deslocamento em *viscous fingering*, *capillary fingering*, deslocamento estável e zona de transição.

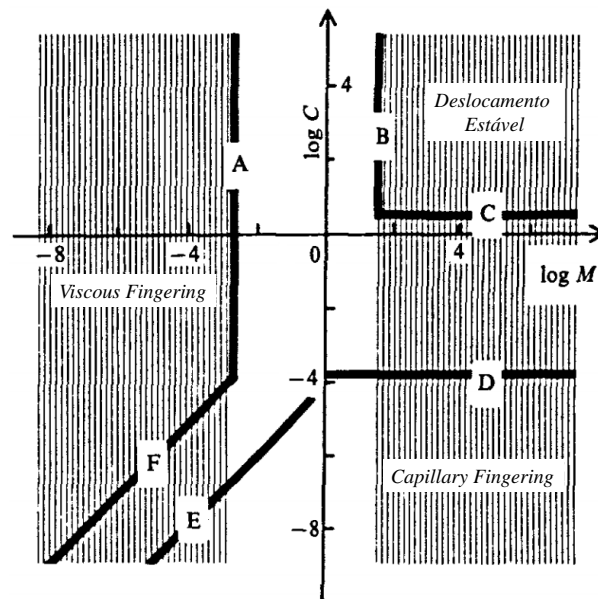


Figura 2.6 – Diagrama de estado de deslocamento (Adaptado de : Lenormand, Touboul e Zarccone (1988)).

A caracterização do estado de *capillary fingering* é determinada pelo deslocamento quase estático, onde as forças viscosas podem ser consideradas insignificantes com relação às forças capilares. Na Figura 2.6 pode-se observar que a faixa do diagrama onde $Ca \rightarrow 0$ o deslocamento tende a se tornar *capillary fingering*. A representação de tal fenômeno pode ser aproximada pela equação de Young-Laplace aplicada a tubo capilar, sendo que para pressão inicial p_0 o fluido injetado só atravessa poros com raios maiores que determinado r_0 (LENORMAND; TOUBOUL; ZARCONE, 1988).

No processo de deslocamento onde as forças viscosas dominam as forças capilares, ou seja $Ca \rightarrow \infty$, o deslocamento pode ser estável ou instável. O nível de instabilidade presente no deslocamento pode ser relacionado com a razão de viscosidade M dos fluidos envolvidos, sendo possível dois casos limites $M \rightarrow 0$ e $M \rightarrow \infty$. Fazendo $M \rightarrow 0$ o deslocamento se torna instável, resultando na formação *viscous fingering*, para o caso oposto onde $M \rightarrow \infty$ o deslocamento se torna estável (LENORMAND; TOUBOUL; ZARCONE, 1988). Na Figura 2.6 pode-se observar os dois estados na parte superior do gráfico, onde $Ca \rightarrow \infty$, o de *viscous fingering* à esquerda, na faixa onde $M \rightarrow 0$, e o de deslocamento estável à direita, para faixa de $M \rightarrow \infty$.

De acordo com a escolha dos parâmetros adimensionais M e Ca , também é possível atingir zonas de transição entre os três diferentes estados de deslocamento, como observado na Figura 2.6.

O processo de deslocamento também pode ser classificado quanto às características do fluido injetado e deslocado. De maneira que, quando o fluido injetado é o fluido molhante

e o fluido deslocado é o fluido não molhante o deslocamento é denominado de imbibição, já o inverso ou seja, o fluido injetado é o fluido não molhante e o fluido deslocado é o fluido molhante, o processo é denominado de drenagem (LENORMAND; ZARCONE; SARR, 1983). Para o caso de molhabilidade intermediária, o processo de deslocamento é considerado neutro.

2.5 Meio Poroso

Um meio poroso é representado por uma matriz sólida, rígida ou pouco deformável, com espaços vazios interligados, chamados de poros, por onde pode ocorrer o escoamento de um ou mais fluidos (WHITAKER, 1986). A razão entre os espaços vazios interconectados e o volume total da matriz sólida é chamada de porosidade, sendo dada pela equação

$$\phi = \frac{V_p}{V_{total}}, \quad (2.8)$$

sendo ϕ a porosidade, V_p o volume total de poros e V_{total} o volume total da matriz sólida.

2.5.1 Lei de Darcy

Henry Darcy (1803-1858) investigou experimentalmente o escoamento de fluido newtoniano através do meio poroso em um escoamento unidimensional, observando uma proporção entre a vazão volumétrica e a diferença de pressão. Tal proporção é representada pela permeabilidade que é independente das propriedades do fluido e dependente apenas das características geométricas do meio poroso. Posteriormente Hazen (1893) introduziu a influência da viscosidade do fluido que percola o meio poroso (LAGE, 1998). Assim a lei de Hazen-Darcy é dada pela equação

$$\mathbf{u}_{Da} = -\frac{K}{\mu} \nabla \mathbf{x} p, \quad (2.9)$$

onde \mathbf{u}_{Da} é o vetor velocidade de Darcy, K é a permeabilidade, $\nabla \mathbf{x} p$ é o gradiente de pressão e \mathbf{x} é o vetor posição.

Para casos de escoamentos bifásicos de fluidos imiscíveis através de meio porosos a equação 2.9 é modificada de modo que seja adicionada a permeabilidade relativa e as relações de força de corpo, assim

$$\mathbf{u}_{Da,1} = -\frac{K K_{11}}{\mu_1} (\nabla \mathbf{x} p_1 + \rho_1 \mathbf{g}_1) - \frac{K K_{12}}{\mu_2} (\nabla \mathbf{x} p_2 + \rho_2 \mathbf{g}_2), \quad (2.10)$$

$$\mathbf{u}_{Da,2} = -\frac{K K_{21}}{\mu_1} (\nabla \mathbf{x} p_1 + \rho_1 \mathbf{g}_1) - \frac{K K_{22}}{\mu_2} (\nabla \mathbf{x} p_2 + \rho_2 \mathbf{g}_2), \quad (2.11)$$

onde K_{11} e K_{22} é a fração adimensional de permeabilidade relativa a cada fluido, K_{12} e K_{21} é a fração adimensional de permeabilidade relativa do acoplamento viscoso, ρ é a densidade do fluido, g é a força por unidade de massa e os subscritos 1 e 2 representam os fluidos 1 e 2 (DULLIEN, 1991).

2.5.2 Escala de Análise

A representação de meios porosos pode ser feita em diferentes escalas de resolução de acordo com as características do problema analisado. Na escala de resolução macroscópica do poro, o meio poroso é representado como meio homogêneo onde não é possível distinguir fase fluida e sólida. Neste caso necessita-se de equações constitutivas como a lei de Hazen-Darcy e a relação de Dupuit-Forchheimer, para representação de fenômenos de escoamento. Na escala de resolução microscópica do poro, a representação do meio poroso apresenta heterogeneidades, sendo possível distinguir as fases fluida e sólida, assim como observar as interfaces entre elas. Conseqüentemente, também pode-se observar as formações geométricas dos poros e os fenômenos de interação fluido-sólido (NIELD; BEJAN, 2006). Na Figura 2.7 observa-se uma ilustração das escalas macroscópica e microscópica do poro, consideradas como abordagens homogênea e heterogênea, respectivamente.

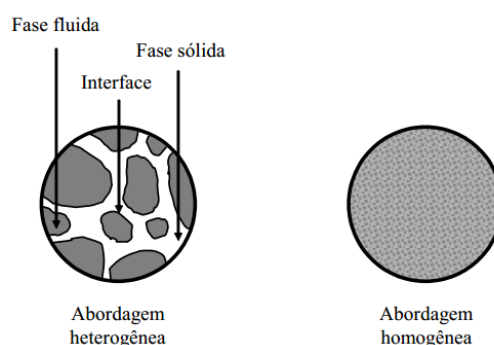


Figura 2.7 – Escala homogênea e escala do poro (Fonte : Meira, 2016).

Na abordagem homogênea, como não é feita a distinção de sólidos e fluidos presentes no meio poroso, a modelagem matemática do escoamento bifásico de fluidos incompressíveis e imiscíveis necessita de equações constitutivas inseridas como termos de força nas equações de conservação da quantidade de movimento (CIVAN, 2007). Em casos onde observa-se a interação de regiões fluidas e porosas, a abordagem homogênea necessita de equações que modelem a interface entre estas regiões. Já na abordagem heterogênea, onde é observado a distinção das fases e a geometria dos poros, a representação matemática do escoamento através do meio poroso pode ser modelada pelas equações de conservação da quantidade de movimento sem necessidade de acréscimo dos termos de força ou de modelagem da interface fluido-porosa, sendo o modelo mais representativo do problema analisado, porém de complexa aplicação devido necessidade de especificação da geometria

porosa (HILFER; ØREN, 1996; DULLIEN, 1991). Na Figura 2.8 são ilustradas as escalas da interface fluido-porosa.

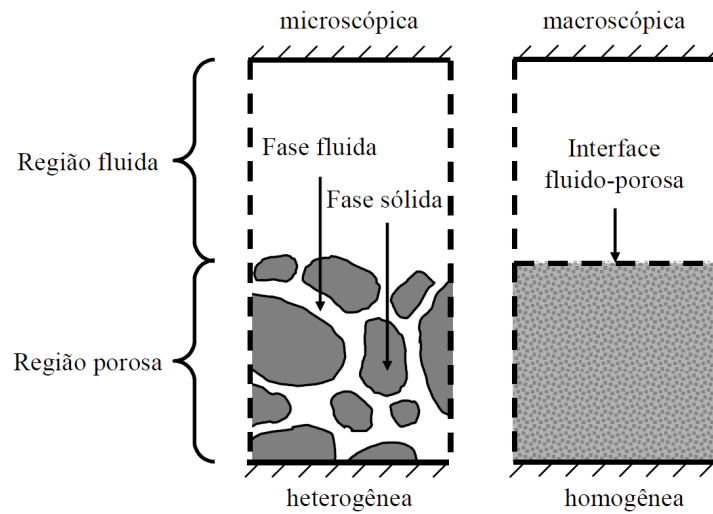


Figura 2.8 – Escala de análise microscópica e macroscópica da interface fluido-porosa (Adaptado de : Meira, 2016).

2.6 Eficiência de Varredura

Conforme apresentado no Capítulo 1, durante o processo de recuperação de petróleo nas etapas secundária e terciária, são injetados fluidos no reservatório através dos poços de injeção, buscando o deslocamento do petróleo presente no meio poroso até os poços de produção. Uma quantificação dos resultados deste processo pode ser obtida a partir da medida de eficiência de varredura, definida como a razão do volume ocupado pelo fluido injetado pelo volume total de poro, ou seja

$$Se = \frac{V_{fi}}{V_p}, \quad (2.12)$$

onde Se é a eficiência de varredura, V_{fi} é o volume ocupado pelo fluido injetado no meio poroso. Portanto, com Se é possível quantificar a fração de petróleo deslocado no processo, sendo que para Se próximo de 1 tem-se uma alta eficiência e próximo de 0 uma baixa eficiência (CRAIG, 1971; DONG; YAN; LI, 2011). A eficiência de varredura também pode ser definida como a saturação do fluido injetado no meio poroso.

2.7 Síntese do Capítulo

Neste capítulo foi apresentada a fundamentação teórica, expondo definições e conceitos sobre sistemas multifásicos, tensão interfacial, molhabilidade, estados de deslocamento,

meio poroso e eficiência de varredura. Inicialmente, apresentou-se os conceitos de sistema multifásico e tensão interfacial, com destaque para a definição de sistema bifásico e a equação analítica de Young-Laplace. Seguindo, o efeito de molhabilidade é abordado expondo características ilustrativas, medição da molhabilidade, equação de Young, comportamento em casos dinâmicos e heterogeneidade. No deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso, destaca-se a representação dos estados de deslocamento de *viscous fingering*, *capillary fingering* e de deslocamento estável, pelos parâmetros adimensionais de número de capilaridade e razão de viscosidade. Com relação ao meio poroso, apresentou-se as definições de porosidade, permeabilidade e coeficiente de permeabilidade relativa, bem como as escalas de análise. Por fim, define-se o conceito de eficiência do processo de deslocamento de fluido, denominado de eficiência de varredura.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo são revisados trabalhos da literatura relacionados ao contexto de deslocamento de fluidos imiscíveis em meios porosos, bem como trabalhos que contribuíram para compreensão e desenvolvimento do presente estudo. Conforme mencionado no Capítulo 1, a abordagem analítica possui limitada aplicação aos problemas de escoamento de fluidos em meios porosos. Portanto, as seções 3.1 e 3.2 são dedicadas à revisão de trabalhos com abordagens experimentais e numéricas, respectivamente. Por fim, é feita a síntese do capítulo abordando as contribuições do presente trabalho em relação aos trabalhos revisados.

3.1 Trabalhos Experimentais

Os trabalhos experimentais citados a seguir são caracterizados pela utilização de micro modelos na representação dos meios porosos. A fabricação destes micro modelos é descrita por diferentes técnicas de gravura em materiais como vidro, silício e resinas. As profundidades das gravuras nos seguintes trabalhos variam de 35 micrômetros até 1 milímetro. Na Figura 3.1 (a) pode-se observar o desenho esquemático de representação do micro modelo de meio poroso, enquanto na Figura 3.1 (b) tem-se a imagem do micro modelo de meio poroso em silício, com 50 micrômetros de profundidade da gravura e com 1 centímetro de comprimento e largura.

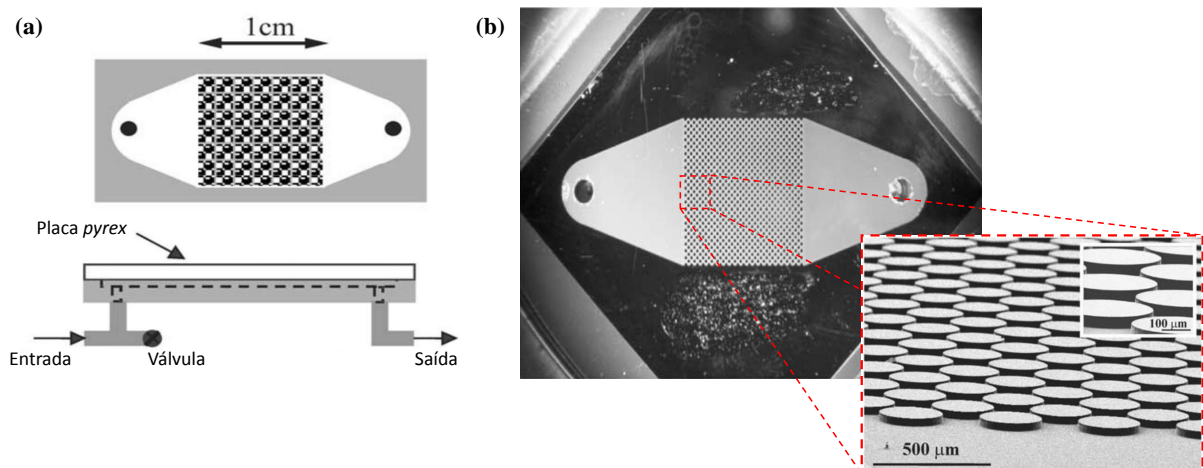


Figura 3.1 – Micro modelo de meio poroso: (a) Representação esquemática; (b) Micro modelo em silício (Adaptado de : Chomsurin e Werth (2003)).

Lenormand, Zarcone e Sarr (1983) estudaram o mecanismo do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso formado de dutos retangulares, promovendo por diferença de pressão o escoamento quase-estático, ou seja, forças viscosas negligem-

ciáveis em relação às forças capilares, para análise dos casos de imbibição, drenagem e bolhas presas de fluido não molhante. Os resultados obtidos observaram características do processo de deslocamento, onde destacam-se os fatos de o fluido molhante permanecer nas quinas dos dutos, da concordância entre as pressões capilares estimadas e obtidas experimentalmente para o deslocamento do fluidos através do duto, e da influência da topologia das bolhas em seu processo de deslocamento.

No trabalho feito por Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) apresenta-se, além do estudo numérico, um estudo experimental do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso, com objetivo de complementar os resultados numéricos. Diversos fluidos são utilizados na caracterização do processo de drenagem, como ar, óleos alifáticos, mercúrio, glucose, hexano e água, com o propósito de variar o número de capilaridade e a razão de viscosidade em faixas relativamente grandes. Os resultados obtidos são observados fotograficamente, demonstrando topologias específicas e diferentes estados de deslocamento, nomeados de *viscous fingering*, *capillary fingering* e deslocamento estável, que podem ser plotados em um diagrama do número de capilaridade pela razão de viscosidade.

A utilização de CO₂ como fluido de deslocamento de petróleo tem ganhado importância tanto economicamente como ambientalmente, sendo uma maneira de reduzir a emissão de gás e de ter uma boa eficiência no processo de recuperação. Portanto Er, Babadagli e Xu (2009) investigaram o deslocamento de petróleo, representado pelo óleo n-decano, pela injeção de CO₂ em um meio poroso fraturado, variando as propriedades de vazão volumétrica, pressão, molhabilidade e efeito de miscibilidade. Os resultados obtidos demonstram que com o aumento da vazão volumétrica a quantidade de n-decano que permanece retida no meio poroso tende a diminuir devido ao aumento das forças viscosas em relação às forças capilares. Também foi observado que a alteração da molhabilidade do meio poroso, de molhante à água para molhante ao óleo, aumenta a quantidade de óleo retido no meio poroso, sendo portanto mais desejável um meio molhante a água no processo de deslocamento por CO₂. Por fim, constata-se que, com o aumento da pressão na injeção de CO₂ o deslocamento deixa de ser imiscível e se torna miscível, resultando no aumento da eficiência de varredura do processo.

Analisando o deslocamento imiscível de água pela injeção de CO₂ líquido em meio poroso de dupla permeabilidade com estrutura organizada e porosidade fixa, Zhang *et al.* (2011a) investigaram os estados de deslocamento dos fluidos, saturação final de CO₂, distribuição da saturação do CO₂ e área interfacial de contato entre a água e o CO₂, para variação do número de capilaridade. Analisando os resultados obtidos para o aumento do número de capilaridade, observou-se o aumento da saturação do CO₂ no meio poroso, transição do deslocamento de *capillary fingering* para *viscous fingering*, aumento das regiões de escoamento do CO₂ e, conseqüentemente, diminuição de áreas onde permanece retido, juntamente com o aumento da área interfacial de contato de CO₂ com a água.

Zhang *et al.* (2011b) investigaram a influência de forças viscosas e capilares no processo

de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso molhante a água. Diferentes fluidos são utilizados na caracterização do processo de drenagem, como água, polietilenoglicol e fluidos alcanos, com o propósito de variação do número de capilaridade e razão de viscosidade, em faixas que complementem os resultados de Lenormand, Touboul e Zarcone (1988). Os resultados obtidos demonstram que, para o aumento do número de capilaridade e da razão de viscosidade, na faixa abordada, existe uma tendência do aumento da eficiência de varredura e da área interfacial de contato dos fluidos, também pode-se observar a existência dos três diferentes estados de deslocamento, concordando com os resultados obtidos por Lenormand, Touboul e Zarcone (1988).

Estudando o passagem do estado de *capillary fingering* para *viscous fingering* no processo de deslocamento imiscível de água pela injeção de CO₂ no meio poroso, Wang *et al.* (2012) variaram o número de capilaridade, considerando vazões contínuas e descontínuas, na injeção de fluido. Com os resultados obtidos observou-se que, com o crescimento do número de capilaridade e a mudança de *viscous* para *capillary fingering*, tem-se o aumento da eficiência de varredura para vazões contínuas e uma oscilação para vazões descontínuas. Também foram observadas variações das regiões de CO₂ que permanecem em escoamento, com relação ao número de capilaridade e aos métodos de injeção.

3.2 Trabalhos Numéricos

No trabalho feito por Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) apresenta-se o estudo do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo utilizando o método de rede-poro e compara os resultados obtidos com testes experimentais. Variando os valores do número de capilaridade e razão de viscosidade, Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) observaram específicos estados de deslocamento e a eficiência de varredura do processo. A comparação entre os resultados numéricos e experimentais é feita graficamente e qualitativamente, pelos estados de deslocamento observados nas imagens obtidas de cada abordagem, demonstrando a incorporação dos comportamentos viscosos e capilares, pelo método numérico de rede-poro.

Considerando o problema de escoamento de duas fases fluidas imiscíveis através do meio poroso, Gunstensen e Rothman (1993) apresentaram um estudo utilizando o método de *Lattice-Boltzmann* com o modelo de gradiente de cor, relacionado à determinação da permeabilidade relativa de cada fluido e seus acoplamentos em meio poroso esférico com porosidade fixa e poros distribuídos aleatoriamente. Variando os parâmetros de diferença de pressão do escoamento, saturação de cada fluido e mantendo a molhabilidade homogênea constante, pode-se observar nos resultados obtidos que para diferenças de pressão relativamente maiores que a pressão capilar, ocorre o comportamento linear da relação pressão-velocidade do escoamento. Entretanto, nos casos onde a diferença de pressão se aproxima da pressão capilar, o comportamento pressão-velocidade torna-se não-linear.

Tanto nas faixas lineares, como não lineares, observa-se que relação pressão-velocidade muda de acordo com as saturações iniciais de cada fluido no meio poroso.

Kang, Zhang e Chen (2004) investigaram o deslocamento de fluidos imiscíveis num canal, através do método *Lattice-Boltzmann* com o modelo de potencial inter-partícula, variando os parâmetros de razão de viscosidade, número de capilaridade e molhabilidade homogênea da superfície. Os resultados obtidos são analisados com base nas características geométricas do deslocamento de fluidos, como distância de escorregamento do fluido injetado, largura e comprimento do *finger*. Observando o aumento do número de capilaridade, da razão de viscosidade e do ângulo de contato estático, nota-se a diminuição da distância de escorregamento e largura de *finger*, e o aumento do comprimento de *finger*. O trabalho de Dong *et al.* (2010), também utilizando o método *Lattice-Boltzmann* com o modelo de potencial inter-partícula, corrobora os resultados de Kang, Zhang e Chen (2004) para o escoamento no canal e acrescentam a influência do número adimensional de Bond para incorporação dos efeitos de gravidade.

Dong *et al.* (2009) abordaram o fenômeno de deslocamento de fluidos imiscíveis através do meio poroso heterogêneo, utilizando o método de *Lattice-Boltzmann* com o modelo de potencial inter-partícula, variando os parâmetros de número de capilaridade e razão de viscosidade dinâmica, para meio poroso bidimensional formado por obstáculos circulares distribuídos organizadamente e com porosidade fixa. Os resultados obtidos demonstram que com o aumento do número de capilaridade ocorre o aumento de bolhas que diminuem a eficiência de varredura, no entanto com o aumento da razão de viscosidade ocorre a diminuição do número de bolhas, porém ainda assim observa-se a diminuição da eficiência de varredura. O trabalho de Dong, Yan e Li (2011) corrobora e amplia os resultados Dong *et al.* (2009), acrescentando uma análise da influência da molhabilidade homogênea no processo de deslocamento, onde observa-se que, com o aumento do ângulo de contato estático, existe uma tendência de diminuição da eficiência de varredura.

Entre os métodos utilizados para simulação do deslocamento de fluido em meios porosos, Joekar-Niasar e Hassanizadeh (2012) destacaram o método de rede-poro dinâmica oferecendo uma revisão sobre o método e apresentando fundamentos, suas vantagens e desvantagens, e resultados da literatura. Joekar-Niasar e Hassanizadeh (2012) também comparam com outros métodos considerados referência na simulação de deslocamento de fluido em meios poroso, como o método de *Lattice-Boltzmann* e de hidrodinâmica de partícula suavizada.

Bandara *et al.* (2013) utilizaram o método de hidrodinâmica de partícula suavizada no estudo do deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso, variando os parâmetros de número de capilaridade e razão de viscosidade, de modo a replicar os casos analisados por Zhang *et al.* (2011b). Nos resultados obtidos analisa-se a variação dos estados de deslocamento e saturação final dos fluidos, onde observa-se relativa proximidade com resultados experimentais de Zhang *et al.* (2011b). Consequentemente, verifica-se a incorporação de

efeitos viscosos e capilares, constatando a aplicabilidade do método para representação do problema em específico.

Liu *et al.* (2013) utilizaram o método de *Lattice-Boltzmann* com o modelo de teoria de interface difusa para simular o deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso, analisando a influência do número de capilaridade, razão de viscosidade e molhabilidade homogênea. Com relação ao aumento do número de capilaridade observa-se o aumento da eficiência de varredura, decorrente da transição do estado de *capillary fingering* para deslocamento estável, onde as forças viscosas predominam sobre as forças capilares. Para o aumento da razão de viscosidade dinâmica observa-se uma melhoria da eficiência de varredura, resultante da mudança do estado de *viscous fingering* para deslocamento estável, diminuindo a instabilidade do escoamento e a formação de *fingers*. Adicionalmente, na influência da molhabilidade, analisada em relação ao ângulo de contato estático, observa-se baixa eficiência de varredura para ângulos próximos de 90° (Molhabilidade intermediária) e o aumento da eficiência para ângulos que se aproximam de 0° e 180° , ou seja, onde um fluido é fortemente molhante com relação ao outro.

Utilizando o método de *Lattice-Boltzmann* com o modelo de gradiente de cor, Liu *et al.* (2014) analisaram o deslocamento imiscível de água pela injeção de CO_2 líquido em meio poroso de dupla permeabilidade, feito experimentalmente por Zhang *et al.* (2011a), e complementarmente, uma variação do problema onde se utiliza uma rede aleatória de poros com mesma porosidade. Nos resultados obtidos para o meio poroso de dupla permeabilidade, observa-se comparação razoável do método com os experimentos de Zhang *et al.* (2011a), obtendo-se uma correlação em lei de potência para a saturação em relação ao comprimento interfacial específico. Enquanto, nos resultados obtidos para o meio poroso de poros aleatórios em comparação com o meio de dupla permeabilidade, observa-se menor e maior saturação de CO_2 líquido nos valores baixos e altos do número de capilaridade, respectivamente.

Dentre os métodos para simulação de escoamentos multifásicos em meios porosos, Liu *et al.* (2016) destacaram o método de *Lattice-Boltzmann* numa revisão literária dos modelos multifásicos e multicomponentes, aplicáveis na resolução de problemas na escala do poro. Em meio aos modelos propostos na literatura destaca-se cinco, sendo o de potencial inter-partícula (SHAN; CHEN, 1993), gradiente de cor (ROTHMAN; KELLER, 1988; GUNSTENSEN *et al.*, 1991; REIS; PHILLIPS, 2007), energia livre (SWIFT; OSBORN; YEOMANS, 1995; SWIFT *et al.*, 1996), teoria do campo médio (HE; CHEN; ZHANG, 1999) e interface difusa estabilizada (LEE; LIU, 2010). Adicionalmente, com base na extensa utilização destes modelos na literatura, é feita uma análise de suas características relacionadas à necessidade ou não de teste de tensão interfacial, intensidade de correntes espúrias, razão de densidade e viscosidade, e custo computacional. No Seção 5.3 os modelos citados acima são abordados e comparados, com base na revisão de Liu *et al.* (2016).

3.3 Síntese do Capítulo

No presente capítulo foram apresentados alguns dos principais trabalhos encontrados na literatura que envolvem o processo de deslocamento de fluidos em meio poroso heterogêneo, utilizando abordagens numéricas e experimentais. Dentre os trabalhos experimentais citados observou-se a utilização de micro modelos na caracterização dos meios porosos, enquanto na parte numérica destaca-se a utilização dos métodos de rede-poro, hidrodinâmica de partícula suavizada e *Lattice-Boltzmann*, na representação dos processos de deslocamento. Porém, de modo geral, tanto nos trabalhos numéricos como experimentais, as análises estão voltadas para a variação dos parâmetros relacionados ao escoamento dos fluidos, como o número de capilaridade, razão de viscosidade e molhabilidade. Deixando de lado o estudo da influência de parâmetros relacionados ao meio poroso. Na Figura 3.2 pode-se observar faixas de razão de viscosidade e número de capilaridade, estudadas pelos trabalhos citados.

Desta forma, a proposta de analisar o processo de deslocamento de fluidos imiscíveis através do meio poroso, destaca-se na abordagem da região porosa. De maneira que, no presente trabalho a representação do meio poroso é variada através das ordens de iteração da geometria fractal do tapete Sierpinski para diferentes valores de porosidade, enquanto nos demais estudos (LENORMAND; TOUBOUL; ZARCONE, 1988; LENORMAND;

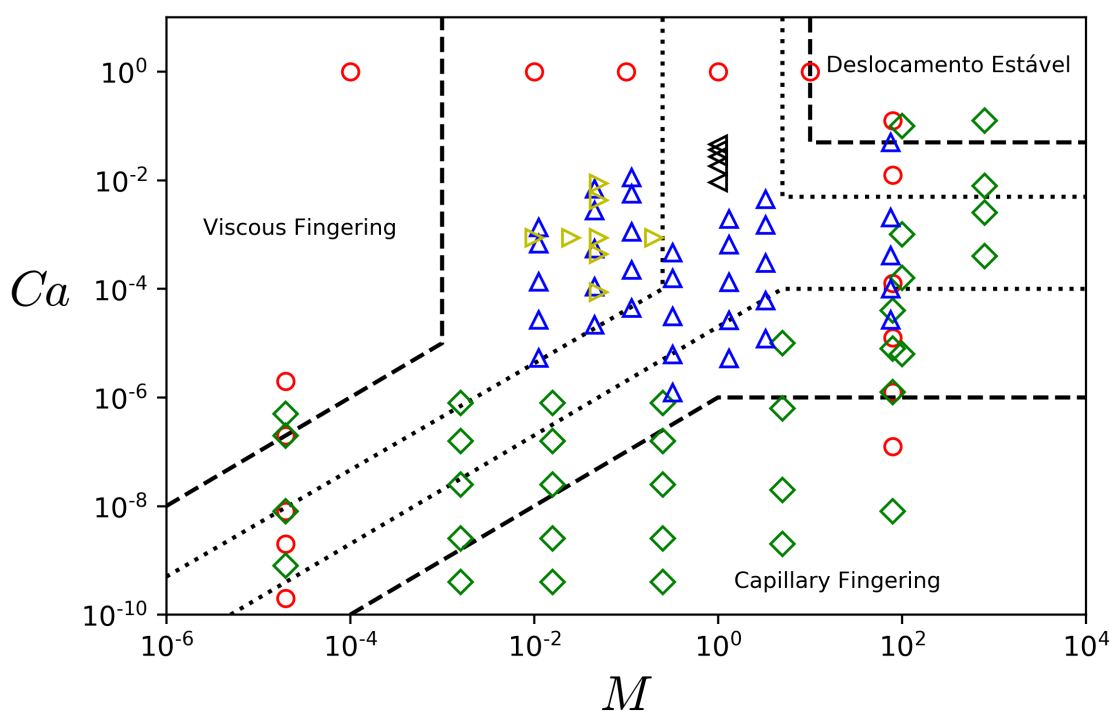


Figura 3.2 – O diagrama de fases indica as faixas de número de capilaridade e razão de viscosidade estudadas pelos seguintes trabalho, (○) Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) (Numérico), (◇) Lenormand, Touboul e Zarcone (1988) (Experimental), (△) Zhang *et al.* (2011b) (Experimental), (▷) Liu *et al.* (2013) (Numérico), (◁) Dong, Yan e Li (2011) (Numérico).

ZARCONE; SARR, 1983; ER; BABADAGLI; XU, 2009; ZHANG *et al.*, 2011a; ZHANG *et al.*, 2011b; WANG *et al.*, 2012; DONG *et al.*, 2009; BANDARA *et al.*, 2013; LIU *et al.*, 2013; LIU *et al.*, 2014) uma geometria inicial da região porosa é estabelecida para porosidade fixa. Portanto, em relação às análises realizadas, na literatura não há estudos que investigam a influência dos parâmetros que descrevem o problema aqui investigado, em específico os parâmetros de porosidade e forma de poros.

4 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

Neste capítulo são apresentadas as hipóteses de simplificação, equações de conservação que descrevem o deslocamento de fluidos imiscíveis, condições de contorno e inicial, e geometrias da matriz sólida do meio poroso.

4.1 Hipóteses e Equações de Conservação

As formações porosas, presentes nos reservatórios de petróleo, apresentam geometrias complexas, com diferentes escalas de poros, e propriedades de difícil representação (DULLIEN, 1991). Com isso algumas hipóteses de simplificação podem ser utilizadas para caracterizar meio poroso, de maneira que se tenha o domínio sobre algumas de suas propriedades. Deste modo, no presente estudo o domínio tridimensional de um meio poroso real é simplificado para o plano bidimensional, onde a complexa geometria da matriz sólida é representada por blocos quadrados desconectados e distribuídos organizadamente. Na Figura 4.1 é ilustrada a simplificação do meio poroso tridimensional para meio poroso bidimensional complexo e de poros aleatórios, e em seguida, para meio poroso de blocos quadrados e organizados. Sendo que, tais simplificações permitem melhor controle de propriedades do meio poroso, como porosidade, forma e número de blocos.

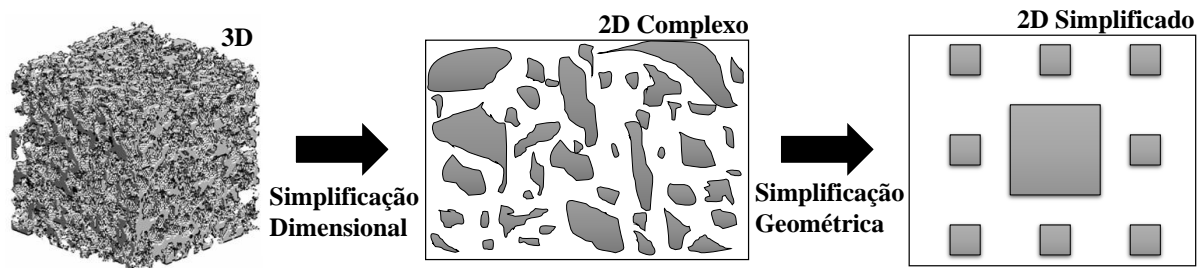


Figura 4.1 – Hipóteses simplificadoras de representação do meio poroso.

Com relação ao deslocamento dos fluidos imiscíveis presentes no meio poroso, as seguintes hipóteses são utilizadas:

- escoamento incompressível (ρ_1 e ρ_2 constantes),
- escoamento isotérmico (Temperatura constante),
- ambos fluidos são considerados newtonianos (ν_1 e ν_2 constantes),
- ação de força gravitacional desprezível,
- molhabilidade homogênea no meio poroso.

As equações de conservação da massa e da quantidade de movimento, na forma incompressível do problema estão de acordo com Hilfer e Øren (1996) e são expressadas, respectivamente, por

$$\nabla \mathbf{x} \cdot (\mathbf{u}_\sigma) = 0, \quad (4.1)$$

$$\rho_\sigma \frac{\partial \mathbf{u}_\sigma}{\partial t} + \rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma \cdot \nabla \mathbf{x}) \mathbf{u}_\sigma = -\nabla \mathbf{x} p_\sigma + \rho_\sigma \nu_\sigma \nabla^2 \mathbf{x} \mathbf{u}_\sigma + \rho_\sigma \mathbf{g}, \quad (4.2)$$

onde σ indica o fluido em questão, t é o tempo e o termo $\nabla^2 \mathbf{x}$ representa o produto escalar $\nabla \mathbf{x} \cdot \nabla \mathbf{x}$. Escrevendo a Equação 4.2 na forma adimensional, com base nas variáveis adimensionais

$$\hat{\mathbf{x}} = \frac{\mathbf{x}}{L_{ref}}, \quad \hat{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{u}}{U_{ref}}, \quad \hat{t} = t \frac{U_{ref}}{L_{ref}}, \quad \hat{p} = p \frac{L_{ref}}{\gamma}, \quad (4.3)$$

sendo L_{ref} o comprimento microscópico de referência da escala do poro, U_{ref} a velocidade microscópica de referência da escala do poro e γ/L_{ref} a pressão de referência proporcional a tensão interfacial dos fluidos. Considerando a ausência de forças externas ($\mathbf{g} = 0$) e sendo 1 o fluido injetado e 2 o fluido deslocado, tem-se

$$Re \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}_1}{\partial \hat{t}} + (\hat{\mathbf{u}}_1 \cdot \nabla \hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{u}}_1 \right) = -\frac{1}{Ca} \nabla \hat{\mathbf{x}} \hat{p}_1 + \nabla^2 \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}_1, \quad (4.4)$$

$$ReM_\nu \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}_2}{\partial \hat{t}} + (\hat{\mathbf{u}}_2 \cdot \nabla \hat{\mathbf{x}}) \hat{\mathbf{u}}_2 \right) = -\frac{M}{Ca} \nabla \hat{\mathbf{x}} \hat{p}_2 + \nabla^2 \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}_2, \quad (4.5)$$

onde $Re = \frac{U_{ref} L_{ref}}{\nu_{fi}}$ é o número de Reynolds, que representa a razão entre forças inerciais e viscosas do escoamento, e $Ca = \frac{U_{ref} \mu_{fi}}{\gamma}$ é calculado em função da viscosidade do fluido injetado.

Segundo Hilfer e Øren (1996) e Muggeridge *et al.* (2014), no deslocamento de petróleo pela injeção de água em reservatórios, as escalas de velocidade, diâmetro de poro e viscosidade do fluido injetado resultam $Re \ll 1$, reduzindo as Equações 4.4 e 4.5 a

$$\frac{1}{Ca} \nabla \hat{\mathbf{x}} \hat{p}_1 = \nabla^2 \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}_1, \quad (4.6)$$

$$\frac{M}{Ca} \nabla \hat{\mathbf{x}} \hat{p}_2 = \nabla^2 \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{u}}_2, \quad (4.7)$$

sendo que, em ambas equações, os termos do lado esquerdo representam as forças capilares e os do lado direito as forças viscosas do processo de deslocamento.

4.2 Condições de Contorno e Inicial

As condições de contorno e inicial do problema apresentadas nas Figuras 4.2 e 4.3, são determinadas com base na formulação padrão de Hilfer e Øren (1996) para o processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso, considerando a injeção de fluido no canal poroso com perfil de velocidade completamente desenvolvido.

Na Figura 4.2 é possível observar a ilustração do estado inicial do problema. Para a condição de contorno inicial, no tempo $t = 0$, tem-se o canal poroso heterogêneo, onde o meio poroso posicionado na entrada do canal é representado por uma matriz sólida de blocos quadrados, preenchido pelo fluido 2, enquanto a região de entrada permanece preenchida pelo fluido 1. Ambos fluidos possuem campo de velocidade nulo e o canal poroso possui altura H e comprimento L .

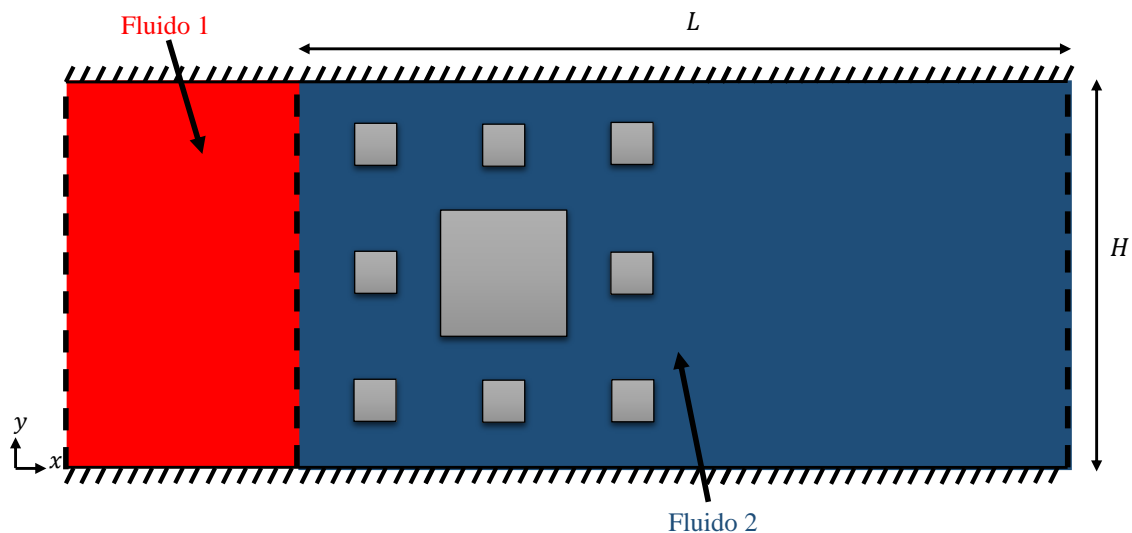


Figura 4.2 – Condição Inicial do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso.

Ao decorrer do processo de deslocamento, ou seja $t > 0$, as condições de contorno são aplicadas. Na fronteira esquerda, entrada do canal, é aplicada a condição de perfil de velocidade parabólico constante, enquanto na fronteira direita, saída do canal, é aplicada condição de pressão constante. Condições de não escorregamento são aplicadas nas fronteiras superior e inferior, assim como nas superfícies dos blocos. As condições de contorno também são necessárias na interface de interação dos fluidos imiscíveis de maneira a garantir a conservação da quantidade de movimento, de acordo com Hilfer e Øren (1996) as condições são representadas por

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \quad \text{e} \quad \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{n} - \mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{n} = 2\gamma\kappa\mathbf{n}, \quad (4.8)$$

onde n é o vetor unitário, κ é a curvatura da interface e P é o tensor pressão, dado por

$$P = pI + \mu \frac{1}{2} \left(\nabla x u + \nabla x u^T - \frac{2}{3} (\nabla x \cdot u) I \right). \quad (4.9)$$

Na Figura 4.3 pode-se observar a ilustração das condições de contorno mencionadas, destacando-se o perfil de velocidade parabólico aplicado na região de entrada do canal preenchida pelo fluido 1 e a igualdade das velocidades junto ao balanço de forças na interface de contato dos fluidos.

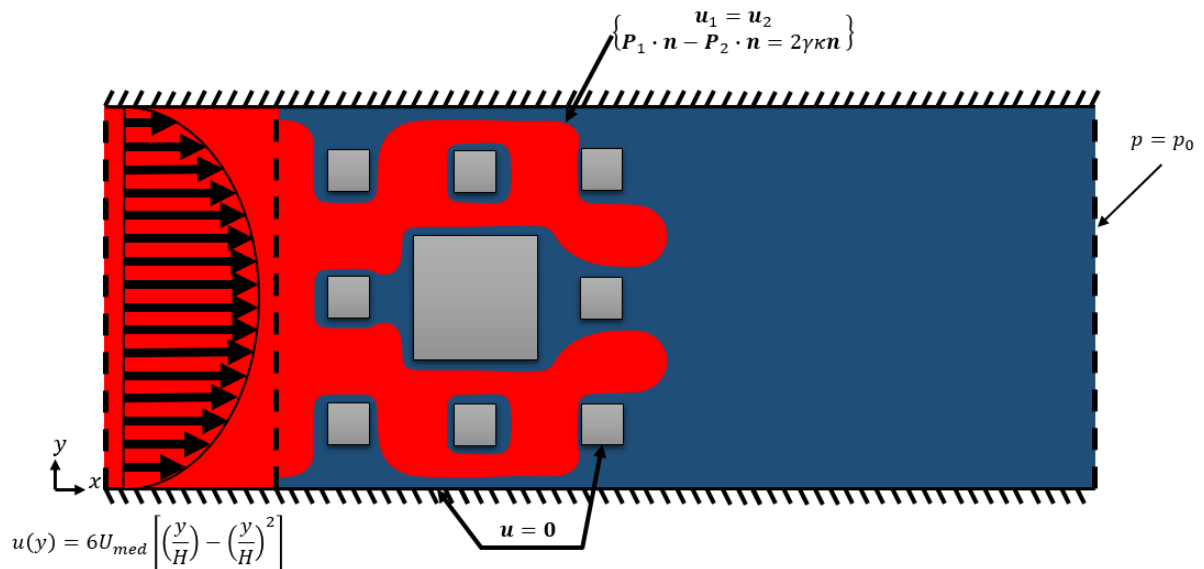


Figura 4.3 – Condições de contorno do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso.

4.3 Geometrias

A geometria da matriz sólida do meio poroso no presente trabalho, é variada com o objetivo de investigar a influência da forma de poros no processo de deslocamento de fluidos. Na literatura as ordens de iteração da geometria fractal do tapete de Sierpinski são comumente utilizadas na caracterização topológica de meios porosos, devido a sua natureza de representar diferentes escalas de poros a cada iteração (DULLIEN, 1991; JIAN-HUA; BO-MING, 2011; BAZARIN; NAAKTGEBOREN; JUNQUEIRA, 2017). Desta forma, empregam-se as três primeiras ordens de iteração do tapete de Sierpinski para a variação geométrica da matriz sólida, representando três diferentes escalas de poro.

A caracterização geométrica das ordens de iteração do tapete Sierpinski, podem ser descritas como um processo iterativo, onde na primeira ordem divide-se o volume quadrado em nove quadrados iguais e retira-se o volume central, na segunda ordem aplica-se o mesmo procedimento da primeira ordem e em seguida dividem-se os volumes quadrados restantes em nove quadrados iguais e retiram-se os volumes centrais, nas ordens subsequentes pode-se generalizar, de maneira que, aplica-se o procedimento da ordem anterior e em

seguida dividem-se os volumes restantes em nove quadrados iguais e retiram-se os volumes centrais. A Figura 4.4 ilustra o processo iterativo de divisão e retirada dos volumes, nas três primeiras ordens do tapete de Sierpinski. Para mais detalhes desta geometria fractal ver Mandelbrot (1982).

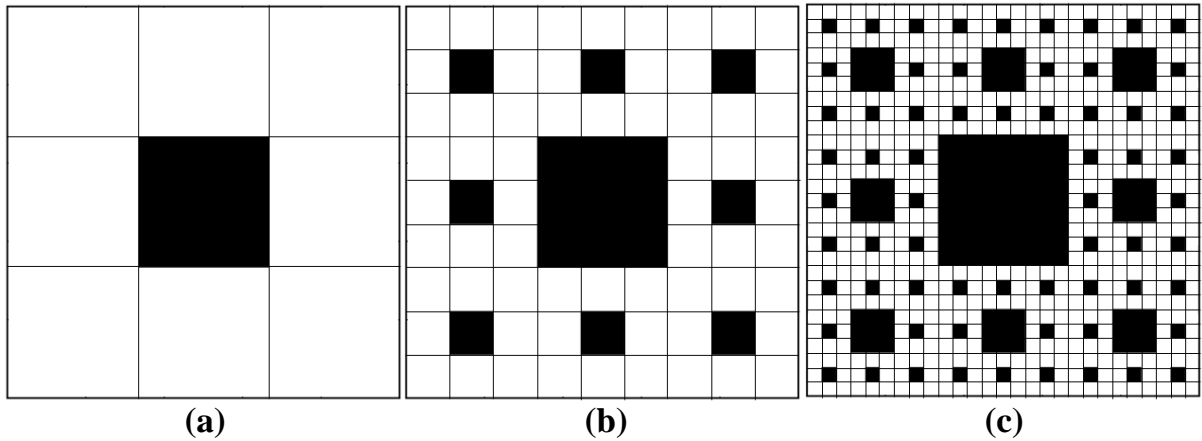


Figura 4.4 – Caracterização das ordens de interação da geometria fractal do tapete de Sierpinski: (a) Primeira ordem; (b) Segunda ordem; (c) Terceira ordem.

A porosidade relacionada às três primeiras ordens do tapete de Sierpinski são dadas por

$$\begin{aligned} \phi &= 1 - d_{b1}^2/H^2, \\ \phi &= 1 - (d_{b1}^2 + 8(d_{b2}/3)^2)/H^2, \\ \phi &= 1 - (d_{b1}^2 + 8(d_{b2}/3)^2 + 64(d_{b3}/9)^2)/H^2, \end{aligned} \tag{4.10}$$

para a primeira, segunda e terceira ordem, respectivamente, sendo d_{b1} , d_{b2} e d_{b3} os diâme-

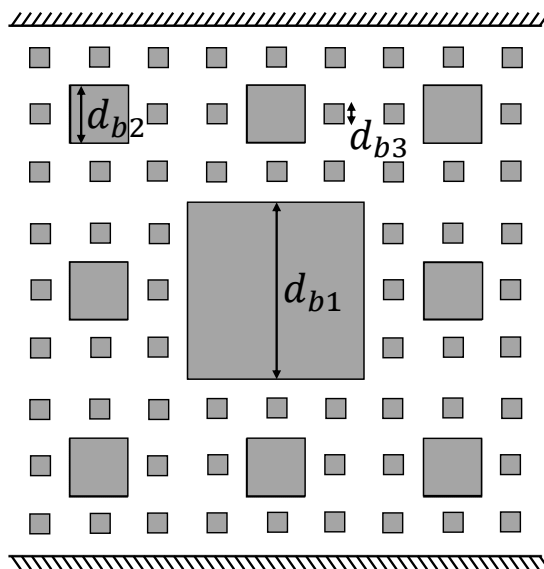


Figura 4.5 – Geometrias do canal poroso para a terceira ordem do tapete de Sierpinski.

tros dos blocos quadrados presentes em cada ordem. A Figura 4.5 ilustra o diâmetro de cada bloco quadrado utilizando a terceira ordem do tapete de Sierpinski como matriz sólida do canal poroso.

4.4 Síntese do Capítulo

Este capítulo foi aplicado à apresentação de diversas características associadas à formulação do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso heterogêneo. Inicialmente foram consideradas as hipóteses de escoamento incompressível e isotérmico, ambos fluidos newtonianos, ação de força gravitacional desprezível, molhabilidade homogênea no meio poroso e simplificação da geometria poroso representada na Figura 4.1. A formulação matemática do problema foi feita de acordo com Hilfer e Øren (1996), onde as equações de conservação da massa e quantidade de movimento, descrevem o processo de deslocamento de fluidos imiscíveis, dadas respectivamente por

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{x} \cdot (\mathbf{u}_\sigma) &= 0, \\ \rho_\sigma \frac{\partial \mathbf{u}_\sigma}{\partial t} + \rho_\sigma (\mathbf{u}_\sigma \cdot \nabla \mathbf{x}) \mathbf{u}_\sigma &= -\nabla \mathbf{x} p_\sigma + \rho_\sigma \nu_\sigma \nabla^2 \mathbf{x} \mathbf{u}_\sigma + \rho_\sigma \mathbf{g}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Complementando as equações de conservação na formulação matemática, foram consideradas as condições de contorno de perfil de velocidade parabólico na entrada e pressão constante na saída do canal, não escorregamento na superfície dos blocos e paredes do canal, e condições interfaciais. As condições mencionadas estão representadas na Figura 4.6. Por fim, foram apresentadas as geometrias consideradas para representação do meio poroso, as quais são baseadas nas ordens da geometria fractal do tapete de Sierpinski, que é comumente utilizada para representação topológica de meios porosos.

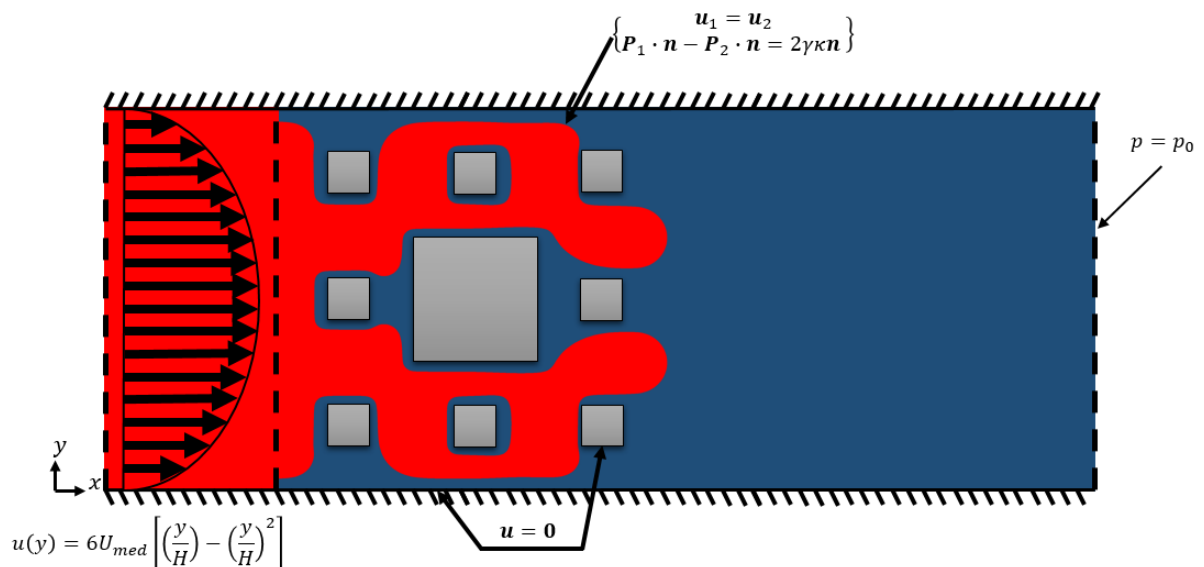


Figura 4.6 – Condições de contorno do processo de deslocamento de fluidos em meio poroso.

5 MÉTODO DE LATTICE BOLTZMANN

No presente capítulo é descrito brevemente o método de *Lattice-Boltzmann* para simulação da dinâmica de fluidos com modelos multifásicos. Na sequência, são abordados o histórico do método, relações entre a equação contínua de Boltzmann e a forma discreta do método, modelos multifásicos, modelo de potencial inter-partícula, modelo modificado, condições de contorno, relação de escala, teste de malha e estrutura computacional.

5.1 Histórico

O método de *Lattice-Boltzmann* é um método mesoscópico que através da descrição probabilística de um sistema de partículas permite a representação de fenômenos físicos como difusão de calor, escoamento de fluidos e propagação de ondas acústicas. Historicamente, o método de *Lattice-Boltzmann* surgiu com o aprimoramento do método autômato celular, chamado de *Lattice-Gas Automata*. O método *Lattice-Gas Automata* teve origem no artigo publicado por Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986), que por sua vez propôs um método de abordagem booleana capaz de reproduzir o comportamento macroscópico de fluidos newtonianos. A estrutura do método *Lattice-Gas Automata* é dada por um sistema partículas que constituem o fluido e estão restritas a ocupar direções em pontos de uma rede regular, a evolução deste sistema é dada pela colisão de partículas e transmissão destas para os pontos de rede vizinhos. Na Figura 5.1 pode-se observar a ocupação das partículas nas direções dos pontos da rede regular e também os processos de colisão e transmissão das partículas no sistema.

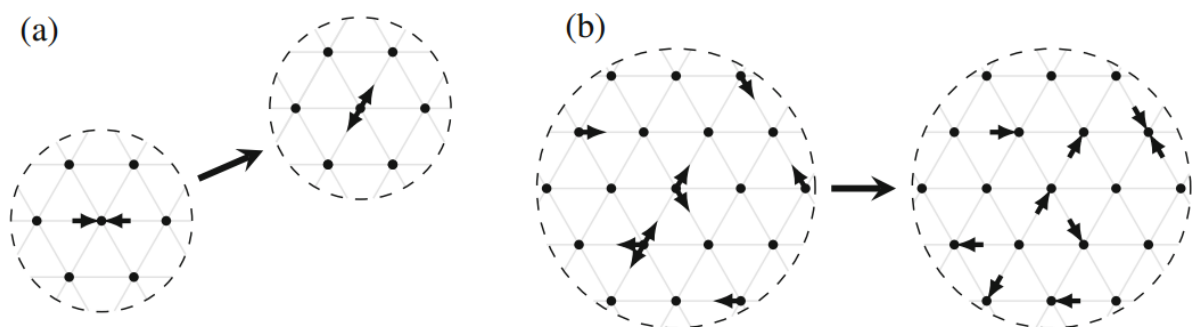


Figura 5.1 – Evolução do sistema no método de *Lattice-Gas Automata*: (a) colisão; (b) transmissão (Adaptado de: Krüger *et al.* (2017)).

Com o surgimento da necessidade de diminuição dos ruídos estáticos presentes no *Lattice-Gas Automata* devido à utilização de variáveis booleanas, McNamara e Zanetti (1988) propuseram uma alternativa que simula diretamente a probabilidade das partículas

ocuparem direções nos pontos de rede. Tal alternativa proposta pelos autores é similar a dedução da equação de Boltzmann, por este motivo, o método é denominado método *Lattice-Boltzmann*. Porém, só mais tarde foi demonstrado que o método pode ser considerado como uma forma discreta específica da equação de Boltzmann (HE; LUO, 1997; ABE, 1997), adicionando mais confiabilidade ao potencial de possíveis aplicações do método.

5.2 Equação de *Lattice-Boltzmann*

Como demonstrado por He e Luo (1997) e Abe (1997), o método de *Lattice-Boltzmann* consiste de uma forma discretizada no espaço de velocidades e no espaço-tempo, da equação de Boltzmann. Conseqüentemente, os processos de discretização da equação de Boltzmann são etapas importantes que possibilitam a visualização das aproximações numéricas que envolvem o método, permitindo um nível (relacionado à ordem de discretização) de comparação da equação discreta de *Lattice-Boltzmann* com a equação contínua de Boltzmann.

A equação de Boltzmann foi derivada pelo físico austríaco Ludwig Boltzmann (1844-1906) (BOLTZMANN, 1898), e sua forma adimensional é dada por

$$\frac{df^*}{dt^*} = \frac{\partial f^*}{\partial t^*} + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}^*} f^* + \boldsymbol{g}^* \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}^*} f^* = \Omega^*, \quad (5.1)$$

onde f é a função distribuição, $\boldsymbol{\xi}$ é o vetor velocidade da partícula, \boldsymbol{g} é a força externa por unidade de massa, Ω é o operador de colisão e $*$ indica a adimensionalização do parâmetro. Para mais detalhes da equação de Boltzmann e sua adimensionalização, ver Apêndice B.

Fisicamente a equação de Boltzmann representa a evolução temporal da função distribuição, que retrata a probabilidade de evolução de um sistema partículas, considerando as hipóteses de: somente colisões binárias entre as partículas (gás rarefeito); não correlação entre as velocidades de pré e pós-colisão das partículas (caos molecular); força externa desprezível em comparação com forças de interação molecular durante o processo de colisão das partículas e; f^* não varia para distâncias comparáveis com o tamanho da partícula no início do processo de colisão (KREMER, 2010).

5.2.1 Discretização do Espaço de Velocidades

O processo de discretização do espaço de velocidades relaciona a abordagem contínua da equação de Boltzmann no espaço de velocidades com uma aproximação discreta de velocidades, sendo um importante passo no processo de análise numérica da equação de *Lattice-Boltzmann*. Diferentes métodos podem ser utilizados no processo de discretização do espaço de velocidades, com destaque para as metodologias de Abe (1997), He e Luo (1997), Shan, Yuan e Chen (2006) e Philippi *et al.* (2006), tendo cada um suas vantagens e desvantagens. O presente trabalho utiliza a metodologia empregada 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 de f^* atuante no contínuo espaço de velocidades em representações discretas por números reais (Figura 5.2). Para detalhes do método de quadratura e projeção em polinômios de Hermite, ver Krüger *et al.* (2017) e Philippi *et al.* (2006).

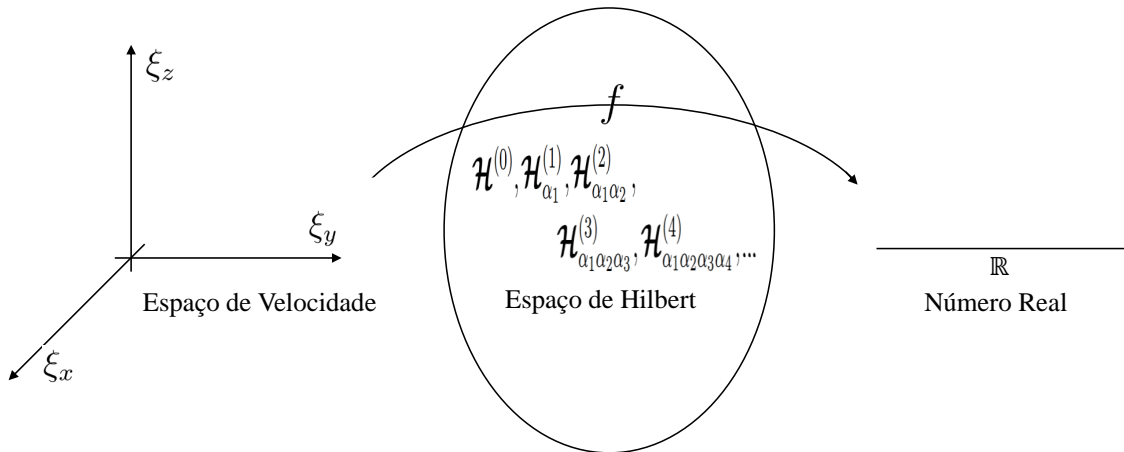


Figura 5.2 – Conversão da função distribuição contínua em discreta, no espaço de Hilbert .

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\xi^*}{2}}}{(2\pi)^{D/2}} \left[\mathcal{H}^{(\theta)}(\xi^*) \right]^2 d\xi^* = \sum_{i=0}^{N_b-1} W_i \left[\mathcal{H}^{(\theta)}(\xi_i^*) \right]^2, \quad (5.2)$$

onde D é a dimensão, $\mathcal{H}^{(\theta)}$ é o polinômio de Hermite de ordem θ , N_b é o número de pontos de discretização, W_i é o fator de ponderação de cada ponto i e $\left[\mathcal{H}^{(\theta)}(\xi_i^*) \right]^2$ é uma notação representativa para um tensor onde cada componente está elevado ao quadrado. A Equação 5.2 permite a discretização do espaço de velocidade em retículos, também chamados de *Lattices*, com diferentes ordens e dimensões. A ordem de cada retículo é igual a menor ordem de truncação da função distribuição em polinômios de Hermite necessária para sua dedução, sendo que, a ordem está relacionada não somente com número de pontos N_b , mas também com a física do sistema. Na Figura 5.3 pode-se observar o exemplo de três retículos com diferentes dimensões.

No presente trabalho é utilizado o retículo de segunda ordem D2Q9 que possui nove pontos de discretização ($N_b = 9$), também chamados de velocidades, no espaço bidimensional. Tal retículo recupera adequadamente as equações de conservação da massa e quantidade de movimento, porém não recupera a equação de conservação da energia. Para problemas que possuem transferência de calor necessita-se de ordens maiores que a segunda no

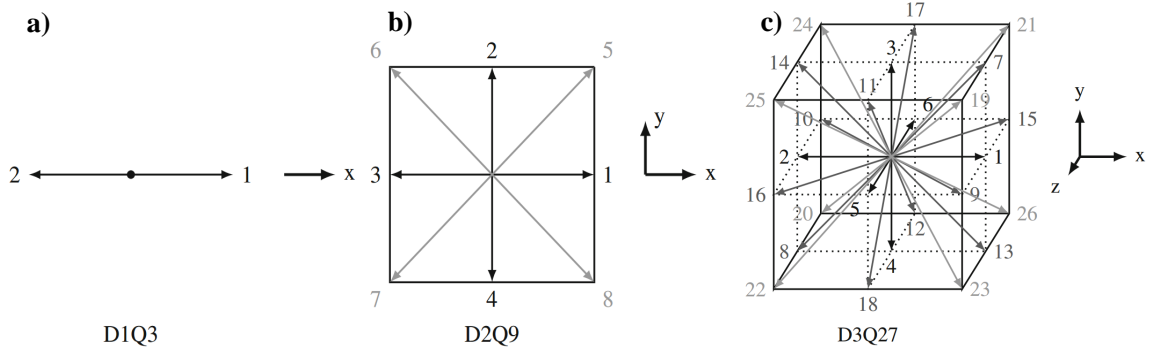


Figura 5.3 – Retículos: a) unidimensional com três velocidade (D1Q3); b) bidimensional com nove velocidades (D2Q9); c) tridimensional com vinte e sete velocidades (D3Q27) (Adaptado de: Krüger *et al.* (2017)).

processo de dedução dos retículos, fazendo com que a equação de conservação da energia seja recuperada sem perdas (PHILIPPI *et al.*, 2006; KRÜGER *et al.*, 2017).

No processo de dedução dos retículos o vetor velocidade adimensional discretizado ξ_i^* é convertido no vetor velocidade de rede e_i e no fator de escala c_s que representa a velocidade do som, sendo $\xi_i^* = e_i/c_s$. Portanto, escrevendo as variáveis macroscópicas na abordagem discreta em função do vetor velocidade de rede, tem-se

$$\rho^* = \sum_{i=0}^{N_b-1} f_i^*, \quad (5.3)$$

$$\rho^* \mathbf{u}^* = \sum_{i=0}^{N_b-1} e_i f_i^*, \quad (5.4)$$

$$\mathbf{P}^* = \sum_{i=0}^{N_b-1} (e_i - \mathbf{u}^*)(e_i - \mathbf{u}^*) f_i^*, \quad (5.5)$$

onde ρ^* é a densidade adimensional, \mathbf{u}^* é o vetor velocidade em unidades de rede e \mathbf{P}^* é o tensor pressão em unidades de rede.

5.2.2 Discretização do Espaço-Tempo

O método de *Lattice-Boltzmann* é baseado no esquema de colisão-propagação, onde os vetores velocidade de rede e o espaço físico estão acoplados de maneira que a cada passo de tempo as populações de partículas se propagam para os retículos vizinhos. A discretização no espaço-tempo da equação Boltzmann na forma adimensional e discreta no espaço de velocidades, pode ser feita através da aproximação em ordens de uma expansão em séries de Taylor. A maioria dos algoritmos do método utiliza aproximação de primeira

ordem em expansão de Taylor, que é representado por

$$f_i^*(\mathbf{x}^* + \boldsymbol{\xi}_i^* \delta, t^* + \delta) = f_i^*(\mathbf{x}^*, t^*) + \delta \Omega_i^* + \delta F_i^*(\mathbf{x}^*, t^*) + \mathcal{O}(\delta^2), \quad (5.6)$$

onde δ é o passo de tempo, $\mathcal{O}(\delta^2)$ são erros de segunda ordem e $F_i^* = \mathbf{g}^* \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i^*} f_i^*$ é o termo de força externa.

Em casos onde o termo de força externa não é nulo ($F_i^* \neq 0$), por exemplo em problemas multifásicos, se faz necessária uma discretização no espaço-tempo com aproximação de segunda ou maior ordem (SIEBERT; PHILIPPI; MATTILA, 2014). Aplicando a expansão de Taylor até os termos de segunda ordem, tem-se

$$\begin{aligned} f_i^*(\mathbf{x}^* + \boldsymbol{\xi}_i^* \delta, t^* + \delta) = & f_i^*(\mathbf{x}^*, t^*) + \frac{\delta}{2} (\Omega_i^*(\mathbf{x}^* + \boldsymbol{\xi}_i^* \delta, t^* + \delta) + \Omega_i^*(\mathbf{x}^*, t^*)) \\ & + \frac{\delta}{2} (F_i^*(\mathbf{x}^* + \boldsymbol{\xi}_i^* \delta, t^* + \delta) + F_i^*(\mathbf{x}^*, t^*)) + \mathcal{O}(\delta^3), \end{aligned} \quad (5.7)$$

reescrevendo a equação acima para $\hat{f}_i = f_i^* - \delta/2(\Omega_i^* + F_i^*)$, tem-se a forma final para discretização de segunda ordem

$$\hat{f}_i(\mathbf{x}^* + \boldsymbol{\xi}_i^* \delta, t^* + \delta) = \hat{f}_i(\mathbf{x}^*, t^*) + \delta \Omega_i^*(\mathbf{x}^*, t^*) + \delta F_i^*(\mathbf{x}^*, t^*). \quad (5.8)$$

Deste modo, a equação de *Lattice-Boltzmann*, representada pelas Equações 5.6 e 5.8, descreve de forma aproximada a equação de Boltzmann, tanto no espaço de velocidades como no espaço-tempo, sendo a Equação 5.8 uma aproximação mais precisa do que 5.6 em relação equação contínua de Boltzmann.

O operador de colisão adimensional Ω^* presente na equação de *Lattice-Boltzmann*, no presente trabalho, é representado pelo modelo de colisão BGK, desenvolvido por Bhatnagar, Gross e Krook (1954). Este modelo simplifica o operador integro-diferencial mantendo as propriedades de conservação da massa, quantidade de movimento e energia. Portanto, tem-se a Equação 5.8 com o modelo BGK

$$\hat{f}_i(\mathbf{x}^* + \boldsymbol{\xi}_i^* \delta, t^* + \delta) = \hat{f}_i(\mathbf{x}^*, t^*) - \frac{1}{\tau^*} (\hat{f}_i(\mathbf{x}^*, t^*) - f_i^{eq,*}(\mathbf{x}^*, t^*)) + \left(1 - \frac{1}{2\tau^*}\right) \delta F_i^*(\mathbf{x}^*, t^*), \quad (5.9)$$

onde τ^* é o tempo de relaxação adimensional.

5.3 Modelos Multifásicos

Atualmente existem diversos modelos para representação de problemas multifásicos no método de *Lattice-Boltzmann*. Dentre estes, Liu *et al.* (2016) destacaram para simulação de escoamentos multifásicos em meios porosos os modelos de:

- **Gradiente de cor** - Baseado no modelo de Rothman e Keller (1988) para o método *Lattice-Gas Automata*, o modelo de gradiente de cor, proposto por Gunstensen *et al.* (1991), foi o primeiro modelo multifásico para o método de *Lattice-Boltzmann*. Ao decorrer dos anos diversos trabalhos contribuíram para o desenvolvimento do modelo, a exemplo de Grunau, Chen e Eggert (1993), Latva-Kokko e Rothman (2005) e Reis e Phillips (2007).
- **Potencial inter-partícula** - Desenvolvido por Shan e Chen (1993) o modelo de potencial inter-partícula, também chamado de pseudopotencial, é baseado na interação microscópica de partículas vizinhas de diferentes fases. Este modelo pode ser dividido em dois tipos, único componente multifase (SHAN; CHEN, 1994) e multicomponente multifase (SHAN; DOOLEN, 1995), sendo que o modelo único componente multifase foi o primeiro a representar uma transição de fase líquido-vapor com o método *Lattice-Boltzmann*.
- **Energia livre** - Baseado na abordagem termodinâmica, o modelo de energia livre proposto Swift, Osborn e Yeomans (1995), incorpora termos dentro do tensor pressão e da função distribuição de equilíbrio, para descrever a evolução da interface de interação das fases (HUANG; SUKOP; LU, 2015a). Entre os trabalhos que contribuíram para a evolução deste modelo destacam-se Swift *et al.* (1996), Holdych *et al.* (1998) e Zheng, Shu e Chew (2006).
- **Rastreamento de interface** - Os modelos de teoria de campo médio e interface difusa estabilizada, desenvolvidos por He, Chen e Zhang (1999) e Lee e Liu (2010), respectivamente, podem ser classificados como modelos de rastreamento de interface. Estes modelos incorporam uma função distribuição que representa macroscopicamente a equação de rastreamento de interface de Cahn-Hilliard e diferem na maneira em que interface é tratada (HUANG; SUKOP; LU, 2015a; LIU *et al.*, 2016).

Em meio aos modelos citados o presente trabalho busca o que melhor se ajusta as características do presente problema.

Com base na relevância de cada modelo na literatura, pode se observar na Tabela 5.1 o total de citações geradas pelos artigos mais representativos de cada modelo na data de 17/02/2018. Observa-se que modelo de potencial inter-partícula se destaca sobre os outros modelos com maior número de citações. Conseqüentemente, tem-se maior número de trabalhos que apoiem e ajudem no desenvolvimento do presente trabalho.

Comparando os modelos apresentados na Tabela 5.2, Liu *et al.* (2016) levaram em conta as características de:

- **Tensão interfacial** - Classificando cada modelo como necessário teste de bolha estática ou parâmetro de entrada. De modo que, alguns modelos necessitam do teste

Tabela 5.1 – Número de citações por artigo referente aos modelos multifásicos.

Modelo	Artigo	Total Citações
Gradiente de cor	Rothman e Keller (1988)	338
	Gunstensen <i>et al.</i> (1991)	600
Potencial inter-partícula	Shan e Chen (1993)	1179
	Shan e Chen (1994)	522
Energia livre	Swift, Osborn e Yeomans (1995)	571
	Zheng, Shu e Chew (2006)	235
Rastreamento de interface	He, Chen e Zhang (1999)	542
	Lee e Liu (2010)	151

de bolha estática para determinação da tensão interfacial dos fluidos, enquanto outros a tensão é dada como um parâmetro de entrada.

- **Correntes espúrias** - A característica de correntes espúrias está relacionada à intensidade de microcorrentes que surgem devido às aproximações numéricas nos pontos de tensão interfacial (KRÜGER *et al.*, 2017). Nos modelos classifica-se como muito baixa, baixa, média e alta, em relação a magnitude das correntes.
- **Dissolução de pequenas bolhas** - Esta característica está relacionada ao fenômeno de bolhas relativamente pequenas de uma fase se dissolverem em outras fases. Nos modelos classifica-se como muito baixa, baixa, média, alta e muito alta.
- **Razão de densidade** - O parâmetro de razão de densidade, definido pela divisão da densidade de dois fluidos em específico, é classificado de acordo com o máximo valor alcançado.
- **Razão de viscosidade** - O parâmetro de razão de viscosidade, definido neste trabalho pela Equação 2.6, é classificado de acordo com o máximo valor alcançado ou como desconhecido no caso dos modelos que não possuem trabalhos que investigam esta característica.
- **Custo computacional** - A característica de custo computacional é classificada como baixo, médio, alto e muito alto.

Com base no problema apresentado neste trabalho o modelo multifásico necessita especialmente das características de variação da razão de viscosidade cinemática e de baixo custo computacional. Em segundo plano, que tenha baixas correntes espúrias, variação de razão de densidade e baixa dissolução de pequenas bolhas. Portanto, de acordo com a Tabela 5.2, os modelos que melhor se ajustam às necessidades são os de gradiente de cor e potencial inter-partícula, porém, levando em conta a Tabela 5.1 o modelo de potencial

Tabela 5.2 – Comparação entre modelos multifásicos.

	Modelos		
	Potencial inter-partícula	Gradiente de cor	Energia Livre
Tensão interfacial	Necessário teste de bolha estática	Parâmetro de entrada	Parâmetro de entrada
Correntes espúrias	Alta	Média	Baixa
Dissolução de pequenas bolhas	Baixa	Muito baixa	Alta
Razão de densidade	1000	1000	1
Razão de viscosidade	1000	1000	8
Custo computacional	Médio	Médio	Médio
	Teoria do campo médio	Interface difusa estabilizada	
Tensão interfacial	Necessário teste de bolha estática	Parâmetro de entrada	
Correntes espúrias	Média	Muito baixa	
Dissolução de pequenas bolhas	Muito alta	Média	
Razão de densidade	15	1000	
Razão de viscosidade	Desconhecido	Desconhecido	
Custo computacional	Alto	Muito Alto	

inter-partícula se destaca com maior número de citações na literatura. Deste modo, é escolhido o modelo de potencial inter-partícula para a representação do problema no decorrer deste trabalho.

5.3.1 Modelo Potencial Inter-Partícula

O modelo potencial inter-partícula foi desenvolvido por Shan e Chen (1993), e vem sendo extensivamente usado para simulação de deslocamento de fluidos imiscíveis, como água e óleo, em meios porosos. O modelo consiste da representação de um potencial entre as partículas de cada fase, que mantém a coesão de cada fluido e resulta numa interface de separação das fases (LIU *et al.*, 2016).

A abordagem numérica do modelo consiste na utilização da equação *Lattice-Boltzmann*

para cada fase fluida presente. Portanto, reescrevendo a Equação 5.6, tem-se

$$f_{i,\sigma}^*(\mathbf{x}^* + \mathbf{e}_i\delta, t^* + \delta) = f_{i,\sigma}^*(\mathbf{x}^*, t^*) - \frac{1}{\tau_\sigma^*} (f_{i,\sigma}^*(\mathbf{x}^*, t^*) - f_{i,\sigma}^{eq,*}(\mathbf{x}^*, t^*)), \quad (5.10)$$

onde a função distribuição de equilíbrio é responsável por comunicar a interação das diferentes fases na evolução do sistema, sendo escrita na forma

$$f_{i,\sigma}^{eq,*}(\mathbf{x}^*, t^*) = W_i \rho_\sigma^* \left(1 + \frac{\mathbf{u}_\sigma^{eq,*} \cdot \mathbf{e}_i}{c_s^2} + \frac{1}{2c_s^4} \mathbf{u}_\sigma^{eq,*} \mathbf{u}_\sigma^{eq,*} : (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i - c_s^2 I) \right), \quad (5.11)$$

onde $\rho_\sigma^* = \sum_i f_{i,\sigma}^*$ é a densidade adimensional da fase, $\mathbf{u}_\sigma^{eq,*}$ é a velocidade de equilíbrio adimensional da fase, dada por

$$\mathbf{u}_\sigma^{eq,*} = \frac{\sum_\sigma \left(\sum_i \frac{f_{i,\sigma}^* \mathbf{e}_i}{\tau_\sigma^*} \right)}{\sum_\sigma \frac{\rho_\sigma^*}{\tau_\sigma^*}} + \frac{\tau_\sigma^* \mathbf{f}_\sigma^*}{\rho_\sigma^*}, \quad (5.12)$$

onde \mathbf{f}_σ^* é o vetor força por unidade de volume adimensional.

Na interação entre as diferentes fases, as forças atuantes em cada componente σ , incluem as forças coesivas $\mathbf{f}_{c,\sigma}^*$ da interação fluido-fluido, representadas por

$$\mathbf{f}_{c,\sigma}^*(\mathbf{x}^*, t^*) = -G_c \rho_\sigma^*(\mathbf{x}^*, t^*) c_s^2 \sum_i W_i \rho_{\bar{\sigma}}^*(\mathbf{x}^* + \mathbf{e}_i\delta, t^*) \mathbf{e}_i \quad (5.13)$$

e forças adesivas $\mathbf{f}_{ads,\sigma}^*$ da interação fluido-sólido, representadas por

$$\mathbf{f}_{ads,\sigma}^*(\mathbf{x}^*, t^*) = -G_{ads,\sigma} \rho_\sigma^*(\mathbf{x}^*, t^*) \sum_i W_i s(\mathbf{x}^* + \mathbf{e}_i\delta, t^*) \mathbf{e}_i, \quad (5.14)$$

onde G_c é o coeficiente de coesão, $\bar{\sigma}$ denota a fase oposta σ no sistema bifásico, $G_{ads,\sigma}$ é o coeficiente de adesão e $s(\mathbf{x}^* + \mathbf{e}_i\delta, t^*)$ é a função indicador que é igual a 1 para fase sólido e 0 para fase fluida. O coeficiente G_c é o parâmetro responsável pela intensidade da força coesão dos fluidos, controlando o nível de difusão de um fluido sobre o outro. No caso do presente trabalho, busca-se a faixa onde G_c mantém imiscibilidade dos fluidos. Assim como G_c o coeficiente de adesão G_{ads} é o parâmetro responsável por controlar a intensidade da força de adesão fluido-sólido, que está diretamente relacionado a intensidade do efeito de molhabilidade. Desta forma, a força resultante nas fases fluidas é representada pela soma destas forças atuantes

$$\mathbf{f}_\sigma^* = \mathbf{f}_{c,\sigma}^* + \mathbf{f}_{ads,\sigma}^* + \mathbf{f}_{ext,\sigma}^* \quad (5.15)$$

onde $\mathbf{f}_{ext,\sigma}^*$ são forças externas como por exemplo a gravidade.

Definida as equações atuantes na escala mesoscópica que descrevem o modelo de potencial inter-partícula proposto por Shan e Chen (1993), busca-se observar sua representação na escala macroscópica. Tal relação da escala mesoscópica com a macroscópica é obtida através da análise de Chapman-Enskog, que através de uma análise de escala permite a recuperação das Equações 4.1 e 4.2, representadas na forma adimensional do método por

$$\frac{\partial \rho_\sigma^*}{\partial t^*} + \nabla \mathbf{x}^* \cdot (\partial \rho_\sigma^* \mathbf{u}_\sigma^*) = 0, \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial \rho_\sigma^* \mathbf{u}_\sigma^*}{\partial t^*} + \nabla \mathbf{x}^* \cdot (\rho_\sigma^* \mathbf{u}_\sigma^* \mathbf{u}_\sigma^*) = -\nabla \mathbf{x}^* p_\sigma^* + \nabla \mathbf{x} \cdot (\rho_\sigma^* \nu_\sigma^* (\nabla \mathbf{x}^* \mathbf{u}_\sigma^* + \nabla \mathbf{x}^* \mathbf{u}_\sigma^{*T}) + \rho_\sigma^* \mathbf{g}_\sigma^*), \quad (5.17)$$

onde $p_\sigma^* = c_s^2 \rho_\sigma^*$ é a pressão da fase, $\nu_\sigma = c_s^2 \left(\tau_\sigma - \frac{1}{2} \right)$ é a viscosidade cinemática da fase e $p = c_s^2 (\rho_\sigma^* + \rho_\sigma^*) + c_s^2 G_c \rho_\sigma^* \rho_\sigma^*$ é a pressão total do sistema. Para detalhes do processo de expansão de Chapman-Enskog ver Kuzmin (2010).

5.3.2 Modelo Modificado

Algumas modificações no modelo de potencial inter-partícula, foram propostas posteriormente com objetivos de eliminar falhas e ampliar as aplicações do modelo. Dentre estas modificações destaca-se a explicitação do termo de força, o qual permite a utilização da discretização de segunda ordem no espaço-tempo, dada pela equação 5.9. Com a explicitação do termo de força, diferentes esquemas podem ser utilizados na sua representação. Entre estes esquemas destacam-se os propostos por Guo, Zheng e Shi (2002) e He, Shan e Doolen (1998) (KRÜGER *et al.*, 2017). O presente trabalho utiliza o esquema proposto por He, Shan e Doolen (1998), que consiste na aproximação da função distribuição pela função distribuição de equilíbrio, dada por

$$F_i^* = \mathbf{g}^* \cdot \nabla_{\xi_i^*} f_i^* \approx \mathbf{g}^* \cdot \nabla_{\xi_i^*} f_i^{eq,*} = \frac{\mathbf{f}^*}{\rho^*} \cdot \frac{\mathbf{e}_i - \mathbf{u}}{c_s^2} f_i^{eq,*}. \quad (5.18)$$

Outra modificação no modelo original, proposta por Shan (2006), está no termo força de coesão. Considerando uma expansão em séries de Taylor do termo $\rho^*(\mathbf{x}^* + \mathbf{e}_i \delta, t^*)$, presente na Equação 5.13, tem-se o aumento do alcance de interações entre os termos de densidade de acordo com a ordem de aproximação, como mostra a Figura 5.4. A equação modificada do termo de força é dada por

$$\mathbf{f}_{c,\sigma}^* = -G_c \rho_\sigma^*(\mathbf{x}, t) c_s^2 \sum_i w(|\mathbf{e}_i|^2) \rho_\sigma^*(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta, t) \mathbf{e}_i \quad (5.19)$$

onde $w(|e_i|^2)$ é o fator de ponderação de força atribuído aos comprimentos de interação de acordo com cada ordem. Na Tabela 5.3 pode-se observar os valores de $w(|e_i|^2)$ até a décima ordem. No presente trabalho é utilizada para todos os casos simulados, uma aproximação de décima ordem no cálculo da força coesiva $f_{c,\sigma}^*$. Para mais detalhes desta modificação ver Shan (2006) e Sbragaglia *et al.* (2007).

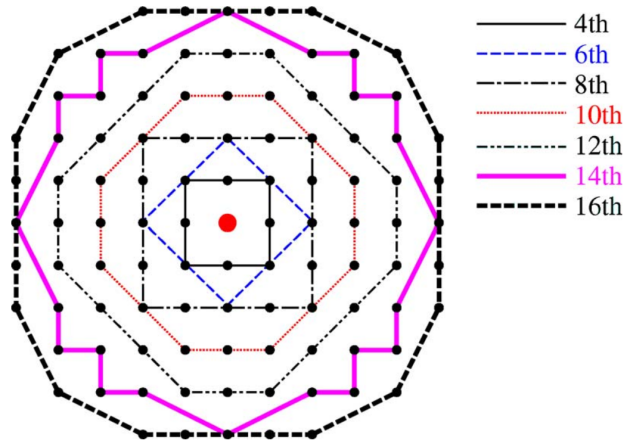


Figura 5.4 – Malha bidimensional de pontos para cada ordem (Fonte: Sbragaglia *et al.* (2007)).

Tabela 5.3 – Pesos para aproximações até a décima ordem em casos bidimensionais.

Ordem	$w(1)$	$w(2)$	$w(4)$	$w(5)$	$w(8)$	$w(9)$	$w(10)$
4^a	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{12}$					
6^a	$\frac{4}{15}$	$\frac{1}{10}$	$\frac{1}{120}$				
8^a	$\frac{4}{21}$	$\frac{4}{45}$	$\frac{1}{60}$	$\frac{2}{315}$	$\frac{1}{5040}$		
10^a	$\frac{262}{1785}$	$\frac{93}{1190}$	$\frac{7}{340}$	$\frac{6}{595}$	$\frac{9}{9520}$	$\frac{2}{5355}$	$\frac{1}{7140}$

Ambas as modificações mencionadas contribuem para a melhoria das características gerais de acurácia e estabilidade do modelo, assim como, para as características específicas de redução da intensidade de correntes espúrias, maior alcance do parâmetro de razão de viscosidade e maior faixa de tensão interfacial (SHAN, 2006; PORTER *et al.*, 2012).

5.4 Condições de Contorno

As condições de contorno no método de *Lattice-Boltzmann*, obviamente, definem propriedades nas fronteiras do problema, como por exemplo pressão e perfil de velocidade. Porém, também servem para completar o processo de propagação das populações de partículas desconhecidas nas fronteiras a cada passo de tempo. Com o propósito de determinar estas funções distribuição desconhecidas nas fronteiras, de modo a representar as condições de contorno do problema, o presente trabalho utiliza o método de *bounce-back* referente a condição de não escorregamento nas superfícies sólidas, e o método proposto por Zou e

He (1997) correspondente as condições de pressão e velocidade constantes. Também é abordada condição de periodicidade devido à sua utilização nos problemas de verificação.

5.4.1 Bounce-back

A condição de não escorregamento para superfícies sólidas planas e estáticas em contato com fluidos é reproduzida pelo método *bounce-back*, tendo a finalidade de simular o atrito viscoso entre fluido e sólido. Esta condição de contorno consiste em opor a função distribuição em contato com a superfície sólida, e conseqüentemente, atribuir valor a função distribuição desconhecida da fronteira.

Na literatura duas formatações de *bounce-back* ganham destaque, sendo a padrão e a entre *lattices*. A forma padrão considera a fronteira sólida exatamente sobre os nós da malha e a entre *lattices* considera a fronteira entre os nós da malha, como mostra a Figura 5.5. A diferença entre as formatações na implementação é caracterizada, pela inversão imediata das funções distribuição na formatação padrão, ou seja $f_{-i}^*(\mathbf{x}, t) = f_i^*(\mathbf{x}, t)$, enquanto na formatação entre *lattices* a inversão é feita após um passo de tempo, $f_{-i}^*(\mathbf{x}, t + \delta) = f_i^*(\mathbf{x}, t)$, sendo $-i$ a representação da direção oposta de i . Segundo Guo e Shu (2013) a formatação entre *lattices* possui precisão de segunda ordem, enquanto a padrão apresenta uma precisão de primeira ordem. Portanto no presente trabalho é utilizada a formatação entre *lattices*.

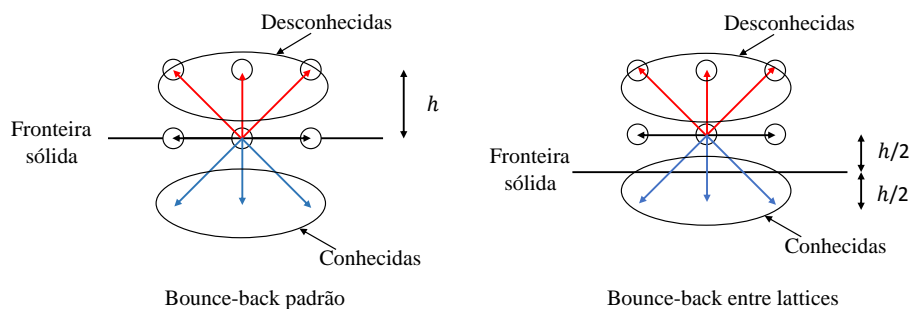


Figura 5.5 – Representação da condição de contorno em fronteira: bounce-back padrão e entre *lattices*.

5.4.2 Condição de Contorno de Zou e He

A condição de contorno proposta por Zou e He (1997) é baseada na simetria do tensor pressão que é representada pela igualdade das funções distribuição de não equilíbrio, dada por

$$f_{-i}^{neq*} = f_{-i}^* - f_{-i}^{eq*} = f_i^* - f_i^{eq*} = f_i^{neq*}, \tag{5.20}$$

que permite a determinação da função distribuição desconhecida na fronteira com base no conhecimento das funções distribuição de equilíbrio e da função distribuição oposta. Esta igualdade permite a implementação das condições de pressão constante e perfil de velocidade. Para perfis de velocidade nula é recuperada a formatação de *bounce-back* padrão.

5.4.3 Periodicidade

A condição de contorno de periodicidade no método de Lattice-Boltzmann é caracterizada pela atribuição das funções distribuição conhecidas da fronteira às funções distribuição desconhecidas da fronteira oposta. Para mais detalhes ver Mohamad (2011) e Guo e Shu (2013). Na Figura 5.6 pode-se observar a imagem representativa da aplicação da condição de contorno periódica no canal, onde as funções distribuição conhecidas na entrada do canal são atribuídas as funções distribuição desconhecidas na saída do canal e vice-versa. A condição de periodicidade será utilizada apenas em problemas de verificação específicos e não no problema principal deste trabalho.

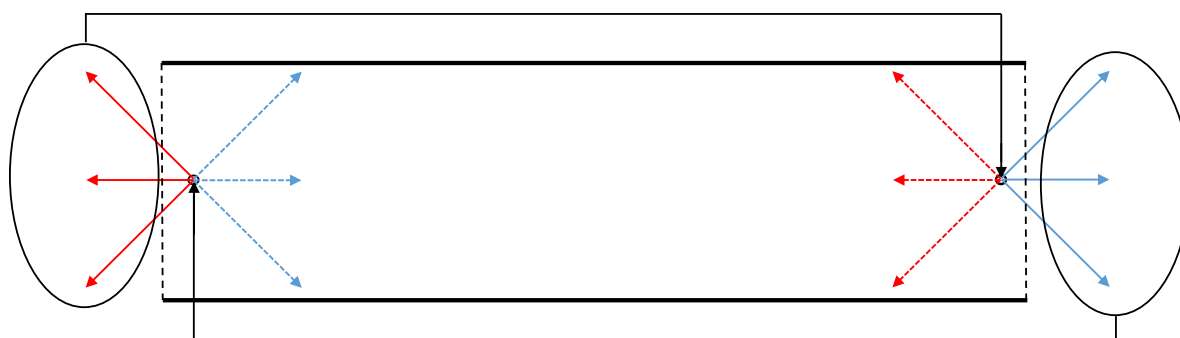


Figura 5.6 – Condição de contorno de periodicidade.

5.5 Relação de Escala

Como o método de *Lattice-Boltzmann* consiste de um modelo cinético adimensional de gases, o efeito de compressibilidade deve ser minimizado com objetivo de representar o escoamento de fluidos incompressíveis. Para garantir tal efeito de incompressibilidade, um baixo número de Mach deve ser atingido no escoamento, sendo o número de Mach um parâmetro adimensional local, dado por

$$Ma = \frac{|\mathbf{u}|}{U_s}, \quad (5.21)$$

onde U_s é a velocidade do som. Entretanto, na escala do método *Lattice-Boltzmann* a velocidade do som U_s é representada pelo parâmetro c_s , como resultado da discretização

do espaço de velocidades e conseqüentemente, o número de Mach é reescrito para

$$Ma = \frac{|\mathbf{u}|}{c_s}. \quad (5.22)$$

Desta forma, o modulo da velocidade $|\mathbf{u}|$ necessita ser relativamente menor c_s , mantendo $Ma < 1$ e minimizando os erros de compressibilidade. Devido as aproximações de segunda ordem na discretização da equação de *Lattice-Boltzman*, o erro associado à compressibilidade é da ordem de Ma^2 (REIDER; STERLING, 1995; KRÜGER *et al.*, 2017). Nos casos onde a velocidade do escoamento não permite $Ma < 1$, pode se utilizar uma redução de escala mantendo constante parâmetros adimensionais específicos do problema.

Com base nesta necessidade de relações de escala Latt (2008) propõe uma metodologia utilizando os fatores de escala espacial dx e temporal dt , para os parâmetros de comprimento, velocidade, viscosidade cinemática e densidade. Tal metodologia proposta pode ser extendido, incluindo o fator de escala de massa dm . Na Tabela 5.4 pode-se observar a metodologia proposta, sendo o subíndice e a indicação do parâmetro na escala do método *Lattice-Boltzman*. Neste trabalho as unidade na escala do método *Lattice-Boltzman* são indicadas pelo sobrescrito LB , ou seja $[m]^{LB} = [m]/dx$, $[t]^{LB} = [t]/dt$ e $[kg]^{LB} = [kg]/dm$, onde suas relações com a escala real estão associadas aos fatores de escala.

Tabela 5.4 – Pesos para aproximações de até décima ordem em casos bidimensionais.

Parâmetro	Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
Comprimento	$H [m]$	dx	$H_e = \frac{H}{dx} [m]^{LB}$
Velocidade	$\mathbf{u} \left[\frac{m}{s} \right]$	$\frac{dx}{dt}$	$\mathbf{u}_e = \frac{\mathbf{u}}{dx/dt} \left[\frac{m}{s} \right]^{LB}$
Viscosidade cinemática	$\nu \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$\frac{dx^2}{dt}$	$\nu_e = \frac{\nu}{dx^2/dt} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
Densidade	$\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$\frac{dm}{dx^3}$	$\rho_e = \frac{\rho}{dm/dx^3} \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
Pressão	$p \left[\frac{kg}{s^2m} \right]$	$\rho \frac{dx^2}{dt^2}$	$p_e = \frac{p}{\rho \frac{dx^2}{dt^2}} \left[\frac{kg}{s^2m} \right]^{LB}$

Os parâmetros de comprimento na escala $[m]^{LB}$ são determinados por números inteiros, de modo a representar o número de retículos envolvidos.

5.6 Teste de Malha

O teste de malha associado a relação de escala, busca minimizar o erro total relacionado ao método, dado pela somatório $E_{total} = E_{Ma} + E_{dx} + E_{dt}$, sendo E_{total} o erro total, E_{Ma} o erro associado à compressibilidade, E_{dx} o erro espacial associado à malha e E_{dt} o erro

temporal associado ao passo de tempo. A partir do erro de compressibilidade a relação entre os erros estabelecidos é dada por

$$E_{Ma} \propto \frac{E_{dt}}{E_{dx}} \propto \frac{dt^2}{dx^2} \propto \frac{1}{rel^2} \quad (5.23)$$

onde E_{Ma} é da ordem de Ma^2 como já mencionado, E_{dx} é da ordem de dx^2 , E_{dt} é da ordem de dt^2 e $rel = dx/dt$ representa a razão de escalas. As ordens quadráticas dos erros resultam do processo de discretização de segunda ordem do espaço tempo (REIDER; STERLING, 1995; KRÜGER *et al.*, 2017).

O teste descrito nesta seção foi proposto por Meira (2016), que tem como objetivo minimizar o erro total. A metodologia do teste é caracterizado pelo controle e minimização dos erros em duas etapas. Na etapa inicial é feito o teste de refinamento temporal e em seguida é feito o refinamento de malha acompanhado de um segundo refinamento temporal que reduz o erro de compressibilidade sucessivamente.

Inicialmente fixa-se uma malha com dx e diminui-se dt pela metade progressivamente de maneira a minimizar os valores de E_{Ma} e E_{dt} , dentro de uma tolerância aceitável. Este procedimento elimina os erros temporais, deixando o E_{total} dominado por E_{dx} , ou seja $E_{total} \approx E_{dx}$. Com a diminuição progressiva de dt para dx fixo, o valor de rel cresce progressivamente.

Um fator que impede a utilização de valores relativamente baixos de dt , é sua influência no tempo de relaxação τ , que quando muito próximos a 0,5 interferem na estabilidade do método.

Em seguida, refina-se dx dobrando o número de pontos da malha, acompanhado pelo aumento do valor de rel na mesma proporção. Este procedimento resulta numa diminuição pela metade de dt em relação a dx , garantido que continue o $E_{total} \approx E_{dx}$. Portanto, o sucessivo refinamento dx garante que os resultados convirjam para uma solução independente de dx e dt , considerando uma determinada tolerância.

Para problemas onde o número de capilaridade é um parâmetro de referência, a etapa inicial do teste de malha proposto por Meira (2016) não pode ser aplicada devido a variação de dt para dx e dm fixos, alterar o número de capilaridade. Portanto, ajusta-se dt , dx e dm inicialmente e aplica-se diretamente a segunda etapa do teste de malha, onde dobra-se a malha e rel , de maneira a convergir os resultados com a diminuição do erro total.

5.7 Estrutura do Código Computacional

Neste trabalho, o método de *Lattice-Boltzmann* é implementado através da linguagem de programação Fortran, seguindo o fluxograma representado na Figura 5.7. A estrutura do fluxograma está dividida em sete etapas ordenadas por setas, cada etapa consistem em:

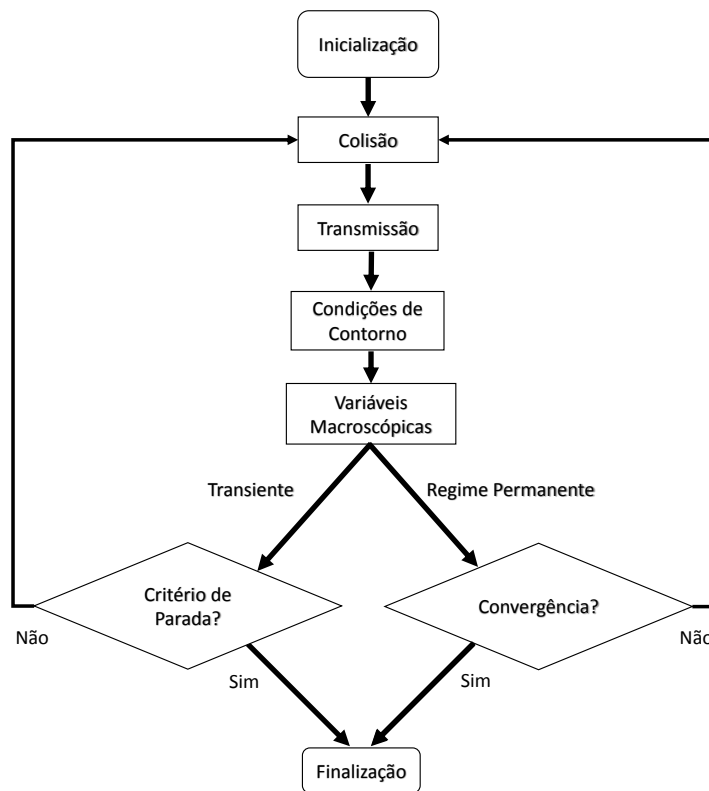


Figura 5.7 – Fluxograma da estrutura computacional do método de *Lattice-Boltzmann*.

- **Inicialização** - Na etapa inicialização são definidas as variáveis do problema e feita as atribuições de valores.
- **Colisão** - Após a inicialização das variáveis é feito o processo de colisão, que consiste no cálculo da parte direita da Equação 5.9, ou seja

$$\hat{f}_{i,\sigma}^{pc}(\mathbf{x}^*, t^*) = \hat{f}_{i,\sigma}(\mathbf{x}^*, t^*) - \frac{1}{\tau_{\sigma}^*} (\hat{f}_{i,\sigma}^*(\mathbf{x}^*, t^*) - f_{i,\sigma}^{eq,*}(\mathbf{x}^*, t^*)) + \left(1 - \frac{1}{2\tau_{\sigma}^*}\right) \delta F_{i,\sigma}^*(\mathbf{x}^*, t^*), \quad (5.24)$$

onde o sobrescrito *pc* determina a função distribuição de pós-colisão. A interação das diferentes fases ocorre através do termo de força $F_{i,\sigma}^*$, em função das forças resultantes da interação fluido-fluido e fluido-sólido.

- **Transmissão** - Em seguida ao processo de colisão é feito o processo de transmissão, que consiste em deslocar a função distribuição em suas respectivas direções, algebricamente representada por

$$\hat{f}_{i,\sigma}(\mathbf{x}^* + \mathbf{e}_i \delta, t^* + \delta) = \hat{f}_{i,\sigma}^{pc}(\mathbf{x}^*, t^*). \quad (5.25)$$

- **Condições de Contorno** - Após o processo de colisão e transmissão são aplicadas às condições de contorno, apresentadas na Seção 5.4, de acordo com as características

do problema.

- **Variáveis Macroscópicas** - Depois da aplicação das condições de contorno as funções distribuição estão definidas em todos os pontos da malha. Portanto, calcula-se as propriedades macroscópicas de acordo com as Equações 5.3, 5.4, 5.12, 5.13 e 5.14
- **Convergência** - Após as etapas de colisão, transmissão, condição de contorno e variáveis macroscópicas, é completado um passo de tempo, ou uma iteração do problema. Para problemas com análise em regime permanente é definido o critério de convergência dado pelo módulo da variação de um parâmetro em um determinado intervalo de iterações, algebricamente representado por

$$\left| \frac{X^{it} - X^{it-N_{it}}}{X^{it-N_{it}}} \right| \leq \text{Tolerância}, \quad (5.26)$$

onde X representa a variável escolhida e N_{it} o número de interações. Quando o critério de convergência estabelecido é menor que a tolerância definida o código passa para etapa de finalização, caso contrário as iterações continuam com o código retornando a etapa de colisão.

- **Critério de Parada** - No caso de problemas transientes, após a etapa de variáveis macroscópicas é definido um critério de parada que é verificado a cada iteração. Este ponto de parada varia de acordo com os problemas, podendo ser um número de iterações preestabelecidos ou o alcance de uma variável até um valor estabelecido. Quando o critério de parada for atingido o código passa para a etapa de finalização, caso contrário as iterações continuam com o código retornando à etapa de colisão.
- **Finalização** - Na etapa final são coletados para análise os parâmetros de interesse, como campo de densidade, de velocidade e de forças atuantes, assim como parâmetros resultantes específicos.

5.8 Síntese do Capítulo

No presente capítulo foram abordados diferentes aspectos do método de *Lattice-Boltzmann*, tais como o histórico do método, processos de discretização, modelos multifásicos, condições de contorno, relação de escala, teste de malha e estrutura do código computacional. Destacam-se os processos de discretização e sua relação com os erros do método, a abordagem do modelo multifásico de potencial inter-partícula com suas modificações e os procedimentos de relação de escala e teste de malha do método.

6 PROBLEMAS DE VERIFICAÇÃO

Neste capítulo são apresentados quatro problemas de verificação: bolha estática, escoamento de dois fluidos paralelos entre placas planas, deslocamento de fluidos imiscíveis num canal e ângulo de contato estático. Tais verificações permitem a avaliação dos limites de estabilidade e erros numéricos, do modelo de potencial inter-partícula para parâmetros específicos do problema principal, além de confirmarem a aplicação do método de *Lattice-Boltzmann* à simulação do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meios porosos.

Todos os resultados obtidos no decorrer desta seção estão apresentados na escala do método de *Lattice Boltzmann*. Sendo que, correlações com outras escalas dos problemas podem ser estabelecidas através dos fatores de escala determinados na Seção 5.5.

Nos presentes problemas, são considerados dois fluidos de mesmas densidades $\rho_1 = \rho_2 = 800[kg/m^3]$ e de viscosidades $\nu_2 = 10^{-3}[m^2/s]$ e $\nu_1 = 10^{-3}/M[m^2/s]$. De maneira que o fluido 2 representa as propriedades de um petróleo leve, enquanto a viscosidade cinemática do fluido 1 é variada em função da razão de viscosidade.

6.1 Bolha Estática

O teste de bolha estática é comumente utilizado para determinar a tensão interfacial entre fluidos imiscíveis. A geometria do problema e condições de contorno são mostrados na Figura 6.1. A bolha estática de raio r_b , formada pelo fluido 2, permanece imersa no fluido 1, no centro do volume quadrado de comprimento $H = 1[m]$, com fronteiras periódicas representadas pelas linhas tracejadas. As considerações iniciais deste problema são regime permanente, temperatura constante, força gravitacional nula e ambos fluidos incompressíveis e newtonianos.

6.1.1 Teste de Imiscibilidade

Antes da análise específica da tensão interfacial, se faz necessário um teste de imiscibilidade. O teste é feito com base no coeficiente G_c , que controla a intensidade da força de coesão das fases. Variando G_c é possível determinar as faixas de miscibilidade e imiscibilidade, sendo que apenas na faixa imiscível o problema da bolha estática pode ser realmente representado. Para detalhes dos fatores de escalas e critério de convergência, ver Apêndice C.1.1.

Neste teste, a influência de G_c é observada monitorando a densidade do fluido 2 ($\rho_2 = 1[kg/m^3]^{LB}$) e do fluido 1 ($\rho_1 = 1[kg/m^3]^{LB}$), no centro do volume com $H = 80[m]^{LB}$ e $r_b = 25[m]^{LB}$, para três diferentes razões de viscosidade cinemática, $M = 1$, $M = 100$

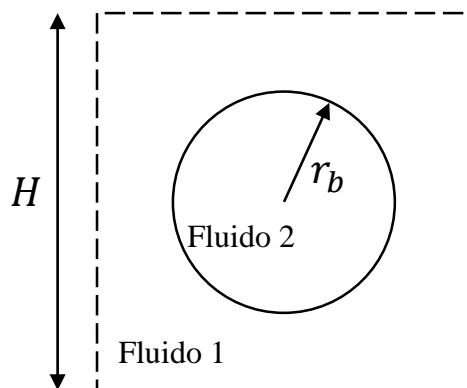


Figura 6.1 – Geometria e condições de contorno da bolha estática.

e $M = 500$. Os resultados obtidos para faixa de G_c verificada na Figura 6.2, demonstram que valores de $G_c < 2$ ocorre a difusão de um fluido sobre o outro, enquanto $2 < G_c < 2,5$ percebe-se uma região de transição da interação dos fluidos e para $G_c > 2,5$ pode ser considerado, com uma certa tolerância, a imiscibilidade dos fluidos. Também pode-se considerar que o comportamento das fases com a variação G_c independe de M , para uma certa tolerância. Na Figura 6.3 pode-se observar a representação do campo de densidade do fluido 2 para as três faixas de G_c mencionadas.

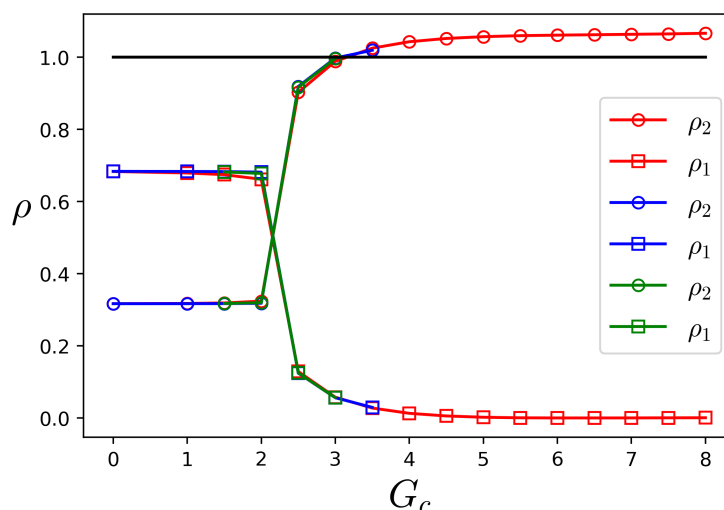


Figura 6.2 – Variação da densidade ρ_1 e ρ_2 , no centro do volume em relação à G_c : $M = 1$ (—); $M = 100$ (—); $M = 500$ (—).

Além da faixa de imiscibilidade, na Figura 6.2 também pode-se observar a influência de G_c na estabilidade do método em relação a razão de viscosidade. As faixas simuláveis de G_c para $M = 1$, $M = 100$ e $M = 500$, são $0 \geq G_c \leq 8$; $0 \geq G_c \leq 3,5$; $1,5 \geq G_c \leq 3$, respectivamente. Deste modo, é observada uma diminuição da faixa simulável de G_c com

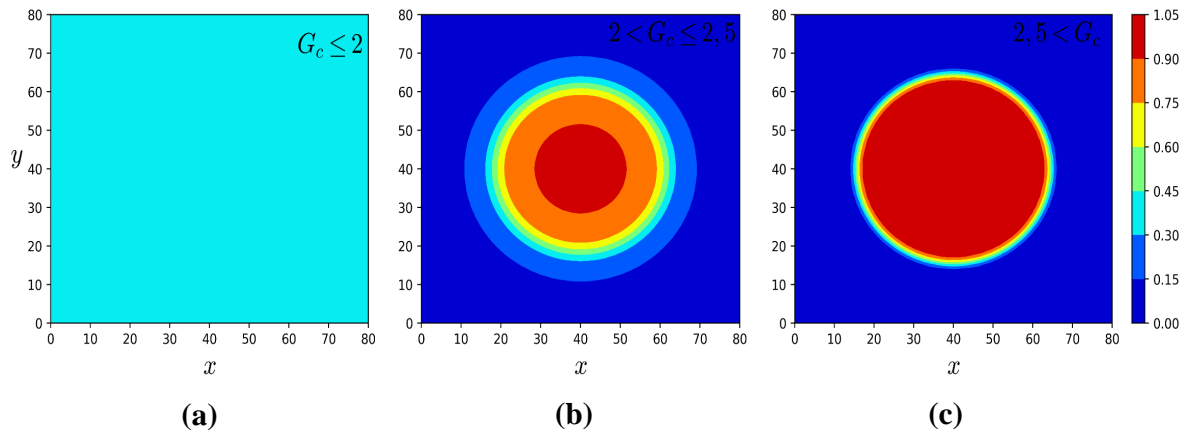


Figura 6.3 – Campo de densidade do fluido 2: (a) faixa miscível $G_c \leq 2$; (b) faixa de transição $2 < G_c \leq 2,5$ e; (c) faixa imiscível $2,5 < G_c$.

o aumento de M partindo de 1, invertendo as relações de viscosidade, ou seja $M = 1$, $M = \frac{1}{100}$ e $M = \frac{1}{500}$, a faixa de simulável de G_c reduz com a diminuição de M partindo de 1.

Outro comportamento notado na Figura 6.2 é a densidade maior que $1[kg/m^3]^{LB}$, presente na faixa considerada imiscível. Este comportamento se deve à formação de uma área de separação dos fluidos na interface de interação, resultante das forças repulsivas controladas por G_c , que diminuem a área ocupada de cada fluido. Na Figura 6.4(a) é ilustrado o campo de densidade do meio, dado por $\rho = \rho_1 + \rho_2$ em cada posição, onde observa-se uma região de menor densidade localizada na interface de interação dos fluidos. Enquanto na Figura 6.4(b) é plotada a densidade dos fluidos 1 e 2, ao longo de x na altura $y = H/2$, de modo que é possível verificar as regiões de transição da densidade que determinam as separações das fases.

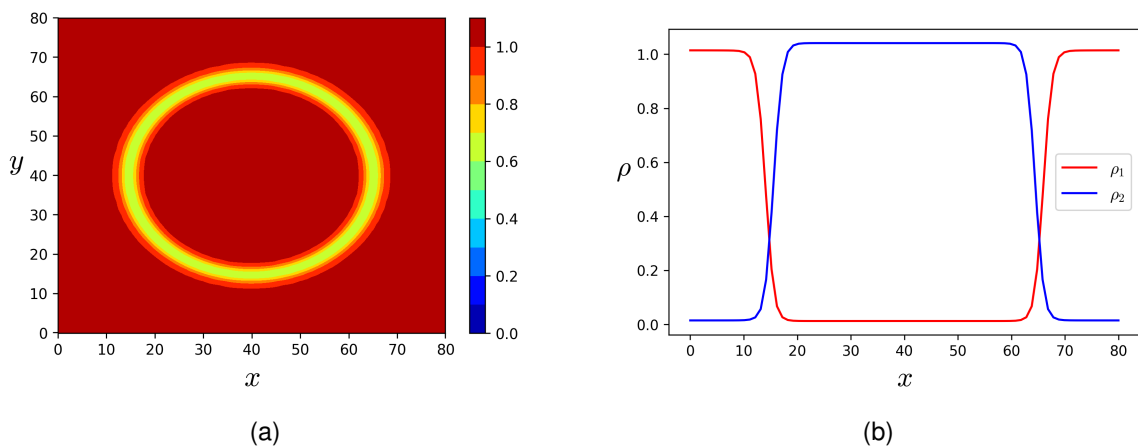


Figura 6.4 – Região de separação dos fluidos na interface de interação: (a) Densidade total do meio, $\rho = \rho_1 + \rho_2$; (b) Densidade ao longo de x em $y = H/2$.

As faixas de imiscibilidade obtidas neste teste servem como base para os demais problemas. Portanto, para $G_c > 2,5$ o problema pode ser considerado como imiscível.

6.1.2 Tensão Interfacial

A análise da tensão interfacial entre os fluidos imiscíveis 1 e 2 é feita com base na Equação 2.2, variando r_b e medindo Δp para cada caso. Deste modo, verifica-se a representação física da tensão interfacial pelo modelo potencial inter-partícula modificado, considerando $G_c = 3$ num volume com $H = 100[m]^{LB}$ e variado r_b de $40[m]^{LB}$ até $18[m]^{LB}$, para três diferentes razões de viscosidade, $M = 1$, $M = 100$ e $M = 500$. Para detalhes dos fatores de escalas, ver Apêndice C.1.2. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 6.5 e comparados com os resultados obtidos por Porter *et al.* (2012).

Na Figura 6.5 pode ser observado nos símbolos em preto os resultados do presente trabalho, e nos símbolos em azul e vermelho os resultados obtidos por Porter *et al.* (2012) para o modelo original proposto por Shan e Chen (1993) e para o modelo com modificações apresentado neste trabalho, respectivamente. Ambos resultados apresentam o comportamento linear para variação de $1/r_b$ por Δp , demonstrando uma tensão interfacial constante de acordo com a Equação 2.2. Porém, também é possível observar que os resultados obtidos com o modelo modificado (em preto e vermelho) apresentam uma independência da razão de viscosidade, diferente do modelo original.

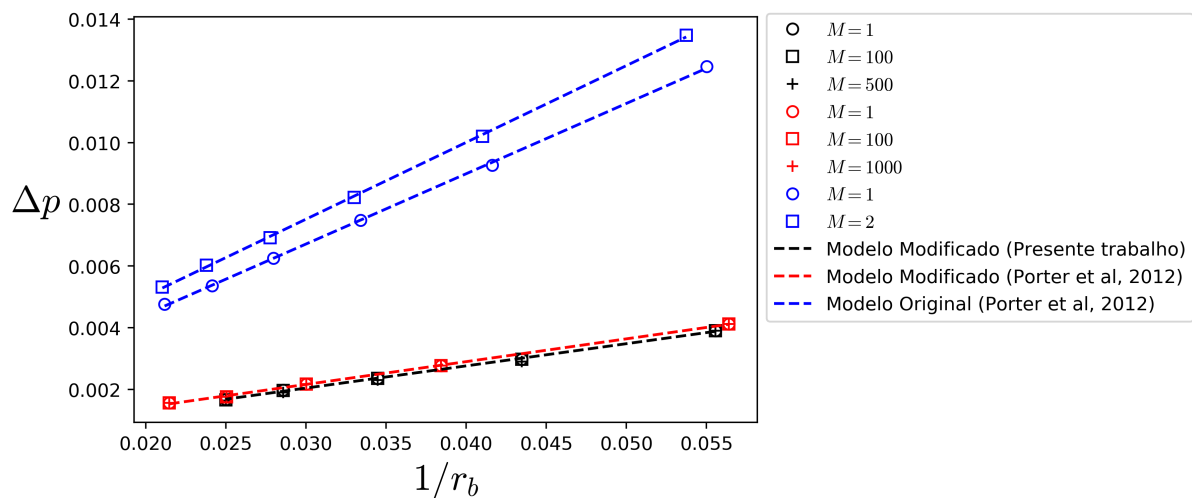


Figura 6.5 – Variação da diferença de pressão em relação ao raio da bolha, para diferentes razões de viscosidade.

Investigando a influência do parâmetro G_c na tensão interfacial entre os fluidos, mantém-se uma razão de viscosidade constante ($M = 1$) e varia-se G_c , na faixa considerada imiscível de 3 até 7,5, calculando cada tensão interfacial. Os resultados foram obtidos para três diferentes viscosidades, apresentados na Figura 6.6, onde pode-se observar uma relação proporcional de G_c com γ . Os presentes resultados são comparados com os obtidos por Porter *et al.* (2012). No modelo modificado os resultados apresentados (em vermelho e preto) demonstram uma independência da viscosidade na tensão interfacial, ao contrário do modelo original.

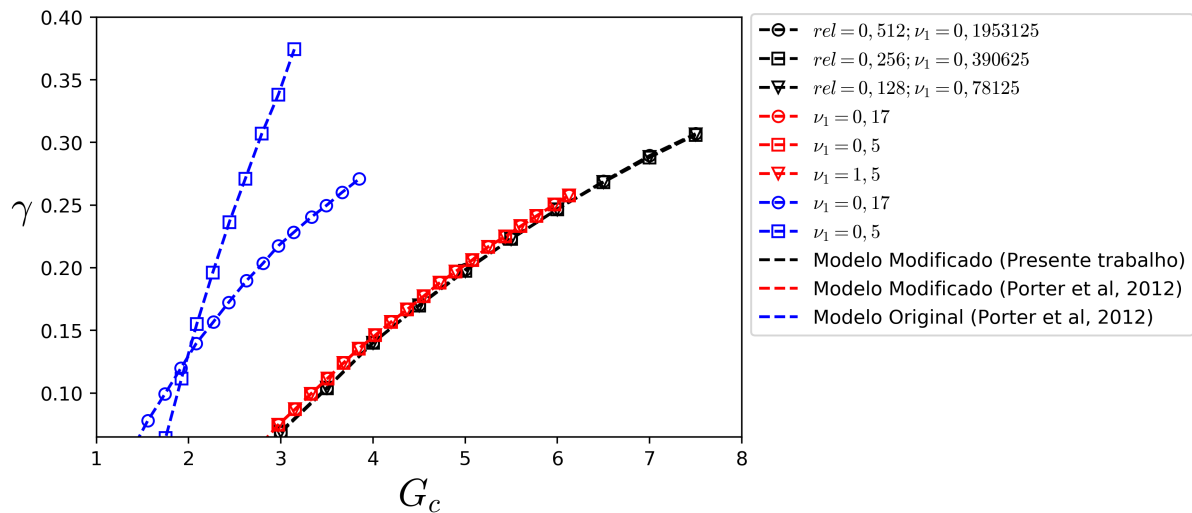


Figura 6.6 – Variação da tensão interfacial em relação ao coeficiente de coesão.

Portanto, como observado nas Figuras 6.5 e 6.6, as concordâncias entre os presentes resultados e os obtidos por Porter *et al.* (2012) utilizando o modelo modificado são consideradas satisfatórias. Em vista, que os mesmos comportamentos de tensão interfacial constante para variação de r_b , independência da tensão interfacial em relação à viscosidade e a razão viscosidade, foram observados.

6.2 escoamento de Dois Fluidos Paralelos entre Placas Planas

O segundo problema de verificação analisado consiste no escoamento por diferença de pressão de dois fluidos imiscíveis paralelos num canal bidimensional. A geometria do problema e condições de contorno são mostradas na Figura 6.7, onde observa-se o fluido 1 ocupando uma altura a do canal, em paralelo com fluido 2, para condições de pressão constante na entrada e saída do canal, e condição de não escorregamento nas paredes. As considerações deste problema são regime permanente, escoamento laminar, temperatura constante, força gravitacional nula e ambos fluidos incompressíveis e newtonianos. A verificação deste problema é feita através da comparação do perfil de velocidade obtido numericamente com o perfil analítico dado pela Equação C.2 no Apêndice C.2.

No problema exposto são considerados $H = 0,5[m]$, $L = 1[m]$ e $a = 0,25[m]$. O escoamento dos fluidos é dado por $\Delta p = 10^{-1}Pa$.

As simulações numéricas foram aplicadas utilizando a malha de referência $L = 200[m]^{LB}$ e $H = 100[m]^{LB}$, definida no teste de malha. Os resultados obtidos podem ser observados na Figura 6.8, onde os perfis de velocidade para diferentes razões de viscosidade, que variam na faixa de $2 \cdot 10^{-2} \leq M \leq 10^2$, são comparadas com os perfis analíticos. Para detalhes do critério de convergência, teste de malha e relações de escala, ver Apêndice

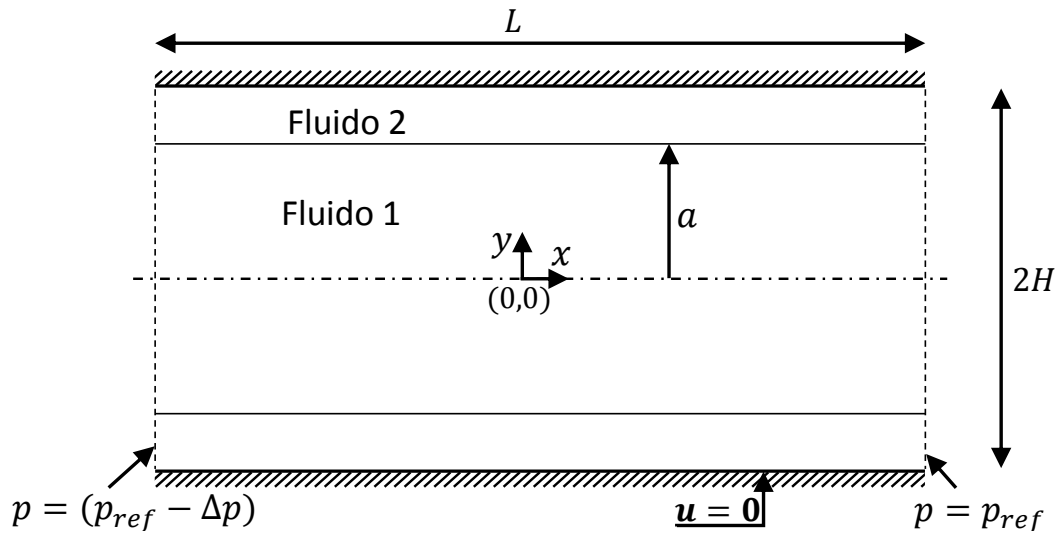


Figura 6.7 – Geometria e condições de contorno do escoamento de fluidos paralelos imiscíveis entre placas planas.

C.2.

Para o cálculo do erro entre o perfil numérico e o analítico, é utilizada a equação

$$EP = \frac{\left(\sum_x \sum_y \frac{u(x,y) - u_{ana}(x,y)}{u_{ana}(x,y)} 100 \right)}{HL}, \quad (6.1)$$

onde EP é o erro percentual médio, u_{ana} é a velocidade analítica. Na Tabela 6.1 é demonstrado o EP para as diferentes razões de viscosidade simuladas, sendo possível observar um aumento do EP com o aumento da razão de viscosidade para $M > 1$ e com a diminuição da razão de viscosidade para $M < 1$. Considerando uma tolerância de $EP < 5\%$, o modelo potencial inter-partícula é capaz de representar o escoamento, com erro numérico aceitável, apenas para faixa de $1/10 \leq M \leq 50$.

Tabela 6.1 – Erro percentual médio entre os perfis analíticos e numéricos, para variação de M .

M	100	50	10	5	1/5	1/10	1/50
EP	6,31%	4,03%	2,53%	2,18%	2,90%	4,17%	29,98%

Portanto, a verificação do problema é feita para a faixa de viscosidade $1/10 \leq M \leq 50$. Para $M > 50$ e $M < 1/10$ o nível de refinamento espacial e temporal necessários (i.e malha e passos de tempo) para que o erro fique dentro da faixa estimada, impossibilita a simulação de acordo com os recursos computacionais disponíveis neste trabalho. No entanto, constata-se uma diminuição da razão de viscosidade aplicável ao presente problema em relação ao problema da bolha estática, possivelmente, devido ao comportamento dinâmico do problema.

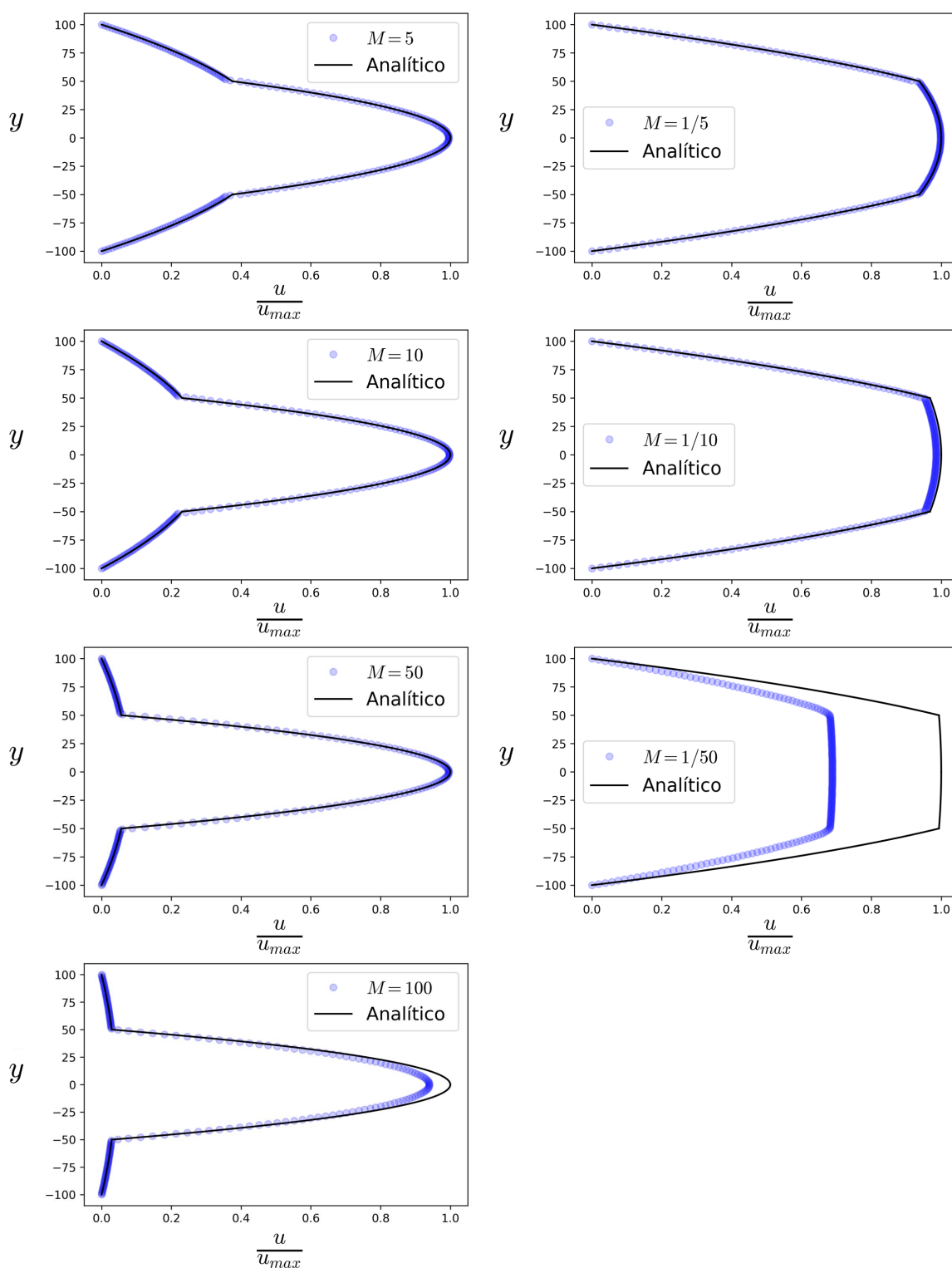


Figura 6.8 – Comparação dos perfis velocidade numérico (\circ) e analítico ($-$), para faixa de $2 \cdot 10^{-2} \leq M \leq 10^2$. O perfil de velocidade é apresentado na forma adimensional, onde u é dividido pela velocidade analítica no centro do canal $u_{ana}(L/2, H)$.

6.3 Deslocamento de Fluidos Imiscíveis num Canal

O problema de deslocamento de fluidos imiscíveis num canal consiste em um caso particular do problema principal onde a porosidade do meio é igual 1 e tem como objetivo verificar a aplicação do código numérico para a representação do processo de deslocamento de fluidos, assim como analisar a faixa simulável do número de capilaridade.

A geometria e condições de contorno, mostrados na Figura 6.9, são baseadas no problema estudado por Kang, Zhang e Chen (2004), os quais utilizaram do método de Lattice-Boltzmann com modelo de potencial inter-partícula. Inicialmente o canal encontra-se preenchido pelo fluido 2 e subitamente o fluido 1 é injetado com perfil desenvolvido, buscando a formação de um *finger* estável. A evitar o efeito de desenvolvimento do escoamento, o perfil de velocidade desenvolvido é inicialmente imposto através de todo o canal. Desta forma, as condições de contorno são de perfil de velocidade desenvolvido na entrada e saída do canal, e não deslizamento nas paredes. As considerações deste problema são escoamento laminar, temperatura constante, força gravitacional nula e ambos fluidos incompressíveis e newtonianos. A verificação é feita através da comparação com os resultados numéricos obtidos por Kang, Zhang e Chen (2004) para os parâmetros geométricos adimensionais de comprimento de *finger* L_{finger}/L , largura de *finger* H_{finger}/H e distância de escorregamento L_{des}/L .

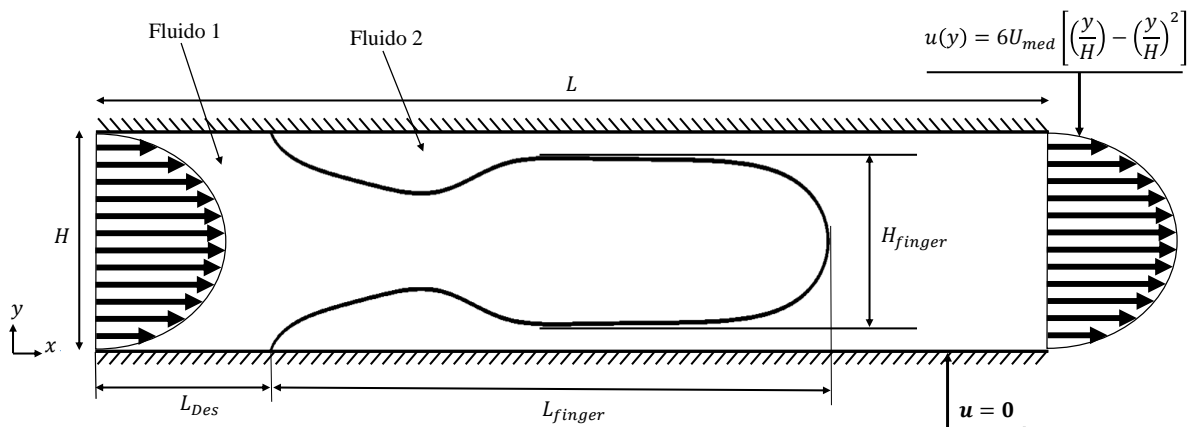


Figura 6.9 – Geometria e condições de contorno do deslocamento de fluidos imiscíveis.

Para o seguinte problema são considerados $L = 1[m]$ e $H = 0,165[m]$. O escoamento dos fluidos é dado pelo perfil de velocidade constante na entrada e saída do canal, representado pela equação

$$u(y) = 6U_{med} \left[\left(\frac{y}{H} \right) - \left(\frac{y}{H} \right)^2 \right], \quad (6.2)$$

onde \bar{U} é a velocidade média do perfil parabólico e $U_{max} = U_{med}3/2$.

Nas simulações feitas por Kang, Zhang e Chen (2004) a relação de escala do problema

é trabalhada, de maneira que na escala do método os parâmetros são dados por $\nu_2 = 0,333[m^2/s]^{LB}$, $\nu_1 = 0,333/M[m^2/s]^{LB}$, $L = 400[m]^{LB}$ e $H = 66[m]^{LB}$, considerando três diferentes velocidades $U_{max} = 0,1[m/s]^{LB}$, $U_{max} = 0,05[m/s]^{LB}$ e $U_{max} = 0,01[m/s]^{LB}$. Para detalhes da relação de escala, ver Apêndice C.2.

Utilizando a mesma relação de escala de Kang, Zhang e Chen (2004), na Figura 6.10 pode-se observar a comparação gráfica dos resultados obtidos para a evolução do deslocamento em intervalos de tempo fixo. Os resultados foram obtidos considerando $G_c = 4$ e o número de capilaridade é calculado por $Ca = \frac{\mu_2 U_{max}}{\gamma}$.

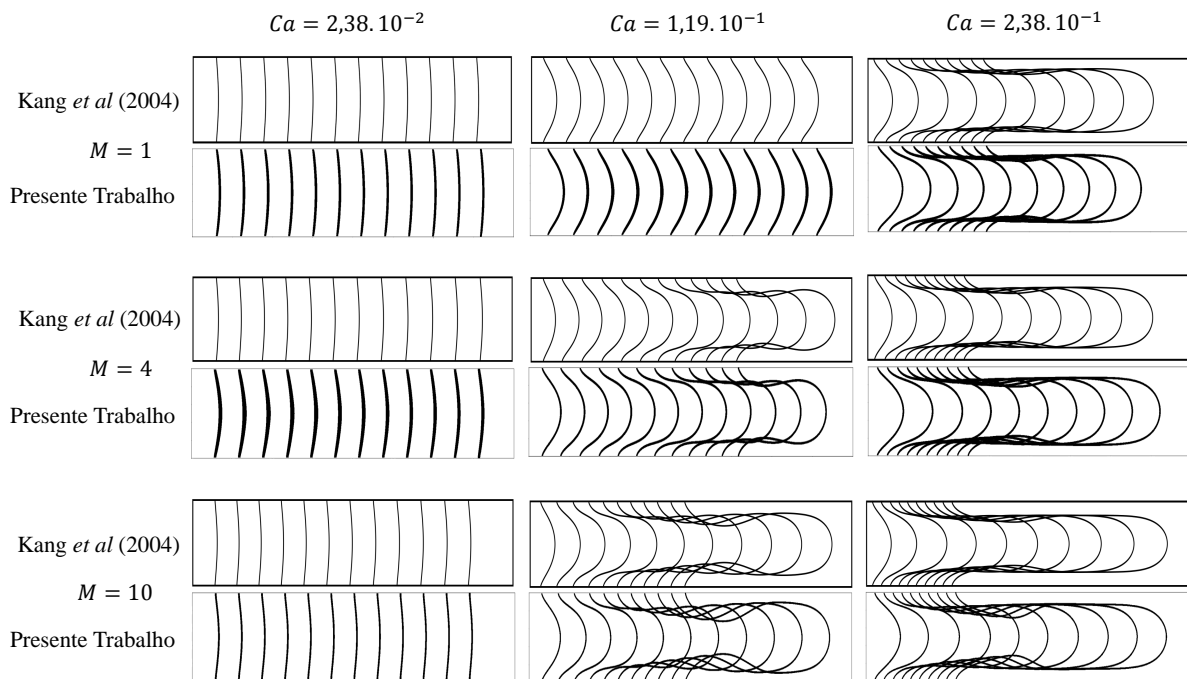


Figura 6.10 – Comparação entre os resultados do presente trabalho e de Kang, Zhang e Chen (2004). Os intervalos de tempo para $Ca = 2,38.10^{-2}$, $Ca = 1,19.10^{-1}$ e $Ca = 2,38.10^{-1}$, são 5000, 1000 e 500[s]^{LB}, respectivamente.

Contudo, aplicando o teste de malha no caso considerado crítico, devido a maior razão de viscosidade e número de capilaridade ($M = 10$ e $Ca = 2,38.10^{-1}$), é observado $L = 800[m]^{LB}$ e $H = 132[m]^{LB}$ como malha de referência, em vez de $L = 400[m]^{LB}$ e $H = 66[m]^{LB}$ como utilizado por Kang, Zhang e Chen (2004). Para detalhes do teste de malha ver Apêndice C.3. Deste modo, comparando os parâmetros adimensionais de comprimento e largura de *finger*, e distância de escorregamento, obtidos por Kang, Zhang e Chen (2004) com os do presente trabalho para a malha de referência (i.e $L = 800[m]^{LB}$ e $H = 132[m]^{LB}$) e a malha utilizada por Kang, Zhang e Chen (2004) (i.e $L = 400[m]^{LB}$ e $H = 66[m]^{LB}$), pode-se observar na Tabela 6.2 um aumento considerável na variação do parâmetro de distância de escorregamento, de 3,383% para 14,655%, sendo a variação

calculada por

$$\text{Variação} = \left| \frac{X_{\text{Kang}} - X}{X_{\text{Kang}}} \right| 100\% \quad (6.3)$$

onde X representa um dos três parâmetros geométricos adimensionais e o subíndice “Kang” indica os resultados Kang, Zhang e Chen (2004).

Tabela 6.2 – Comparação dos parâmetros geométricos adimensionais obtidos no presente trabalho com os obtidos por Kang, Zhang e Chen (2004), em $5000[s]^{LB}$.

	Malha	$\frac{L_{finger}}{L}$	$\frac{H_{finger}}{H}$	$\frac{L_{des}}{L}$
Kang, Zhang e Chen (2004)	400×66	0,665	0,673	0,266
Presente Trabalho	400×66	0,661	0,662	0,275
Variação		0,601%	1,631%	3,383%
Kang, Zhang e Chen (2004)	400×66	0,665	0,673	0,266
Presente Trabalho	800×132	0,695	0,676	0,232
Variação		4,511%	0,445%	14,655%

Considerando os resultados obtidos por Kang, Zhang e Chen (2004) e os obtidos no presente trabalho com a mesma escala, pode-se observar uma variação máxima menor que 4% dos parâmetros geométricos adimensionais, além de grande proximidade na comparação gráfica apresentada na Figura 6.10. Portanto, os resultados permitem a verificação do presente código numérico para a representação do processo de deslocamento de fluidos.

6.4 Ângulo de Contato Estático

O ângulo de contato estático é um problema comumente utilizado para verificar o desenvolvimento do código numérico para a representação do efeito de molhabilidade. A geometria e condições de contorno do problema podem ser observadas na Figura 6.11. Inicialmente o fluido 1 é representado por uma gota quadrada de raio r_{gg} imersa no fluido 2, e no decorrer do tempo a gota se ajusta à superfície do canal formando um ângulo de contato estático θ_c . Neste canal com comprimento $H = 0,5[m]$ e altura $L = 1[m]$, as condições de contorno são de não escorregamento nas superfícies e periodicidade nas bordas representada pelas linhas tracejadas. As considerações deste problema são regime permanente, temperatura constante, força gravitacional nula e ambos fluidos incompressíveis e newtonianos.

O cálculo do ângulo de contato estático no presente problema é feito através de uma

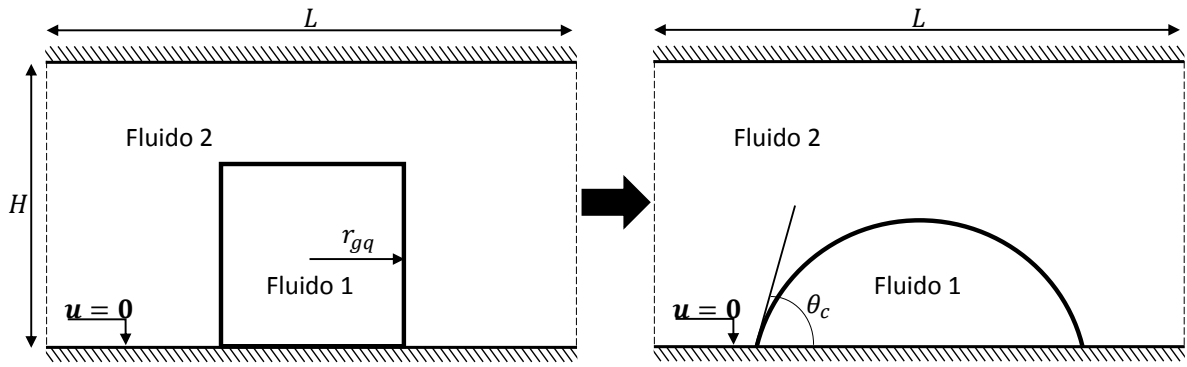


Figura 6.11 – Geometria e condições de contorno do problema de ângulo de contato estático.

medição geométrica, exemplificada na Figura 6.12 e dada pela equação

$$\begin{aligned} \theta_c &= \pi + \arctan\left(\frac{L_g/2}{r_g - H_g}\right) && \text{para } \theta_c \geq 90^\circ \\ \theta_c &= \arctan\left(\frac{L_g/2}{r_g - H_g}\right) && \text{para } \theta_c \leq 90^\circ, \end{aligned} \quad (6.4)$$

onde L_g é o comprimento de base da gota, H_g é a altura da gota e r_g é o raio da gota dado por

$$r_g = \frac{4H_g^2 + L_g^2}{8H_g}. \quad (6.5)$$

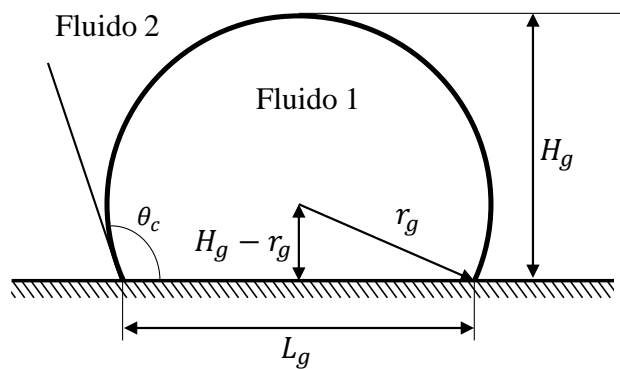


Figura 6.12 – Medição geométrica do ângulo de contato estático.

As simulações numéricas foram aplicadas utilizando a malha de referência $L = 200[m]^{LB}$ e $H = 100[m]^{LB}$, obtida no teste de malha. Os resultados são obtidos, para $M = 1$ e $r_{gq} = 26[m]^{LB}$, variando o coeficiente G_{ads} para diferentes valores G_c . O coeficiente de adesão do fluido 2 ($G_{ads,2}$) é considerado igual ao negativo do fluido 1 ($G_{ads,1}$) para todos os casos, ou seja, $G_{ads} = G_{ads,1} = -G_{ads,2}$. Para detalhes do teste de malha ver Apêndice C.4

Na Figura 6.13 são ilustrados os valores obtidos de θ_c para variação de G_{ads} em diferentes valores de G_c , podendo-se notar que com o aumento de G_c é necessário o aumento de G_{ads} para obter o mesmo valor de θ_c . Tal comportamento é condizente com a

interpretação do efeito de molhabilidade, que consiste na competição entre forças adesivas da interação fluido-sólido (G_{ads}) com as forças coesivas de cada fluido (G_c).

Os resultados obtidos por Huang *et al.* (2007) utilizando o modelo potencial inter-partícula original proposto por Shan e Chen (1993) para $G_c = 0,9$, também podem ser observados na Figura 6.13, notando-se uma proximidade com o presente resultado em $G_c = 3$, assim como o mesmo comportamento perante a variação do G_{ads} . A diferença de valor de G_c na comparação com Huang *et al.* (2007) ocorre devido a utilização da discretização de segunda ordem do espaço-tempo nos presentes resultados, porém ambos os valores de G_c representam o início da faixa de imiscibilidade em suas escalas e por isto apresentam proximidades em relação aos valores de θ_c .

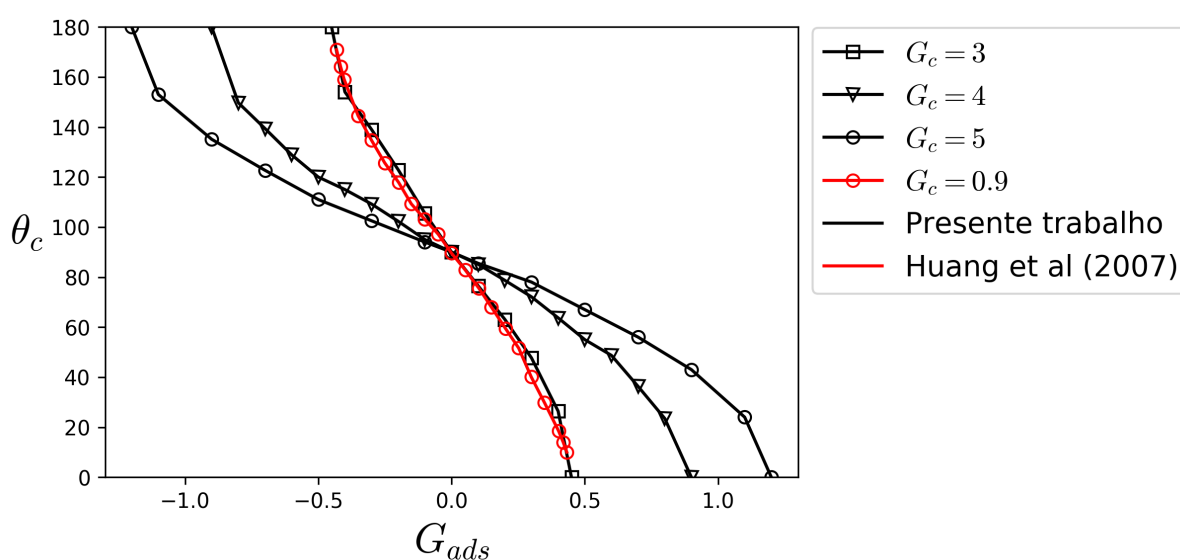


Figura 6.13 – Valores do ângulo de contato estático (θ_c) pelo coeficiente de adesão (G_{ads}), para diferentes valores de G_c .

Na Figura 6.14 pode-se observar o ângulo de contato estático, assim como a geometria da gota, para $G_c = 4$ na faixa $-0,9 \leq G_{ads} \leq 0,9$.

Analisando a influência da viscosidade e da razão de viscosidade no ângulo de contato estático, observar-se na Figura 6.15 os resultados obtidos para $M = 1$, $M = 50$, $\nu_2 = 0,1423$ e $\nu_2 = 0,2846$, considerando $G_c = 4$. Assim como no teste de tensão interfacial, os resultados apresentados para ângulo de contato estático demonstram uma independência da viscosidade e da razão de viscosidade.

Portanto, considerando os resultados obtidos pode-se observar o comportamento característico do efeito de molhabilidade, assim como uma proximidade com os resultados obtidos por Huang *et al.* (2007), verificando a aplicação do presente código numérico para a representação do efeito de molhabilidade.

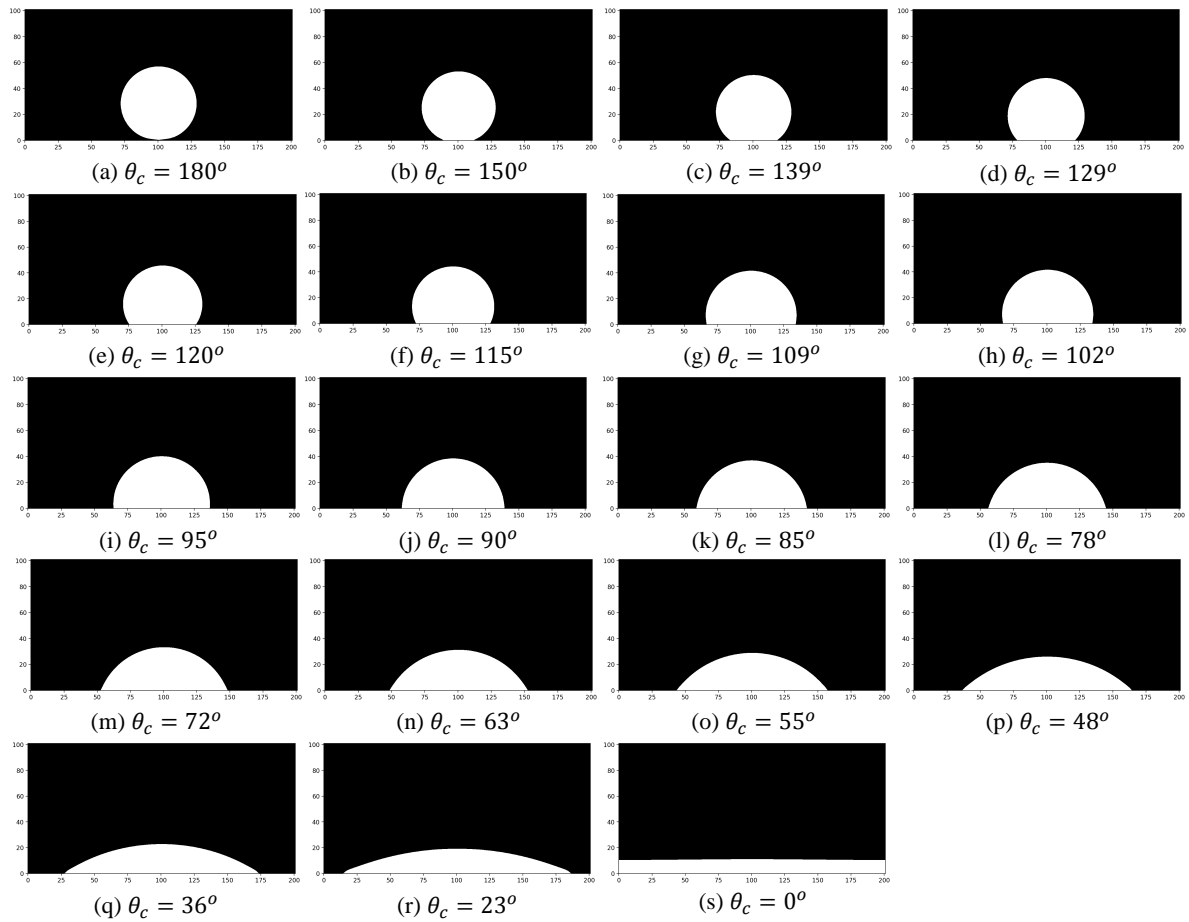


Figura 6.14 – Geometria da gota, onde o fluido 1 e o fluido 2 são representados pela cor branca e preta, respectivamente.

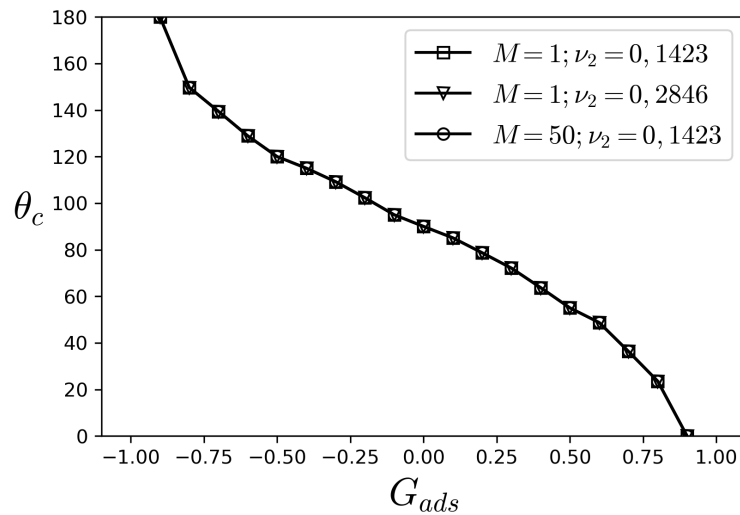


Figura 6.15 – Valores de ângulo de contato estático pela variação (θ_c) pelo coeficiente de adesão (G_{ads}), para diferentes viscosidades e razão de viscosidades.

6.5 Síntese do Capítulo

Os problemas verificados neste capítulo demonstram a capacidade do método de *Lattice-Boltzmann* com o modelo de potencial inter-partícula, para representação de características específicas do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis através do meio poroso. Entre os problemas destaca-se o de bolha estática para determinação da tensão interfacial entre os fluidos, de ângulo de contato estático para análise da intensidade do efeito de molhabilidade e os de deslocamento de fluidos imiscíveis num canal e escoamento de fluidos paralelos entre placas planas, voltados para análise de parâmetros dinâmicos da interação fluido-fluido. Os resultados observados no presente trabalho apresentaram concordância, tanto qualitativa como quantitativa, em relação às soluções encontradas na literatura.

7 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados para o processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo. Inicialmente são definidas as faixas de variação dos parâmetros de análise, considerações do problema e os testes de malha. Em seguida, são realizadas as análises de influência do número de capilaridade, razão de viscosidade e molhabilidade. Por fim, é feita a investigação da variação da porosidade relacionado às ordens da geometria fractal do tapete de Sierpinski.

No presente problema, assim como no capítulo anterior, são considerados dois fluidos de mesma densidade $\rho_1 = \rho_2 = 800[kg/m^3]$ e de viscosidade $\nu_2 = 10^{-3}[m^2/s]$ e $\nu_1 = 10^{-3}/M[m^2/s]$. Ressalta-se que o fluido 2 representa as propriedades do petróleo leve, enquanto a viscosidade cinemática do fluido 1 é variada em função da razão de viscosidade.

7.1 Parâmetros de Análise do Problema

Conforme exposto anteriormente, o processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo é representado em termos da competição de forças viscosas e capilares, juntamente com os efeitos de molhabilidade. Com o objetivo de observar a influência destas forças e efeitos, são avaliados os parâmetros adimensionais de número de capilaridade, razão de viscosidade, ângulo de contato estático e porosidade, em função da eficiência de varredura e do comportamento do deslocamento de fluidos. Outro parâmetro específico avaliado é a forma do meio poroso, relacionada às diferentes ordens da geometria fractal do tapete de Sierpinski.

Inicialmente, analisa-se as forças viscosas e capilares no processo de deslocamento, variando os parâmetros adimensionais de número de capilaridade e razão de viscosidade. Considerando $\theta_c = 90^\circ$ e segunda ordem do tapete de Sierpinski com $\phi = 0,7901$. Como resultado, busca-se verificar a influência dos parâmetros na eficiência de varredura e a representação dos estados de deslocamento nas faixas estabelecidas. Na Tabela 7.1 observa-se as faixas de variação de cada um dos parâmetros.

Tabela 7.1 – Parâmetros de análise da influência do número de capilaridade e razão de viscosidade

Parâmetros		Valores analisados
Razão de Viscosidade	M	1/10, 1, 10, 20
Número de Capilaridade	Ca	10^{-2} , $5 \cdot 10^{-2}$, 10^{-3} , $5 \cdot 10^{-3}$, 10^{-4}
Ângulo de Contato Estático	θ_c	90°
Porosidade	ϕ	0,7901
Forma de Poros		2ª ordens do Tapete de Sierpinski

Em seguida, analisa-se o efeito de molhabilidade pela variação do ângulo de contato estático. Considerando $Ca = 10^{-2}$, $M = 1$ e segunda ordem do tapete de Sierpinski com $\phi = 0,7901$. Em resposta, observa-se a influência do ângulo de contato na eficiência de varredura e no comportamento do deslocamento perante os processo de drenagem e imbibição. Na Tabela 7.2 são destacadas as faixas de variação dos parâmetros para a respectiva análise.

Tabela 7.2 – Parâmetros de análise da influência da molhabilidade

Parâmetros	Valores analisados	
Razão de Viscosidade	M	1
Número de Capilaridade	Ca	10^{-2}
Ângulo de Contato Estático	θ_c	0° até 180°
Porosidade	ϕ	0,7901
Forma de Poros	2^a ordens do Tapete de Sierpinski	

Por fim, analisa-se a influência da porosidade e da forma porosa no processo de deslocamento dos fluidos. Considerando $Ca = 10^{-2}$, $M = 1$ e $\theta_c = 90^\circ$. Com a finalidade de observar a relevância destes parâmetros na eficiência de varredura e na topologia do fluido retido nos estados de deslocamento. Na Tabela 7.3 observa-se as faixas de variação dos parâmetros analisados, onde as formas de poros são representadas pelas ordens do tapete de Sierpinski.

Tabela 7.3 – Parâmetros de análise da influência da porosidade e forma de poro

Parâmetros	Valores analisados	
Razão de Viscosidade	M	1
Número de Capilaridade	Ca	10^{-2}
Ângulo de Contato Estático	θ_c	90°
Porosidade	ϕ	0,5 até 0,88
Forma de Poros	1^a , 2^a e 3^a ordens do Tapete de Sierpinski	

Os valores da razão de viscosidade, na Tabela 7.1, são definidos com base no problema de verificação do escoamento de dois fluidos paralelos entre placas planas, onde foi observado um erro numérico aceitável para faixa de $1/10 \leq M \leq 50$. No entanto, numa pré-análise, foi observado que a faixa simulável para o processo de deslocamento fica entre $1/10 \leq M \leq 20$, de modo que valores acima ou abaixo desta faixa tornam a simulação instável.

A faixa do número de capilaridade, observada na Tabela 7.1, é baseada na verificação do problema de deslocamento de fluidos imiscíveis num canal, realizada no capítulo anterior em termos do número de capilaridade, onde observa-se a faixa de $2,38 \cdot 10^{-2} \leq Ca \leq 2,38 \cdot 10^{-1}$. Porém, valores de $Ca \geq 10^{-1}$ apresentam um alto número de Mach para escoamentos

através do meio poroso, observando-se efeitos de compressibilidade que introduzem erros numéricos. Desta forma, a faixa do número de capilaridade é ajustada para $10^{-4} \leq Ca \leq 10^{-2}$, com o propósito de reduzir os erros de compressibilidade e de observar a transição entre diferentes estados de deslocamento. Valores de $Ca < 10^{-4}$, no presente problema representam baixas velocidades, que resultam num grande número de iterações para o desenvolvimento do deslocamento e, conseqüentemente, um alto custo computacional que inviabiliza as simulações.

A variação do efeito de molhabilidade, representado por θ_c , é verificada no problema de ângulo de contato estático para a faixa de $0^\circ \leq \theta_c \leq 180^\circ$. Desta forma, o ângulo de contato estático é variado com o propósito de representar os processos de drenagem (i.e., $\theta_c < 90^\circ$), imibição (i.e., $\theta_c > 90^\circ$) e deslocamento neutro (i.e., $\theta_c = 90^\circ$).

O intervalo de variação da porosidade, diferente dos outros parâmetros, não é baseado nos resultados de um problema de verificação. Porém, este parâmetro está diretamente relacionado com a escala da velocidade no problema, sendo que, para porosidades relativamente baixas o número de Mach no poro pode alcançar altos valores que, conseqüentemente, introduzem erros de compressibilidade. Portanto, com uma pré-análise do processo de deslocamento através do meio poroso, estima-se a faixa de $0,5 \leq \phi \leq 0,88$. Para simulação dos valores de $\phi \leq 0,5$ o nível de malha necessário impossibilita a aplicação do problema, devido ao alto custo computacional.

A variação das formas de poros são baseadas nas três primeiras ordens da geometria fractal do tapete Sierpinski, onde cada ordem representa uma respectiva escala de poros. Para representação de ordens maiores que a terceira ordem do tapete de Sierpinski é necessário um alto nível de malha que impossibilita a simulação do problema. As ordens do tapete de Sierpinski estão diretamente relacionadas à porosidade do meio, relação observada pela Equação 4.10.

7.2 Considerações do Problema

Uma característica observada no modelo potencial inter-partícula para o processo de deslocamento é o fato que a aplicação das condições de contorno de Zou e He (1997) para representação de pressão constante, tornam o problema instável quando o fluido injetado alcança a saída do canal. Desta maneira, o processo pode ser analisado apenas enquanto o fluido injetado não alcança a fronteira do canal.

Conforme o objetivo deste trabalho em analisar a influência dos parâmetros estabelecidos nas Tabelas 7.1, 7.2 e 7.3, em relação à eficiência de varredura e ao comportamento do deslocamento de fluidos, o canal poroso é estendido ao ponto que a eficiência de varredura no meio poroso permaneça constante antes de o fluido injetado alcançar a saída do canal. A Figura 7.1 ilustra a comparação de um mesmo processo de deslocamento nos canais porosos normal e estendido, para a evolução da eficiência de varredura a cada iteração.

No canal estendido a eficiência de varredura é calculada na mesma área do canal normal, destacada em vermelho na Figura 7.1. Portanto, observa-se no canal estendido o ponto de eficiência de varredura constante antes de fluido injetado alcançar a saída do canal, enquanto no canal normal o fluido injetado alcança saída antes do desenvolvimento total da eficiência de varredura.

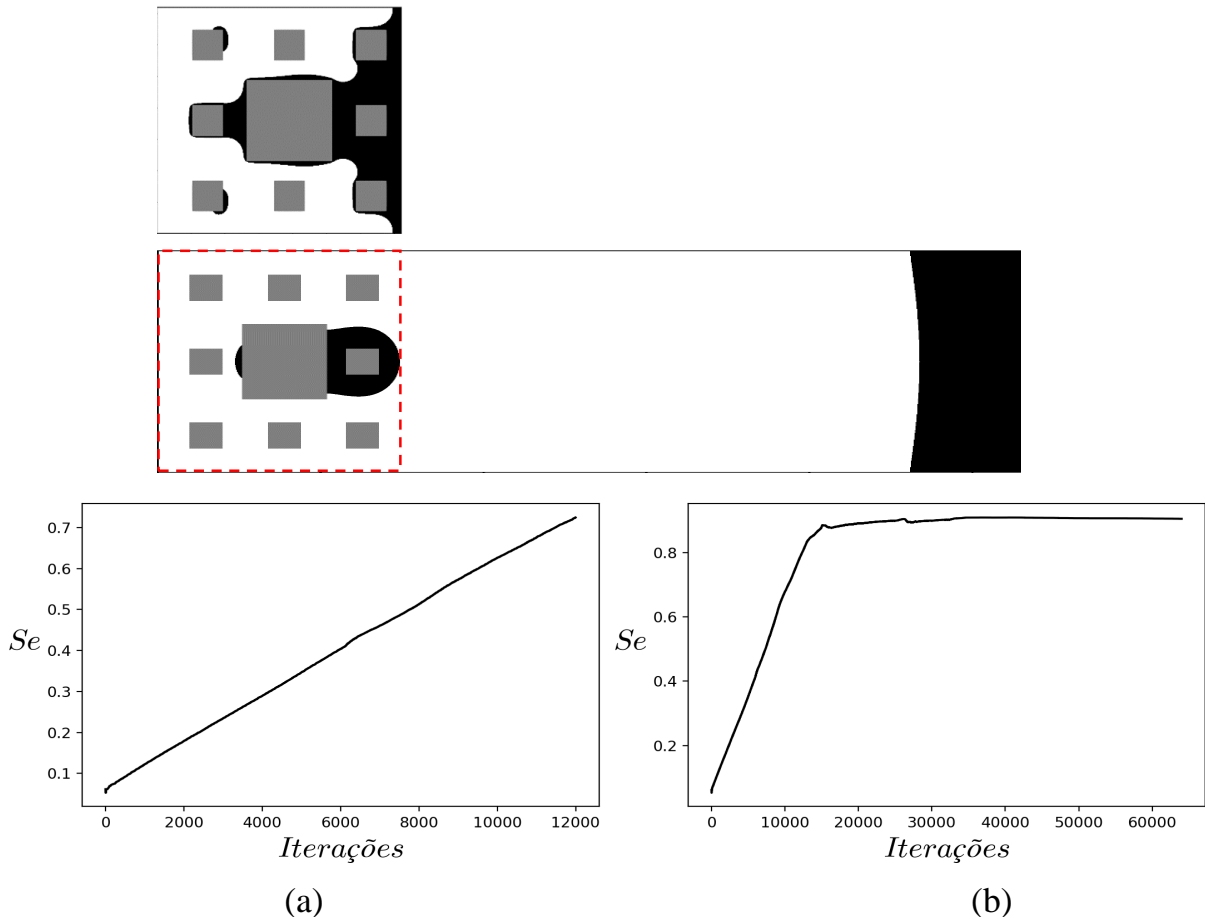


Figura 7.1 – Comparação da evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações ($[s]^{LB}$), para os canais porosos normal (a) e estendido (b). As cores branca, preta e cinza, representam o fluido injetado, fluido deslocado e a matriz sólida, respectivamente. A região em vermelho destaca a área de cálculo da eficiência de varredura no canal estendido.

O critério de parada utilizado para cada simulação é baseado na variação da eficiência de varredura ao decorrer das iterações, dado pela equação

$$\left| \frac{Se^{it} - Se^{it+10/Ca}}{Se^{it+10/Ca}} \right| \leq 10^{-4}, \quad (7.1)$$

onde $10/Ca$ é utilizado com o objetivo de ajustar o intervalo de iteração à cada caso, de maneira que quanto menor o número de capilaridade menor é a velocidade do escoamento e, conseqüentemente, menor a variação da eficiência de varredura num intervalo fixo de tempo. Caso o critério de parada não seja atingido o código é parado no ponto que fluido

injetado alcança a fronteira de saída do canal, então aumenta-se o comprimento do canal até o ponto que o critério de parada seja alcançado.

Para os casos analisados o número de capilaridade, assim como no problema de verificação do deslocamento de fluidos imiscíveis num canal, é calculado em função do fluido injetado e da velocidade máxima do perfil parabólico de entrada, ou seja,

$$Ca = \frac{\mu_2 U_{max}}{\gamma}. \quad (7.2)$$

Na caracterização do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis, o coeficiente de coesão é escolhido dentro da faixa de imiscibilidade para $G_c = 4$, correspondente a tensão interfacial $\gamma = 0,14[kg/s^2]^{LB}$. Definido o valor da tensão interfacial dos fluidos, as relações de escala são trabalhadas de maneira que a viscosidade do fluido injetado seja $\mu_2 = 0,14[m^2/s]^{LB}$, simplificando a aplicação do número de capilaridade para

$$Ca = U_{max}. \quad (7.3)$$

7.3 Testes de Malha

No presente trabalho três diferentes testes de malha são aplicados. O primeiro teste consiste na malha de referência que será aplicada à análise dos parâmetros de número de capilaridade, razão de viscosidade e ângulo de contato estático. O segundo e terceiro testes de malha são aplicados para a variação da porosidade, onde um teste determinará a malha de referência para a primeira e segunda ordem do tapete Sierpinski e o outro teste apenas para terceira ordem do tapete. A utilização destas três malhas de referência ao invés de uma única malha mais robusta, diminui a necessidade de recursos computacionais e, conseqüentemente, aumenta a eficiência de cada simulação.

O procedimento do teste de malha definido na Seção 5.6 é aplicado com base nas variações da eficiência de varredura entre as malhas. Analisando a variação da média aritmética (Se_{med}) e do valor constante ao final das iterações (Se).

O primeiro teste de malha para a análise dos parâmetros de número de capilaridade, razão de viscosidade e ângulo de contato estático, é aplicado no caso considerado crítico de $Ca = 10^{-2}$ e $M = 20$, com a segunda ordem do tapete de Sierpinski para $\phi = 0,7901$, onde $d_{b_1} = H/3$ e $d_{b_2} = H/9$. A malha de referência é obtida em $H = 144[m]^{LB}$ e $L = 576[m]^{LB}$. Os detalhes do teste e da relação de escala, podem ser observados no Apêndice C.5.

O segundo teste de malha para variação da porosidade na primeira e segunda ordem do tapete de Sierpinski, é aplicado no caso crítico de $Ca = 10^{-2}$ e $M = 1$, com a segunda ordem do tapete de Sierpinski para $\phi = 0,4932 \approx 0,5$, onde $d_{b_1} = H/3$ e $d_{b_2} = 2H/9$. A malha de referência é obtida em $H = 288[m]^{LB}$ e $L = 1152[m]^{LB}$. Os detalhes do teste e da relação de escala, podem ser observados no Apêndice C.6.

O terceiro teste de malha para representação da terceira ordem do tapete de Sierpinski, é aplicado no caso crítico de $Ca = 10^{-2}$, $M = 1$ e $\phi = 0,7023$, onde $d_{b_1} = H/3$, $d_{b_2} = H/9$ e $d_{b_3} = H/27$. A malha de referência é obtida em $H = 432[m]^{LB}$ e $L = 1728[m]^{LB}$. Os detalhes do teste e da relação de escala, podem ser observados no Apêndice C.7.

Para ambos os testes de malha, o comprimento de 4 vezes a altura do canal (4 vezes o comprimento do canal normal) foi suficiente para o desenvolvimento da eficiência de varredura até o ponto constante, satisfazendo o critério de convergência.

7.4 Influência do Número de Capilaridade e Razão de Viscosidade

A presente seção é dedicada à análise da influência do número de capilaridade e da razão de viscosidade no processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo, considerando a faixa de variação estabelecida na Tabela 7.1. Comparando com as faixas observadas na revisão bibliográfica (Figura 3.2) pode-se verificar uma proximidade no diagrama do número de capilaridade pela razão de viscosidade, com a faixa de Zhang *et al.* (2011b) e, conseqüentemente, com a faixa de Bandara *et al.* (2013) que replica o problema analisado por Zhang *et al.* (2011b). Tal proximidade das faixas possibilita a comparação dos resultados, no entanto, salienta-se a existência de diferenças do meio poroso e fluidos, considerados pelo presente trabalho e por Zhang *et al.* (2011b). A Figura 7.2 ilustra ambas as faixa de análise.

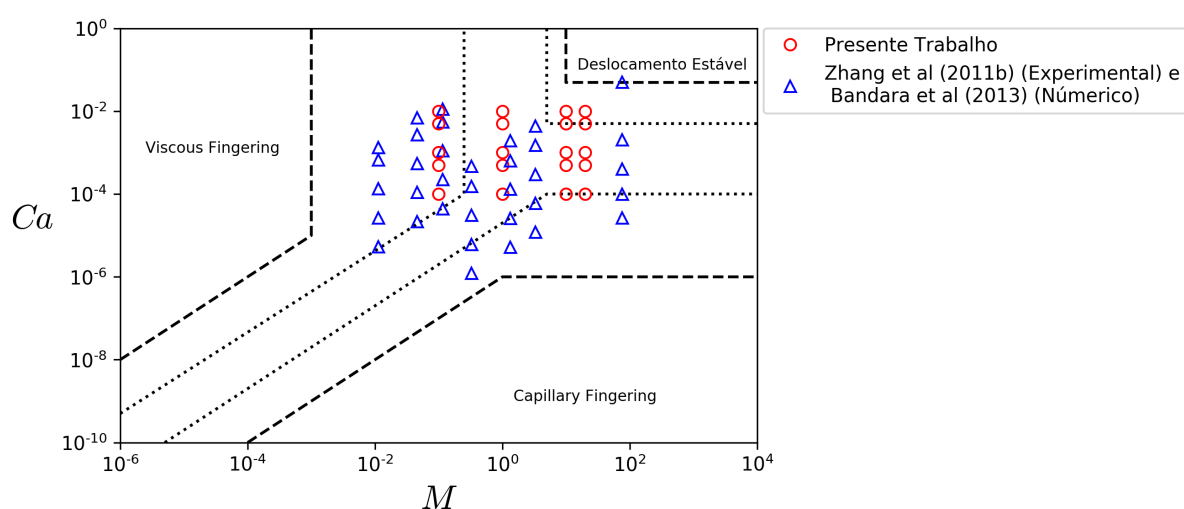


Figura 7.2 – Faixas de análise do número de capilaridade e da razão de viscosidade por Zhang *et al.* (2011b) e pelo presente trabalho.

As simulações numéricas para a faixa de variação do número de capilaridade e da razão de viscosidade, foram realizadas considerando a malha de referência (i.e., $H = 144[m]^{LB}$ e

$L = 576[m]^{LB}$), $\theta_c = 90^\circ$ (i.e., deslocamento neutro) e geometria fixa da segunda ordem do tapete de Sierpinski com $\phi = 0,7901$, onde $d_{b_1} = H/3$ e $d_{b_2} = H/9$.

Na Figura 7.3 pode-se observar a ilustração dos resultados obtidos para as fases fluidas e sólida, no ponto de eficiência de varredura constante descrito pelo tempo na escala do método. O fluido injetado, o fluido deslocado e o sólido são representados graficamente pelas cores branca, preta e cinza, respectivamente, para todas as figuras deste capítulo.

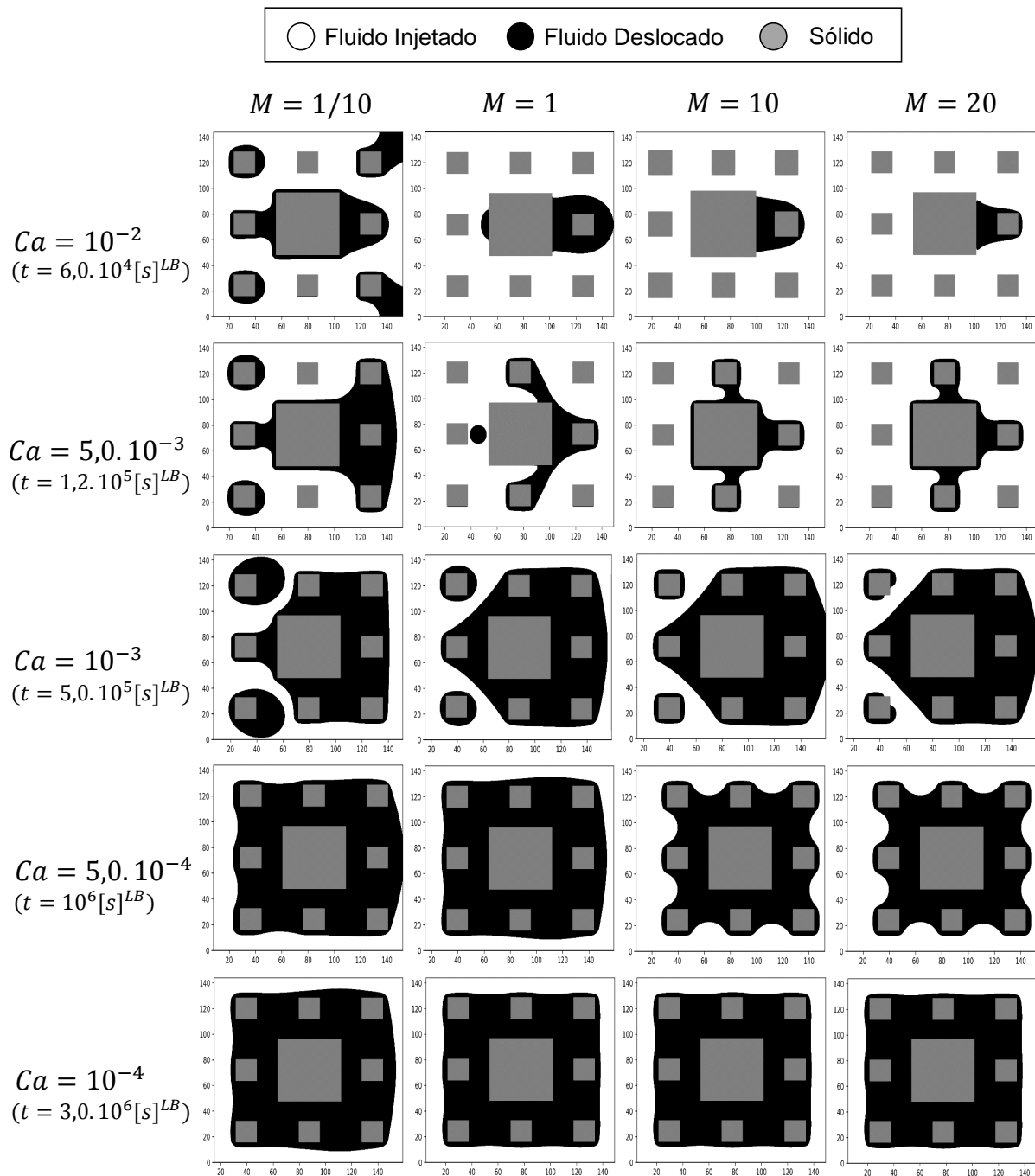


Figura 7.3 – Representação do processo de deslocamento para faixa de variação do número de capilaridade e da razão de viscosidade, no ponto de eficiência de varredura ($t = [s]^{LB}$).

7.4.1 Análise do Número de Capilaridade

Analisando os resultados obtidos para variação do número de capilaridade e razão de viscosidade constante, na Figura 7.3, é possível observar uma tendência de redução da eficiência de varredura com a diminuição do número de capilaridade, assim como uma mudança da topologia do fluido retido (destacado pela cor preta) resultante da transição do estado de deslocamento dos fluidos.

Observando os extremos do número de capilaridade no menor valor da razão de viscosidade (i.e., $M = 1/10$), torna-se evidente a alteração da topologia do fluido retido relacionado a transição do estado de deslocamento. Para ilustrar a transição deste estado deslocamento, na Figura 7.4 observa-se a evolução dos específicos deslocamentos de $Ca = 10^{-2}$ e $Ca = 10^{-4}$ no tempo. Visualmente, nota-se em $Ca = 10^{-2}$ o comportamento próximo das características de *viscous fingering*, onde o fluido injetado percola o meio poroso com múltiplos *fingers* na direção do escoamento; enquanto para $Ca = 10^{-4}$ o comportamento apresentado demonstra características de *capillary fingering*, onde a pressão no escoamento do fluido injetado não vence a pressão capilar necessária para atravessar os poros da geometria, contornando o meio poroso em contato com as paredes.

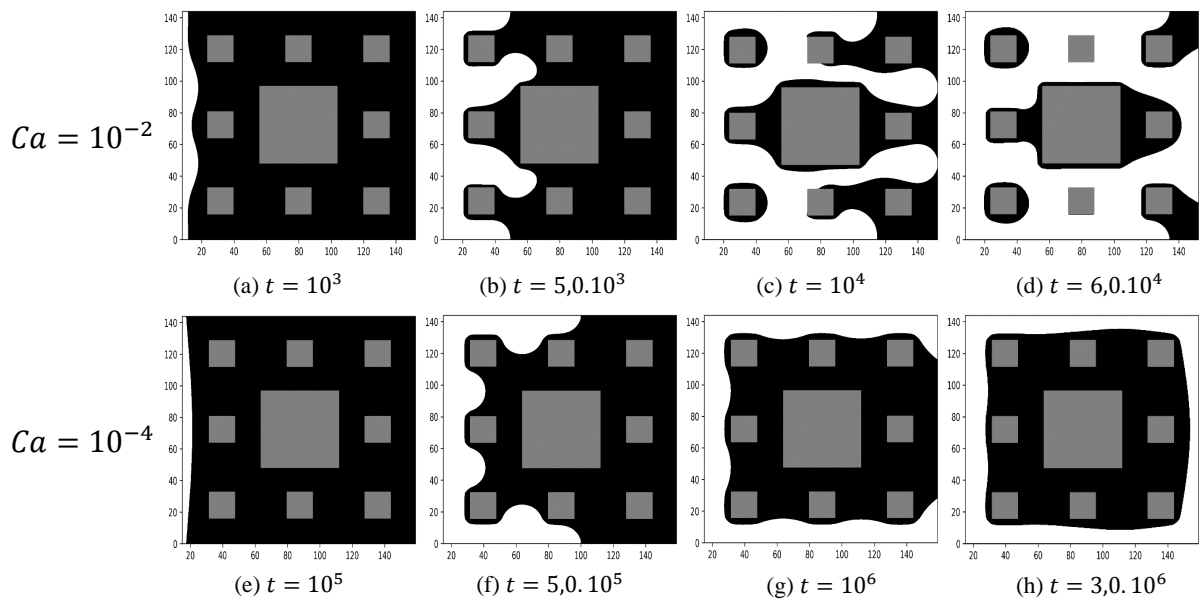


Figura 7.4 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento de *viscous fingering* ($Ca = 10^{-2}$) e de *capillary fingering* ($Ca = 10^{-4}$), para $M = 1/10$.

Assim como observado na Figura 7.4, a transição do estado de deslocamento também ocorre para variação do número de capilaridade no extremo oposto da razão de viscosidade (i.e., $M = 20$). Ilustrando a transição entre os estados de deslocamento, na Figura 7.5 nota-se visualmente em $Ca = 10^{-2}$ o comportamento próximo às características de deslocamento estável, onde o fluido injetado apresenta uma frente de deslocamento estável com irregularidades da escala do poro; enquanto em $Ca = 10^{-4}$, assim como na Figura 7.4, é observado um comportamento característico de *capillary fingering*.

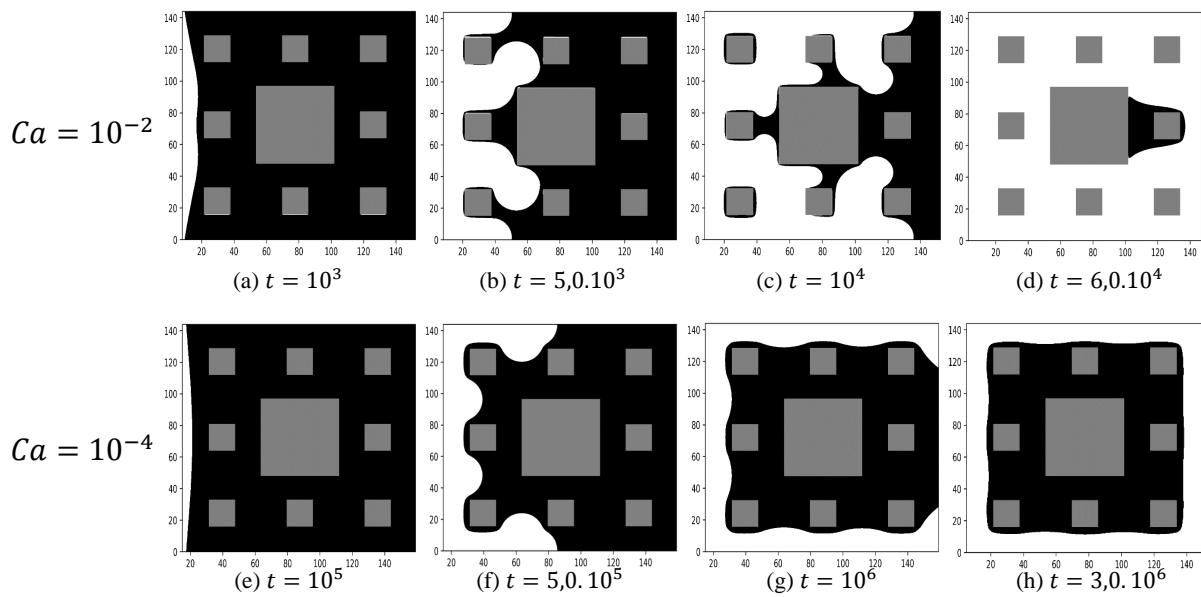


Figura 7.5 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento de deslocamento estável ($Ca = 10^{-2}$) e de *capillary fingering* ($Ca = 10^{-4}$), para $M = 20$.

As faixas de variação do número de capilaridade entre os extremos de $M = 1/10$ e $M = 20$, ou seja as variações do número de capilaridade para $M = 1$ e $M = 10$, também apresentam transições do estado de deslocamento, onde ambas são representadas por um estado intermediário entre *viscous fingering* e deslocamento estável no maior valor do número de capilaridade ($Ca = 10^{-2}$) e pelo estado de *capillary fingering* no menor valor do número de capilaridade ($Ca = 10^{-4}$).

Na comparação dos estados de deslocamentos (como os destacados nas Figuras 7.4 e 7.5) com os dados obtidos experimentalmente por Zhang *et al.* (2011b) e numericamente por Bandara *et al.* (2013), observam-se concordâncias entre os resultados, de forma as que faixas de variação do número de capilaridade próximas às do presente trabalho são descritas pelos mesmos estados de deslocamento.

Complementando as análises, na Figura 7.6 observa-se os valores da eficiência de varredura em função número de capilaridade, obtidos para cada razão de viscosidade. Devido à proximidade das faixas analisadas, como já mencionado, os resultados são comparados com Zhang *et al.* (2011b) e Bandara *et al.* (2013). Na comparação dos valores verifica-se um comportamento semelhante, onde ambos apresentam uma redução da eficiência de varredura em função da diminuição do número de capilaridade, para todos os valores de razão de viscosidade. Nota-se também, nos presentes resultados, uma grande diminuição da eficiência de varredura da faixa de $Ca = 5,0 \cdot 10^{-3}$ para a faixa de $Ca = 10^{-3}$ (tal diminuição fica mais evidente na Figura 7.3), devido ao ponto de transição do domínio entre forças capilares e viscosas no processo de deslocamento dos fluidos.

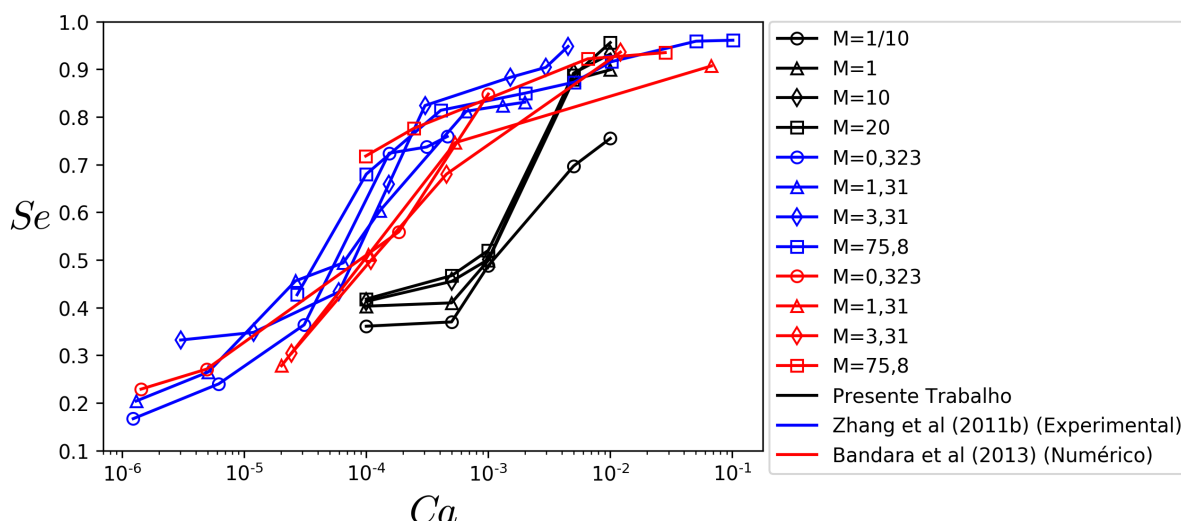


Figura 7.6 – Valores da eficiência de varredura pelo número de capilaridade, obtidos pelo presente trabalho, por Zhang *et al.* (2011b) e por Bandara *et al.* (2013), para diferentes razões de viscosidade.

7.4.2 Análise da Razão de Viscosidade

Analisando os resultados obtidos para variação da razão de viscosidade em um número de capilaridade constante, na Figura 7.3, observa-se a tendência de crescimento da eficiência de varredura com o aumento da razão de viscosidade para todos os valores do número de capilaridade. No entanto, diferente da análise do número de capilaridade, onde todas as faixas apresentam transição entre os estados de deslocamento, a variação da razão de viscosidade apresenta transição apenas para $Ca = 10^{-2}$, de modo que, para $Ca \leq 5,0 \cdot 10^{-3}$ os deslocamentos apresentam estados semelhantes.

Na Figura 7.7, observa-se a evolução do deslocamento no tempo para o maior valor do número de capilaridade (i.e., $Ca = 10^{-2}$), verificando-se a transição entre diferentes estados. Visualmente, nota-se em $M = 1/10$ o comportamento próximo às características de *viscous fingering*, onde ocorre a formação de *fingers* que percolam o canal na direção do escoamento; por outro lado, para $M = 20$ o deslocamento demonstra características de deslocamento estável, onde o fluido injetado apresenta uma frente estável com irregularidades da escala do poro. Enquanto, no extremo oposto do número de capilaridade (i.e., $Ca = 10^{-4}$), toda a faixa de variação da razão de viscosidade (i.e., $1/10 \leq M \leq 20$) é caracterizada pelo estado de *capillary fingering*, não havendo transição dos estados de deslocamento.

Assim como no número de capilaridade, na comparação dos estados de deslocamentos, como o destacado na Figura 7.7, com os dados obtidos por Zhang *et al.* (2011b) e Bandara *et al.* (2013), são observadas concordâncias entre os resultados.

Retornando às análises, na Figura 7.8 observa-se os valores da eficiência de varredura em função da razão de viscosidade para cada número de capilaridade, verificando-se o

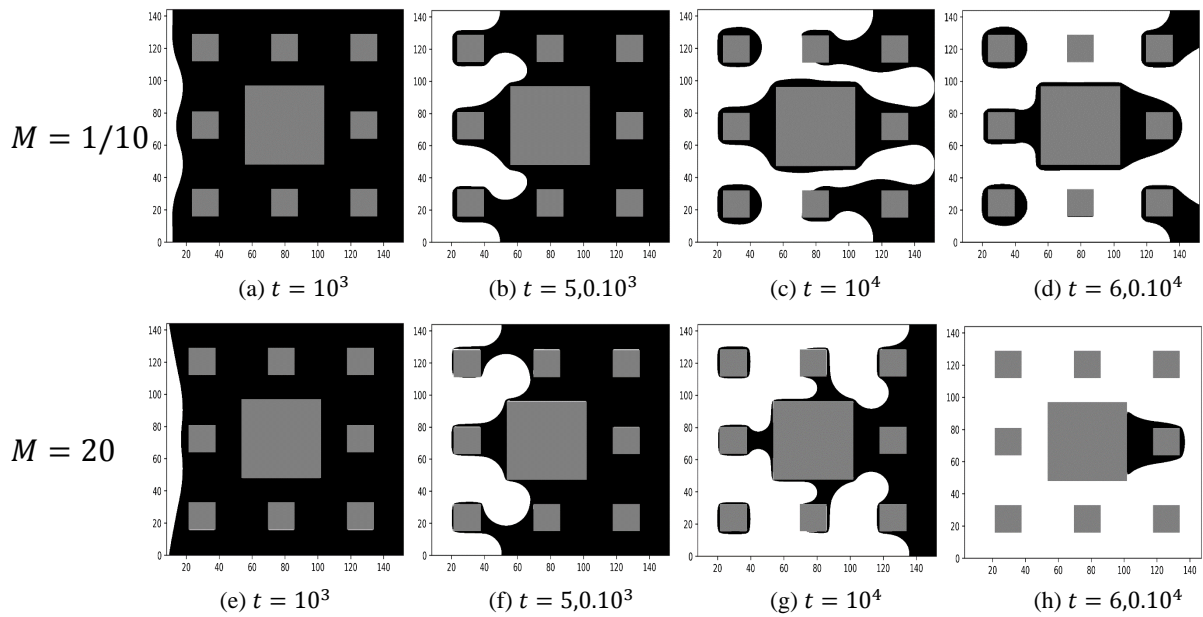


Figura 7.7 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento de *viscous fingering* ($M = 1/10$) e de deslocamento estável ($M = 20$), para $Ca = 10^{-2}$.

crescimento da eficiência de varredura com o aumento da razão de viscosidade. Comparando com os resultados obtidos por Zhang *et al.* (2011b), observa-se uma tendência de crescimento da eficiência de varredura com o aumento da razão de viscosidade, assim como nos resultados do presente trabalho.

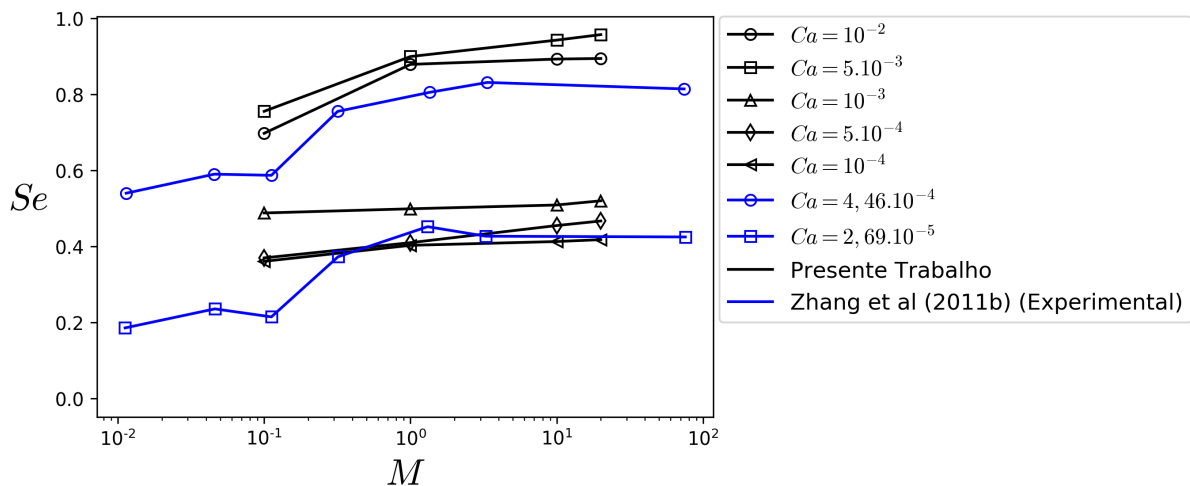


Figura 7.8 – Valores da eficiência de varredura pela razão de viscosidade obtidos pelo presente trabalho e por Zhang *et al.* (2011b), para diferentes números capilaridade.

7.5 Influência da Molhabilidade

Nesta seção é investigada a influência da molhabilidade no processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso, onde a intensidade do efeito de molhabilidade é

representada pelo ângulo de contato estático, caracterizando os processos de imbibição para $\theta_c < 90^\circ$ e de drenagem para $\theta_c > 90^\circ$.

A influência do ângulo de contato estático é analisada levando em conta a variação dos parâmetros estabelecidos na Tabela 7.2. As simulações numéricas são realizadas levando em conta a malha de referência (i.e., $H = 144[m]^{LB}$ e $L = 576[m]^{LB}$) e a variação do ângulo de contato estático, assim como no problema verificação, pela variação de G_{ads} , onde $G_{ads,1} = G_{ads}$ e $G_{ads,2} = -G_{ads}$. A relação entre G_{ads} e θ_c pode ser obtida na Figura 6.13.

7.5.1 Imbibição

Avaliando o processo de imbibição, o ângulo de contato estático do fluido injetado é variada de $0^\circ \leq \theta_c \leq 90^\circ$, correspondente à faixa do coeficiente de adesão de $0,9 \geq G_{ads} \geq 0$. Na representação dos resultados obtidos, a Figura 7.9 ilustra as fases fluidas e sólida, obtidas no ponto de eficiência de varredura constante. Analisando os resultados, nota-se o aumento da eficiência de varredura com a diminuição do ângulo de contato, de modo que o fluido injetado torna-se cada vez mais molhante sobre o fluido deslocado, aderindo às superfícies da matriz sólida. Para a faixa de $0^\circ \leq \theta_c \leq 63^\circ$ é observado uma varredura completa do canal poroso.

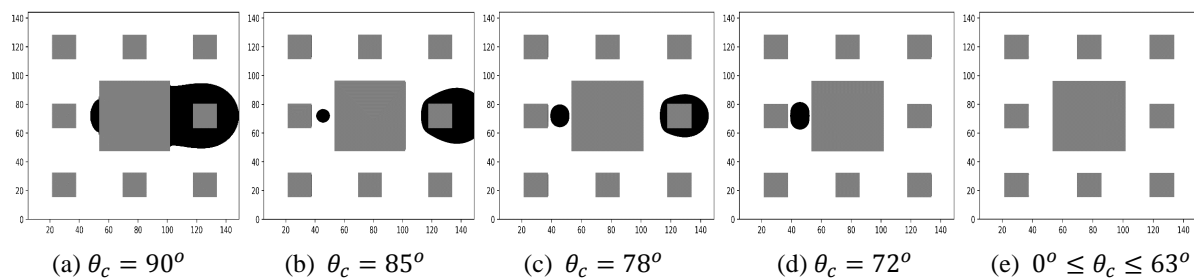


Figura 7.9 – Representação do processo de deslocamento para variação de $0^\circ \leq \theta_c \leq 90^\circ$, no ponto de eficiência de varredura constante em $t = 6, 0.10^4 [s]^{LB}$.

Os valores obtidos para eficiência de varredura em relação ao ângulo de contato estático podem ser observados na Figura 7.10, verificando-se o aumento da eficiência de varredura com a diminuição do ângulo de contato estático.

Analisando o comportamento do deslocamento em imbibição, na Figura 7.11 observa-se a comparação da evolução do deslocamento no tempo, para os casos de $\theta_c = 90^\circ$ (deslocamento neutro) e $\theta_c = 0^\circ$ (imbibição). Visualmente, nota-se em $\theta_c = 90^\circ$ o comportamento do deslocamento entre os estados *viscous fingering* e deslocamento estável, com regiões de contato entre o fluido deslocado e a superfície sólida em poros percolados pelo fluido injetado; enquanto, para $\theta_c = 0^\circ$ o comportamento é caracterizado por uma frente estável, onde o fluido injetado atravessa os poros varrendo o fluido deslocado das superfícies sólidas e, conseqüentemente, aumentando a eficiência de varredura do processo.

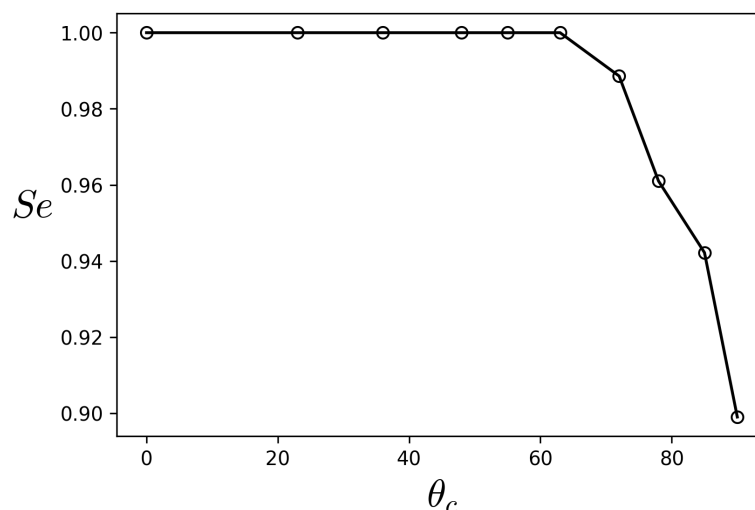


Figura 7.10 – Valores da eficiência de varredura em função ângulo de contato estático para processo de imbibição.

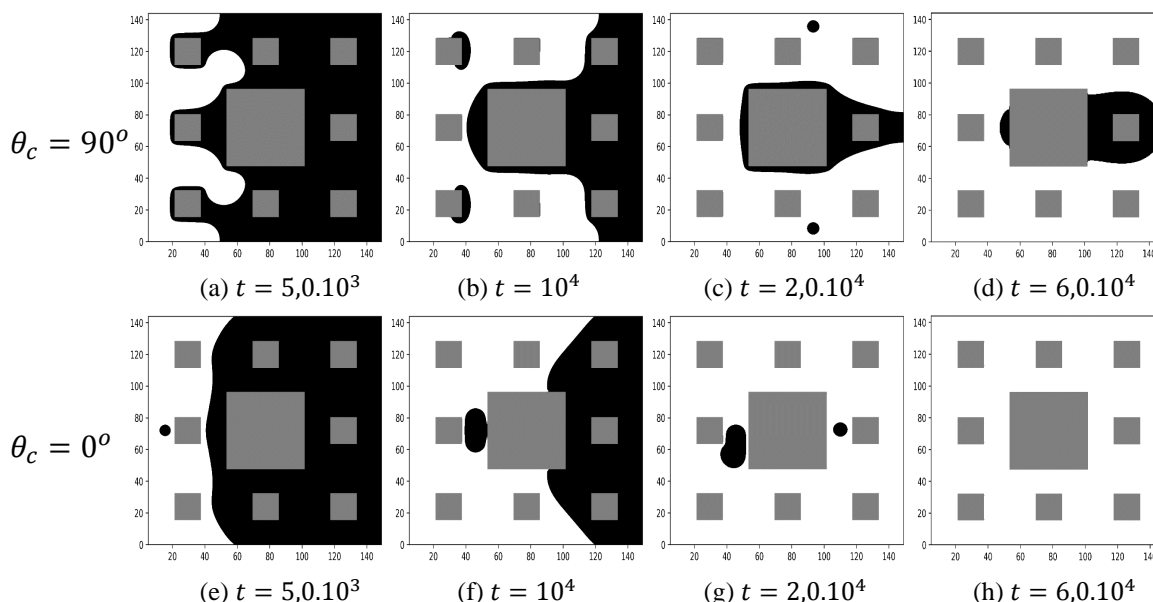


Figura 7.11 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\theta_c = 90^\circ$ e $\theta_c = 0^\circ$.

7.5.2 Drenagem

Investigando o processo de drenagem, o ângulo de contato do fluido injetado é variada de $90^\circ \leq \theta_c \leq 180^\circ$, correspondente à faixa do coeficiente de adesão de $0 \geq G_{ads} \geq -0,9$. A representação dos resultados obtidos podem-ser observadas na Figura 7.12, onde ilustra-se as fases fluidas e sólida, no ponto de eficiência de varredura constante. Analisando os resultados, nota-se uma tendência de diminuição da eficiência de varredura com o aumento do ângulo de contato estático, onde o fluido deslocado se torna cada vez mais molhante sobre o fluido injetado, aderindo às superfícies da matriz sólida. Tal fenômeno de adesão do fluido deslocado pode ser observado na superfície do bloco central da segunda ordem do tapete de Sierpinski (região destacada em vermelho na Figura 7.12), onde a área de

contato fluido-sólido aumenta proporcionalmente com o ângulo de contato estático. Outra característica observada é a adesão do fluido deslocado em toda a superfície da parede do canal para valores de $\theta_c \geq 150^\circ$.

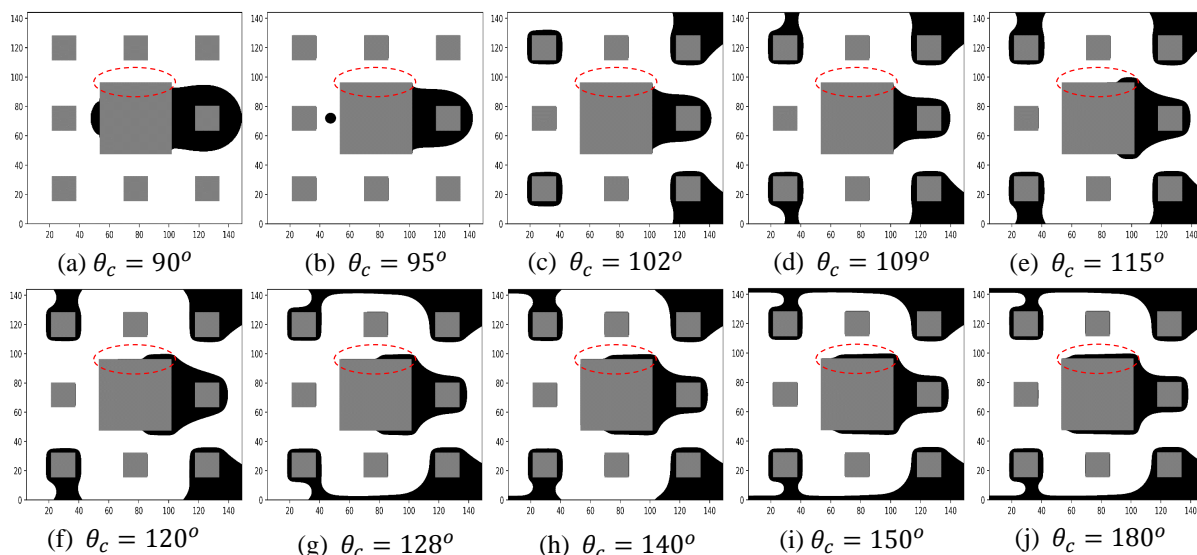


Figura 7.12 – Representação do processo de deslocamento para variação de $90^\circ \leq \theta_c \leq 180^\circ$ no ponto de eficiência de varredura constante em $t = 6, 0.10^4$.

Os valores obtidos da eficiência de varredura em relação ao ângulo de contato estático são observados na Figura 7.13, no qual verifica-se a tendência de diminuição da eficiência de varredura com o aumento do ângulo de contato estático. Porém, nota-se alguns pontos de crescimento da eficiência com o aumento do ângulo. Conseqüentemente, como observado na Figura 7.12, o aumento da adesão do fluido deslocado na superfície sólida do meio poroso com o aumento do ângulo de contato estático, contribui diretamente para a tendência de diminuição da eficiência de varredura.

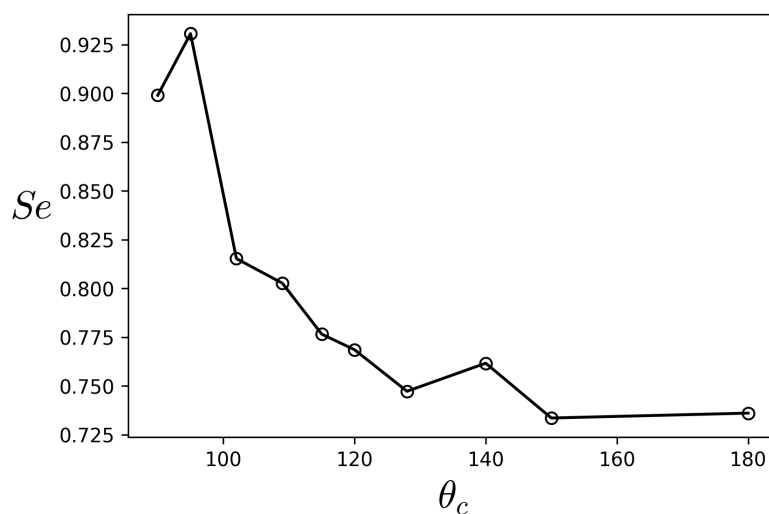


Figura 7.13 – Valores da eficiência de varredura pelo ângulo de contato estático para o processo de drenagem.

Complementando a análise do processo de drenagem, na Figura 7.14 observa-se a comparação da evolução do deslocamento no tempo, para os casos de $\theta_c = 90^\circ$ (deslocamento neutro) e $\theta_c = 180^\circ$ (drenagem). Visualmente, nota-se em $\theta_c = 90^\circ$ o mesmo comportamento da Figura 7.11, onde o deslocamento é caracterizado na região entre *viscous fingering* e deslocamento estável; em contrapartida, para $\theta_c = 180^\circ$ o comportamento observado se aproxima das características de *viscous fingering*, ocorrendo a formação inicial de dois *fingers* que percolam o meio poroso sem aderir as paredes do canal.

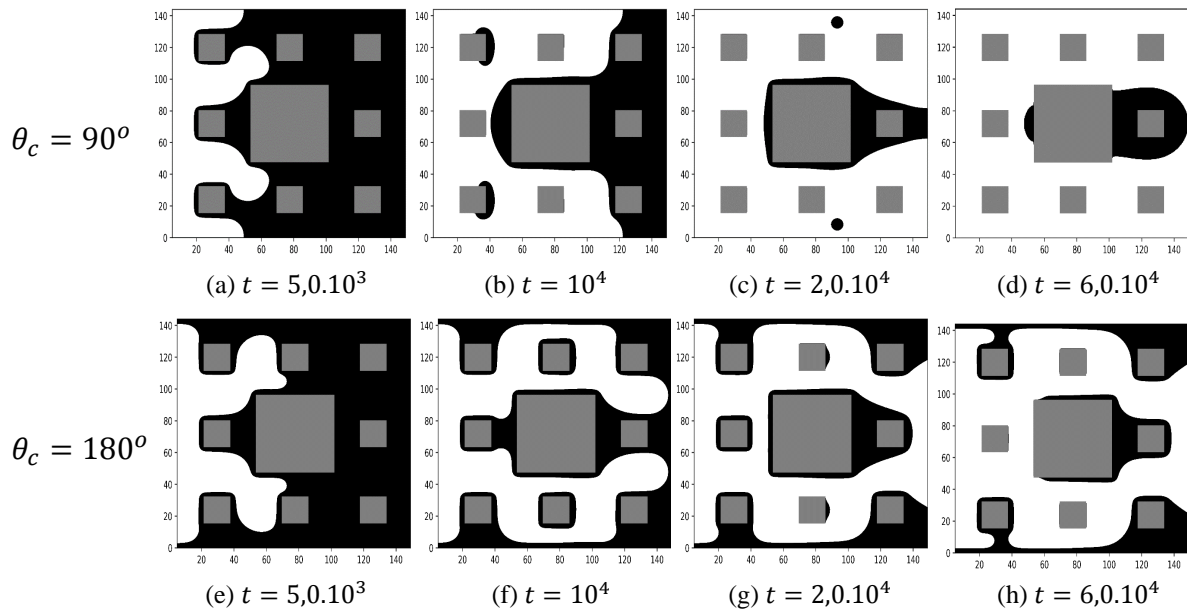


Figura 7.14 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\theta_c = 90^\circ$ e $\theta_c = 180^\circ$.

7.6 Influência da Porosidade e Forma de Poros

Esta seção é dedicada à análise da influência da porosidade, juntamente com a forma de poros, no processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo. A influência da porosidade e da forma de poros é analisada levando em conta os parâmetros da Tabela 7.3. Nas simulações duas malhas de referência são utilizadas, uma para a primeira e segunda ordens do tapete de Sierpinski (i.e., $H = 288[m]^{LB}$ e $L = 1152[m]^{LB}$), e outra apenas para terceira ordem do tapete (i.e., $H = 432[m]^{LB}$ e $L = 1728[m]^{LB}$). Inicialmente é analisado a influência da primeira ordem do tapete de Sierpinski com a variação da porosidade, em seguida, analisa-se a influência da variação da porosidade para a segunda ordem do tapete de Sierpinski e, por fim, são analisadas as variações das formas de poros para três primeiras ordens do tapete de Sierpinski.

7.6.1 Primeira Ordem do Tapete Sierpinski

Analisando a influência da variação da porosidade para primeira ordem do tapete de Sierpinski são simulados cinco diferentes valores de porosidade na faixa $0,5 \leq \phi \leq 0,88$. Na representação dos resultados obtidos, a Figura 7.15 ilustra as fases fluidas e sólida, no ponto de eficiência de varredura constante. Nota-se que em ambos os casos a maior porção do fluido retido no meio poroso permanece aderido à superfície do bloco sólido, ocorrendo um aumento da região de contato do fluido deslocado (região destacada em vermelho na Figura 7.15) para o aumento do diâmetro do bloco e, conseqüentemente, para a diminuição da porosidade.

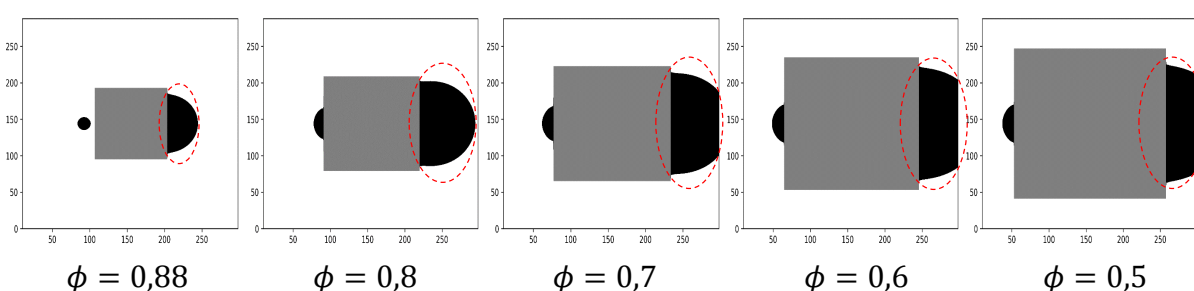


Figura 7.15 – Representação do processo de deslocamento para variação de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,88$ no ponto de eficiência de varredura constante ($t = 120000[s]^{LB}$).

Tal aumento da região de contato do fluido deslocado, demonstrado na Figura 7.15, é proporcional ao aumento do tamanho da zona de recirculação do escoamento, como observado na Figura 7.16 para as linhas de corrente de cada caso.

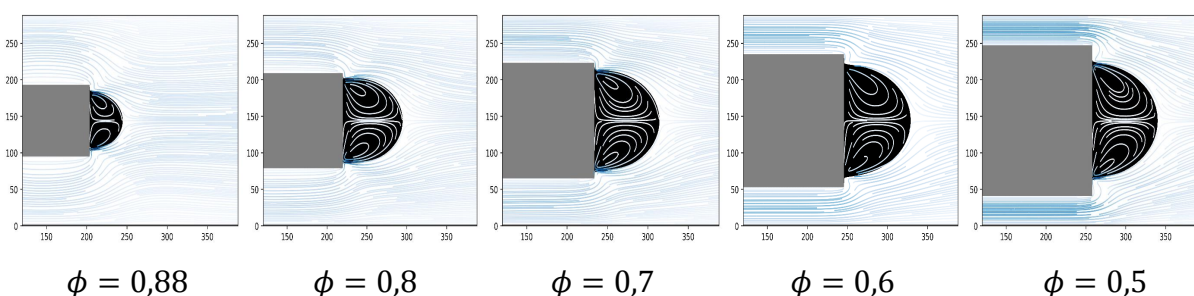


Figura 7.16 – Representação das linhas de corrente para variação de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,88$, no ponto de eficiência de varredura constante em $t = 120000[s]^{LB}$.

Os resultados obtidos para a eficiência de varredura em função da porosidade são apresentados na Figura 7.17, verificando-se a diminuição da eficiência de varredura com a diminuição da porosidade. Como observado nas Figuras 7.15 e 7.16, tal redução da eficiência de varredura é resultante do aumento de fluido deslocado aderido ao bloco sólido, devido às regiões de recirculação do escoamento.

Completando a análise da influência da porosidade na primeira ordem do tapete de Sierpinski, na Figura 7.18 avalia-se a evolução do deslocamento no tempo para os dois extremos da porosidade. Nota-se tanto para $\phi = 0,88$ como para $\phi = 0,5$, um comportamento

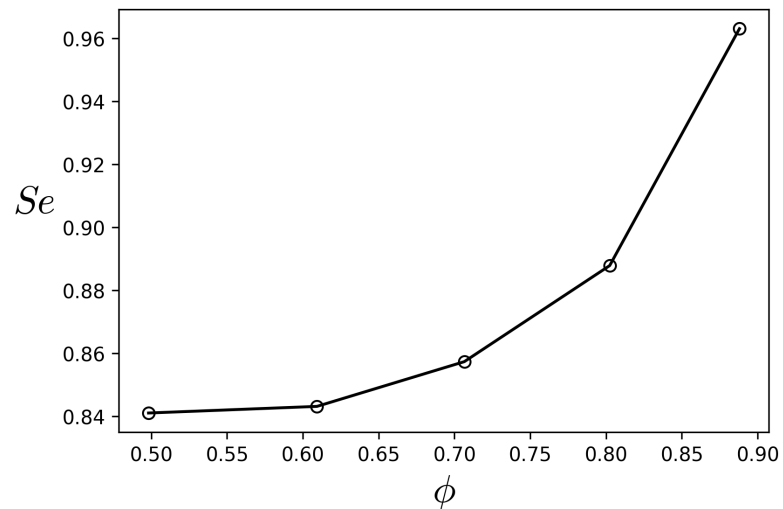


Figura 7.17 – Valores da eficiência de varredura pela porosidade para a primeira ordem do tapete de Sierpinski.

semelhante do processo de deslocamento, onde o fluido injetado avança igualmente pelos poros disponíveis até percolar totalmente o canal.

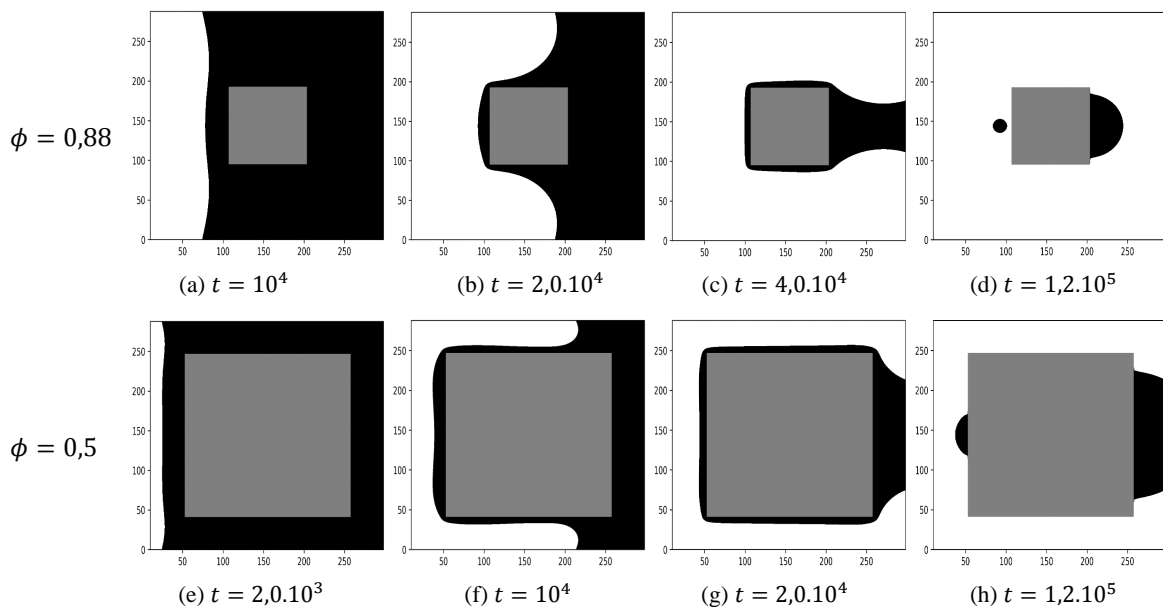


Figura 7.18 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\phi = 0,88$ e $\phi = 0,5$.

7.6.2 Segunda Ordem do Tapete Sierpinski

Avaliando a influência da variação da porosidade para segunda ordem do tapete de Sierpinski são considerados quatro diferentes valores de porosidade na faixa $0,5 \leq \phi \leq 0,79$. O cálculo da porosidade segue a Equação 4.10 para $d_{b1} = 96[m]^{LB}$ fixo (diâmetro do bloco central). Na representação dos resultados obtidos, a Figura 7.19 ilustra as fases fluidas e sólida, no ponto de eficiência de varredura constante. Em ambos os casos, notam-se

que os pontos de retenção do fluido deslocado ficam restritos aos poros entre os blocos da região central do canal. Conseqüentemente, analisando a região central observa-se entre os dois primeiros blocos (destacado em azul na Figura 7.19) um aumento da porção de fluido retido para a diminuição da porosidade, enquanto nos dois últimos blocos (destacado em vermelho na Figura 7.19) ocorre o caso oposto, ou seja, uma redução da porção fluido retido com a diminuição da porosidade.

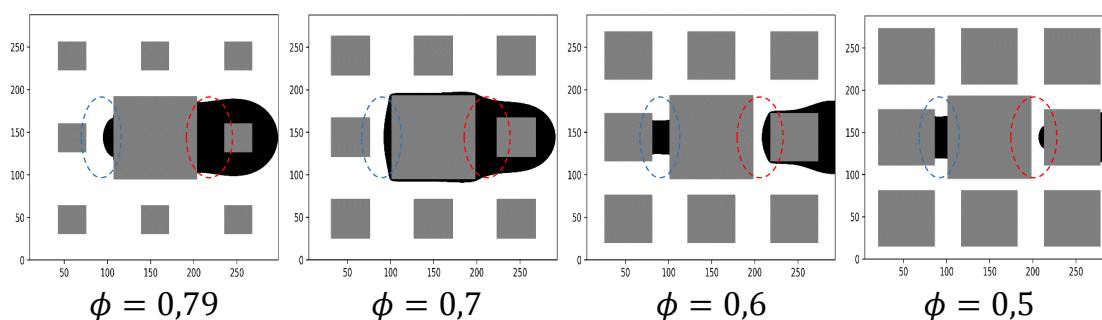


Figura 7.19 – Representação do processo de deslocamento para a segunda ordem do tapete de Sierpinski na faixa de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,79$. O ponto de eficiência de varredura constante é dado em $t = 120000[s]^{LB}$.

Os valores obtidos para eficiência de varredura em relação à porosidade da segunda ordem do tapete de Sierpinski, podem ser observados na Figura 7.20. Verificando-se um aumento da eficiência de varredura com a diminuição da porosidade, comportamento oposto ao observado para primeira ordem tapete de Sierpinski.

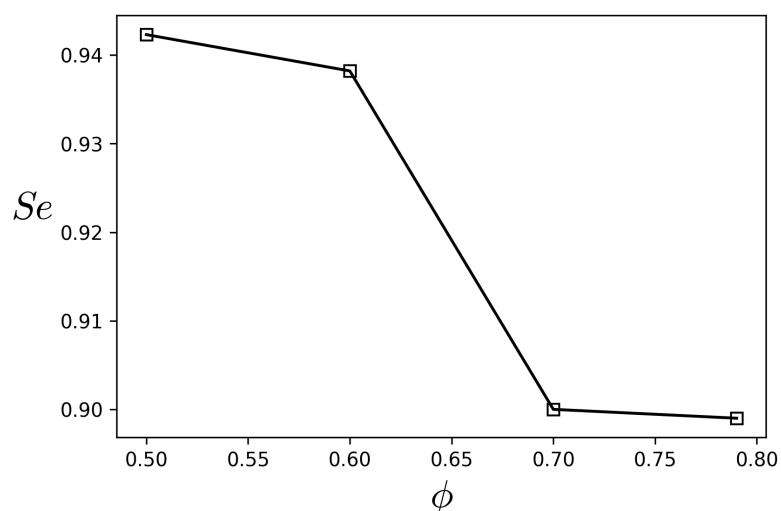


Figura 7.20 – Valores da eficiência de varredura pela porosidade da segunda ordem do tapete de Sierpinski.

Analisando o comportamento de aumento da eficiência de varredura com a diminuição da porosidade em relação as linhas de corrente, observa-se na Figura 7.21 a diminuição das regiões de recirculação do escoamento com a diminuição da porosidade, enquanto

para primeira ordem observa-se o aumento das regiões recirculação com a diminuição da porosidade.

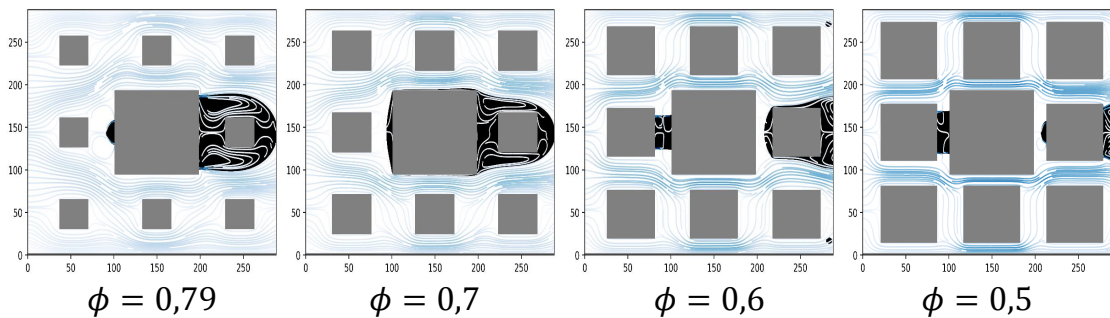


Figura 7.21 – Representação das linhas de corrente para a segunda ordem do tapete de Sierpinski na faixa de $0,5 \leq \theta_c \leq 0,79$. O ponto de eficiência de varredura constante é dado em $t = 120000[s]^{LB}$.

Complementando a análise, na Figura 7.22 observa-se a evolução do deslocamento no tempo para os dois extremos da porosidade. Visualmente, para $\phi = 0,79$ o deslocamento comporta-se entre os estados de deslocamento estável e *viscous fingering*, observando-se inicialmente formação de dois *fingers* que em seguida se unem formando uma frente regular estável; enquanto para $\phi = 0,5$ o comportamento está mais voltado para as características de *viscous fingering*, onde observa-se a formação inicial de *fingers* que percolam o canal quebrando a frente estável do deslocamento.

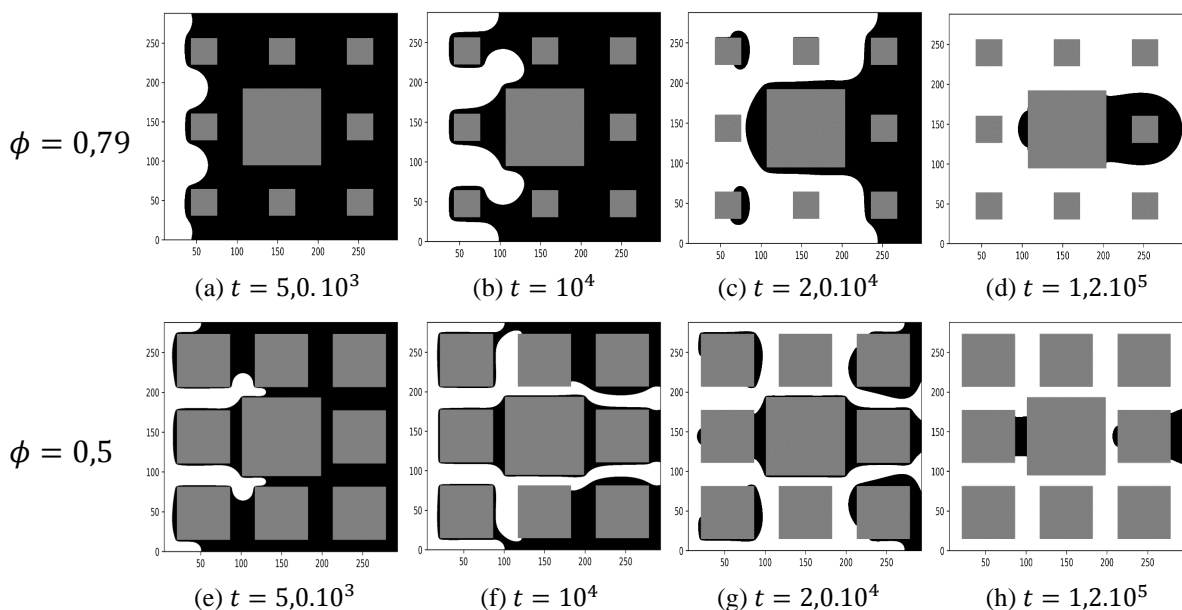


Figura 7.22 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para $\phi = 0,79$ e $\phi = 0,5$.

7.6.3 Três Primeira Ordens do Tapete de Sierpinski

Por fim, analisa-se a influência da forma de poros variando as ordens do tapete de Sierpinski. Como abordado na Seção 7.1, serão utilizadas apenas as três primeiras ordens

do tapete de Sierpinski, onde as porosidades são calculadas pela Equação 4.10 para $d_{b1} = H/3[m]^{LB}$, $d_{b2} = H/9[m]^{LB}$ e $d_{b3} = H/27[m]^{LB}$ fixos, variando na faixa de $0,7 \leq \theta_c \leq 0,88^\circ$. Na representação dos resultados obtidos, a Figura 7.19 ilustra as fases fluida e sólida, no ponto de eficiência de varredura constante. Visualmente, nota-se uma diferença na forma como fluido deslocado permanece retido na terceira ordem, em comparação com duas primeiras ordens. Entretanto, em ambos os casos a região de maior retenção do fluido deslocado está presente na parte central da saída do canal (destacada em vermelho na Figura 7.23).

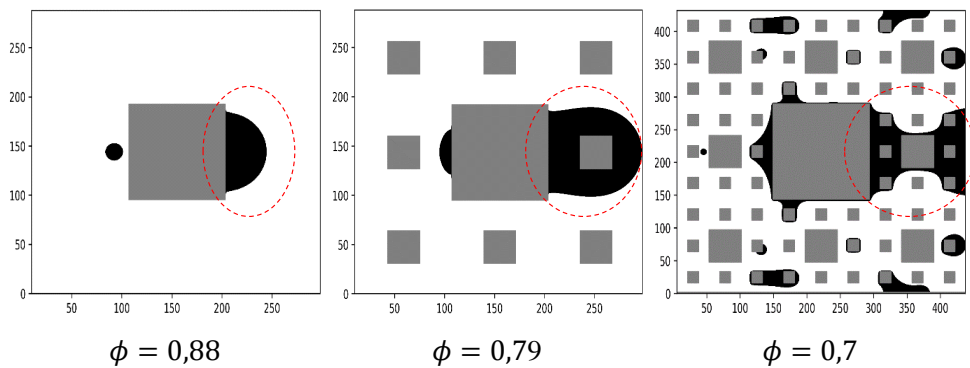


Figura 7.23 – Representação do processo de deslocamento para as três primeiras ordens do tapete de Sierpinski, no ponto de eficiência de varredura constante.

Os resultados da eficiência de varredura para variação da forma de poros são apresentados na Figura 7.24 em função da porosidade, onde a diminuição da porosidade representa o aumento das ordens do tapete de Sierpinski. Como pode ser observado na Figura 7.23, ocorre um aumento da porção de fluido retido com o aumento das ordens do tapete, e conseqüentemente uma diminuição da eficiência de varredura com diminuição da porosidade.

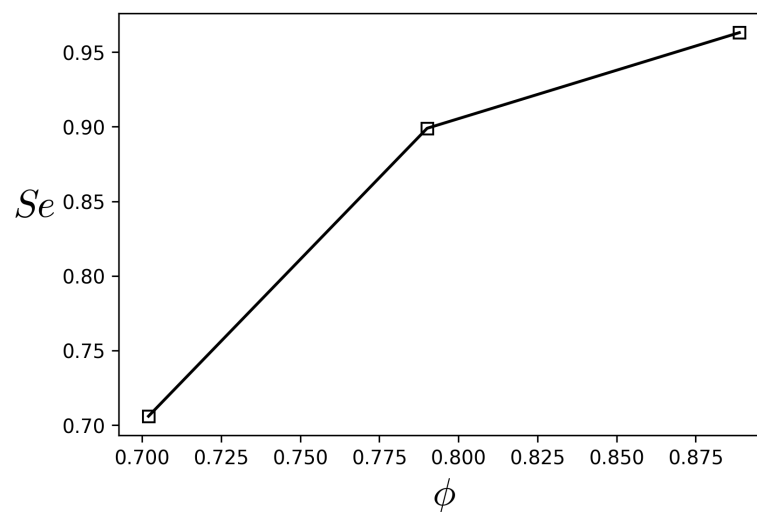


Figura 7.24 – Valores da eficiência de varredura pela porosidade para as três primeiras ordens do tapete de Sierpinski.

Finalmente, analisando o comportamento da evolução do deslocamento no tempo, observa-se na Figura 7.25 o deslocamento das três primeiras ordens do tapete de Sierpinski. Na representação das formas de poros, nota-se uma transição de deslocamento estável para *viscous fingering* com aumento das ordens do tapete. De forma, que a primeira ordem é caracterizada por uma frente de deslocamento estável, enquanto a segunda ordem apresenta um estado intermediário entre deslocamento estável e *viscous fingering*, e por fim, na terceira ordem observa-se a formação de *fingers* que quebram a frente estável de deslocamento, caracterizando o estado de *viscous fingering*.

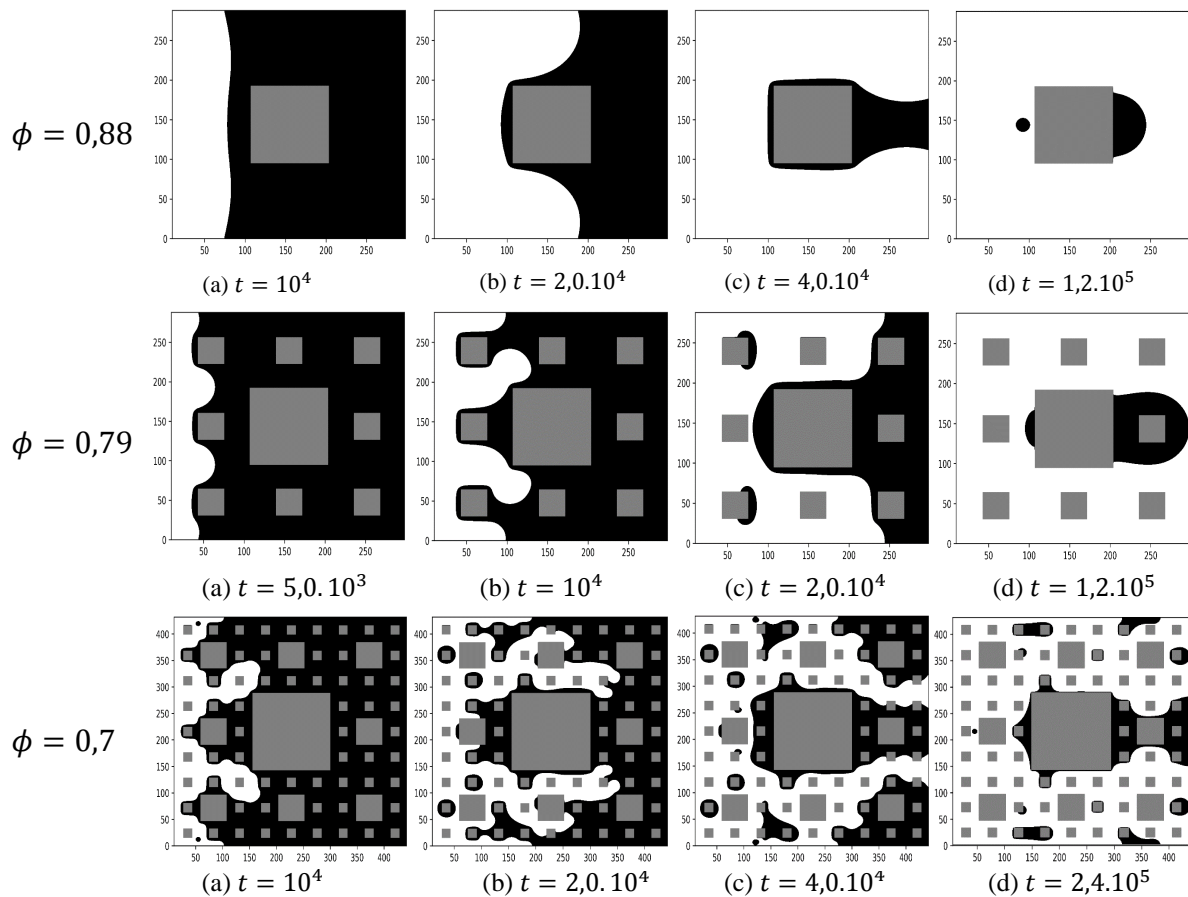


Figura 7.25 – Evolução no tempo ($t = [s]^{LB}$) dos estados de deslocamento para as três primeiras ordens do tapete de Sierpinski.

7.6.4 Síntese do Capítulo

Neste Capítulo foram apresentados os resultados do estudo do processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo, destacando-se a análise da influência do número de capilaridade, razão de viscosidade, ângulo de contato estático, porosidade e forma de poros, na eficiência de varredura do processo. De um modo geral, a variação do número de capilaridade e da razão de viscosidade demonstraram um comportamento esperado, sendo possível observar a transição entre os três diferentes estados de

deslocamento, assim como uma diminuição da eficiência de varredura com a diminuição tanto do número de capilaridade como da razão de viscosidade. Em relação a variação do ângulo de contato estático, observa-se uma tendência do aumento da eficiência de varredura com a diminuição do ângulo de contato estático, tanto no processo de imbibição como de drenagem. Por fim, na análise de variação da porosidade, em geral, é observado uma diminuição da eficiência de varredura com a redução da porosidade, porém observa-se o aumento da eficiência com a diminuição da porosidade para a segunda ordem do tapete de Sierpinski. Tal efeito oposto de diminuição da eficiência de varredura com o aumento da porosidade é interpretado como resultado do aumento das regiões de recirculação do escoamento.

8 CONCLUSÕES

Neste trabalho, analisou-se, através do método de *Lattice-Boltzmann*, o processo de deslocamento de fluidos imiscíveis em meio poroso heterogêneo. Estudando, especificamente, o deslocamento do fluido presente num canal poroso pela injeção de outro fluido imiscível no canal, onde o meio poroso foi representado por ordens de iteração da geometria fractal do tapete de Sierpinski.

A análise paramétrica do problema investigou como a eficiência de varredura (Se) e o comportamento do deslocamento de fluidos variam em termos dos parâmetros adimensionais do problema, associados às forças viscosas e capilares (i.e., razão de viscosidade, M , e número de capilaridade, Ca), ao efeito de molhabilidade (i.e., ângulo de contato estático, θ_c) e à região porosa (i.e., porosidade, ϕ). Com base nos testes de verificação e numa pré análise do problema, as faixas dos parâmetros foram determinadas para cada caso de análise como apresentado nas Tabelas 7.1, 7.2 e 7.3, verificando-se que:

- Na faixa de variação de M e Ca , ocorre o crescimento de Se tanto para o aumento de Ca como para o aumento de M . Também observa-se a representação dos três diferentes estados (*viscous fingering*, *capillary fingering* e deslocamento estável). Complementando os resultados obtidos, observou-se concordância com os resultados apresentados por Zhang *et al.* (2011b) e Bandara *et al.* (2013);
- Para o efeito da molhabilidade, o aumento de Se com a diminuição de θ_c na faixa de $0^\circ \leq \theta_c \leq 180^\circ$, ocorre tanto no processo de imbibição quanto no de drenagem. Enquanto no comportamento do processo de deslocamento, observou-se a transição do estado de deslocamento estável para o de *viscous fingering*, partindo $\theta_c = 0^\circ$ até $\theta_c = 180^\circ$, respectivamente;
- Em relação as propriedade do meio poroso, observou-se a diminuição de Se com a diminuição de ϕ para a primeira ordem do tapete de Sierpinski e para variação da forma de poros representadas pelas ordens do tapete. Enquanto, para a segunda ordem do tapete de Sierpinski ouve o aumento de Se com a diminuição de ϕ , efeito interpretado como resultado do aumento das regiões de recirculação do escoamento, ao contrário dos outros dois casos, onde observa-se uma diminuição das regiões de recirculação com o aumento da porosidade.

8.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

Como sugestão para trabalhos futuros e continuidade do presente estudo, diferentes frentes podem ser abordadas com relação ao método numérico de solução, à abordagem

do meio poroso e à possíveis desdobramentos do problema.

Dentro do campo numérico, o problema pode ser investigado por meio de outras abordagens, como os métodos de rede-poro e hidrodinâmica de partícula suavizada, de modo a corroborar os resultados obtidos no presente trabalho. Com relação ao método de *Lattice-Boltzmann*, podem ser consideradas a utilização de outros modelos para representação do sistema multifásico e a paralelização do código numérico. Como resultado espera-se uma maior eficiência computacional, devido ao processamento em paralelo, e uma maior eficácia na representação do problema com modelos que permitam uma maior variação dos parâmetros para um erro numérico aceitável.

Com respeito ao meio poroso, pode-se analisar o problema para diferentes formas geométricas e distribuições de obstáculos, bem como tratar o meio poroso através de uma abordagem homogênea adequada.

Buscando retratar de forma mais fiel o processo de deslocamento de fluido em meio poroso, pode-se considerar a utilização de fluidos mais complexos, introduzindo efeito de miscibilidade e comportamentos não newtonianos, molhabilidade heterogênea da superfície sólida, escoamento turbulento e convecção forçada, levando em conta a troca de calor entre os fluidos e o meio poroso.

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. ISSN 0021-9991. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999196955953>>.
- AGBALAKA, C. C.; DANDEKAR, A. Y.; PATIL, S. L.; KHATANIAR, S.; HEMSATH, J. *et al.* The effect of wettability on oil recovery: a review. In: SOCIETY OF PETROLEUM ENGINEERS. *SPE Asia Pacific Oil and Gas Conference and Exhibition*. [S.l.], 2008.
- ALLEN, M. P.; TILDESLEY, D. J. *Computer simulation of liquids*. [S.l.]: Oxford university press, 1989.
- ANDERSON, W. *et al.* Wettability literature survey-part 2: Wettability measurement. *Journal of petroleum technology*, Society of Petroleum Engineers, v. 38, n. 11, p. 1–246, 1986.
- BANDARA, U.; TARTAKOVSKY, A. M.; OOSTROM, M.; PALMER, B. J.; GRATE, J.; ZHANG, C. Smoothed particle hydrodynamics pore-scale simulations of unstable immiscible flow in porous media. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 62, p. 356–369, 2013.
- BAZARIN, R. L. M.; NAAKTGEBOREN, C.; JUNQUEIRA, S. L. M. Lattice-boltzmann assessment of the tortuosity of a 2d sierpinski carpet type of porous medium. In: *Proceedings of the 24th International Congress of Mechanical Engineering - COBEM2017*. Curitiba, Brazil: [s.n.], 2017.
- 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.
- BUCKLEY, S. E.; LEVERETT, M. Mechanism of fluid displacement in sands. *Transactions of the AIME*, Society of Petroleum Engineers, v. 146, n. 01, p. 107–116, 1942.
- BUSH, S. G. *Lectures on gas theory*. [S.l.]: Dover, New York, 1995.
- CHAVENT, G.; JAFFRÉ, J. *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation: Single Phase, Multiphase and Multicomponent Flows through Porous Media*. Elsevier Science, 1986. (Studies in Mathematics and its Applications). ISBN 9780080875385. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=sPVI-ZofdvkC>>.
- CHOMSURIN, C.; WERTH, C. J. Analysis of pore-scale nonaqueous phase liquid dissolution in etched silicon pore networks. *Water resources research*, Wiley Online Library, v. 39, n. 9, 2003.
- CIVAN, F. Reservoir formation damage: Fundamentals, modeling. *Assessment and*, 2007.
- CRAIG, F. F. *The reservoir engineering aspects of waterflooding*. [S.l.]: HL Doherty Memorial Fund of AIME, 1971. v. 3.

- DONALDSON, E. C.; CHILINGARIAN, G. V.; YEN, T. F. *Enhanced oil recovery, II: Processes and operations*. [S.l.]: Elsevier, 1989.
- DONG, B.; YAN, Y.; LI, W. Lbm simulation of viscous fingering phenomenon in immiscible displacement of two fluids in porous media. *Transport in Porous Media*, Springer, v. 88, n. 2, p. 293–314, 2011.
- DONG, B.; YAN, Y.; LI, W. *et al.* Numerical simulation of viscous fingering phenomenon in immiscible displacement of two fluids in porous media using lattice boltzmann method. Brunel University, 2009.
- DONG, B.; YAN, Y.; LI, W.; SONG, Y. Lattice boltzmann simulation of viscous fingering phenomenon of immiscible fluids displacement in a channel. *Computers & Fluids*, Elsevier, v. 39, n. 5, p. 768–779, 2010.
- DULLIEN, F. A. Porous media: fluid transport and pore structure. Academic press, 1991.
- DUSSAN, E. On the spreading of liquids on solid surfaces: static and dynamic contact lines. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Annual Reviews 4139 El Camino Way, PO Box 10139, Palo Alto, CA 94303-0139, USA, v. 11, n. 1, p. 371–400, 1979.
- ER, V.; BABADAGLI, T.; XU, Z. Pore-scale investigation of the matrix- fracture interaction during co2 injection in naturally fractured oil reservoirs. *Energy & Fuels*, ACS Publications, v. 24, n. 2, p. 1421–1430, 2009.
- 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: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.1505>>.
- FULCHER-JR, R. A.; ERTEKIN, T.; STAHL, C. *et al.* Effect of capillary number and its constituents on two-phase relative permeability curves. *Journal of petroleum technology*, Society of Petroleum Engineers, v. 37, n. 02, p. 249–260, 1985.
- GRUNAU, D.; CHEN, S.; EGGERT, K. A lattice boltzmann model for multiphase fluid flows. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, AIP, v. 5, n. 10, p. 2557–2562, 1993.
- GUNSTENSEN, A. K.; ROTHMAN, D. H. Lattice-boltzmann studies of immiscible two-phase flow through porous media. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, Wiley Online Library, v. 98, n. B4, p. 6431–6441, 1993.
- GUNSTENSEN, A. K.; ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. Lattice boltzmann model of immiscible fluids. *Physical Review A*, APS, v. 43, n. 8, p. 4320, 1991.
- GUO, Z.; SHU, C. *Lattice Boltzmann method and its applications in engineering*. [S.l.]: World Scientific, 2013. v. 3.
- GUO, Z.; ZHENG, C.; SHI, B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice boltzmann method. *Physical Review E*, APS, v. 65, n. 4, p. 046308, 2002.
- HAZEN, A. Some physical properties of sand and gravels. massachusetts state board of health. *24th Annual Report*, 1893.
- 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.; 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. *Physical Review E*, APS, v. 57, n. 1, p. R13, 1998.
- 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.
- HOLDYCH, D.; ROVAS, D.; GEORGIADIS, J.; BUCKIUS, R. An improved hydrodynamics formulation for multiphase flow lattice-boltzmann models. *International Journal of Modern Physics C*, World Scientific, v. 9, n. 08, p. 1393–1404, 1998.
- HUANG, H.; JR, D. T. T.; SCHAAP, M. G.; SUKOP, M. C. Proposed approximation for contact angles in shan-and-chen-type multicomponent multiphase lattice boltzmann models. *Physical Review E*, APS, v. 76, n. 6, p. 066701, 2007.
- HUANG, H.; SUKOP, M.; LU, X. *Multiphase lattice Boltzmann methods: Theory and application*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2015.
- HUANG, H.; SUKOP, M.; LU, X. *Multiphase lattice Boltzmann methods: Theory and application*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2015.
- ISHII, M.; HIBIKI, T. *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2010.
- JIAN-HUA, L.; BO-MING, Y. Tortuosity of flow paths through a sierpinski carpet. *Chinese Physics Letters*, IOP Publishing, v. 28, n. 3, p. 034701, 2011.
- JOEKAR-NIASAR, V.; HASSANIZADEH, S. Analysis of fundamentals of two-phase flow in porous media using dynamic pore-network models: A review. *Critical reviews in environmental science and technology*, Taylor & Francis, v. 42, n. 18, p. 1895–1976, 2012.
- KANG, Q.; ZHANG, D.; CHEN, S. Immiscible displacement in a channel: simulations of fingering in two dimensions. *Advances in water resources*, Elsevier, v. 27, n. 1, p. 13–22, 2004.
- 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.; KUSUMAATMAJA, H.; KUZMIN, A.; SHARDT, O.; SILVA, G.; VIGGEN, E. M. *The Lattice Boltzmann Method*. [S.l.]: Springer, 2017.
- KUZMIN, A. *Multiphase simulations with lattice Boltzmann scheme*. [S.l.: s.n.], 2010.
- LAGE, J. The fundamental theory of flow through permeable media from darcy to turbulence. *Transport phenomena in porous media*, v. 1, 1998.
- LATT, J. Choice of units in lattice boltzmann simulations. *Freely available online at http://lmethod.org/_media/howtos:lbunits.pdf*, 2008.
- LATVA-KOKKO, M.; ROTHMAN, D. H. Diffusion properties of gradient-based lattice boltzmann models of immiscible fluids. *Physical Review E*, APS, v. 71, n. 5, p. 056702, 2005.

- LEE, T.; LIU, L. Lattice boltzmann simulations of micron-scale drop impact on dry surfaces. *Journal of Computational Physics*, Elsevier, v. 229, n. 20, p. 8045–8063, 2010.
- 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. *J. Fluid Mech*, v. 135, n. 34, p. 337–353, 1983.
- LIBOFF, R. L. *Kinetic Theory: Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions*. [S.l.]: Springer-Verlag New York, 2003. (Graduate Texts in Contemporary Physics).
- LIU, H.; KANG, Q.; LEONARDI, C. R.; SCHMIESCHEK, S.; NARVÁEZ, A.; JONES, B. D.; WILLIAMS, J. R.; VALOCCHI, A. J.; HARTING, J. Multiphase lattice boltzmann simulations for porous media applications. *Computational Geosciences*, Springer, v. 20, n. 4, p. 777–805, 2016.
- LIU, H.; VALOCCHI, A. J.; KANG, Q.; WERTH, C. Pore-scale simulations of gas displacing liquid in a homogeneous pore network using the lattice boltzmann method. *Transport in porous media*, Springer, v. 99, n. 3, p. 555–580, 2013.
- LIU, H.; VALOCCHI, A. J.; WERTH, C.; KANG, Q.; OOSTROM, M. Pore-scale simulation of liquid co 2 displacement of water using a two-phase lattice boltzmann model. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 73, p. 144–158, 2014.
- LYKLEMA, J. *Fundamentals of Interface and Colloid Science: Liquid-Fluid Interfaces*. [S.l.]: Academic Press, 2000. v. 3.
- MANDELBROT, B. *The Fractal Geometry of Nature*. Henry Holt and Company, 1982. ISBN 9780716711865. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=0R2LkE3N7-oC>>.
- MCDOUGALL, S.; SORBIE, K. *et al.* The impact of wettability on waterflooding: pore-scale simulation. *SPE Reservoir Engineering*, Society of Petroleum Engineers, v. 10, n. 03, p. 208–213, 1995.
- 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: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.61.2332>>.
- MEIRA, R. E. d. C. P. d. *Pore-scale simulations of gas displacing liquid in a homogeneous pore network using the lattice Boltzmann method* — Universidade Tecnológica Federal do Paraná, 2016.
- MOHAMAD, A. A. *Lattice Boltzmann method: fundamentals and engineering applications with computer codes*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2011.
- MUGGERIDGE, A.; COCKIN, A.; WEBB, K.; FRAMPTON, H.; COLLINS, I.; MOULDS, T.; SALINO, P. Recovery rates, enhanced oil recovery and technological limits. *Phil. Trans. R. Soc. A*, The Royal Society, v. 372, n. 2006, p. 20120320, 2014.
- NIELD, D. A.; BEJAN, A. *Convection in porous media*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2006.

- PHILIPPI, P. C.; JR, L. A. H.; SANTOS, L. O. D.; SURMAS, R. From the continuous to the lattice boltzmann equation: the discretization problem and thermal models. *Physical Review E*, APS, v. 73, n. 5, p. 056702, 2006.
- PHILIPPI, P. C.; MATTILA, K. K.; SIEBERT, D. N.; SANTOS, L. O. dos; JÚNIOR, L. A. H.; SURMAS, R. Lattice-boltzmann equations for describing segregation in non-ideal mixtures. *Journal of Fluid Mechanics*, Cambridge University Press, v. 713, p. 564–587, 2012.
- PORTER, M. L.; COON, E.; KANG, Q.; MOULTON, J.; CAREY, J. Multicomponent interparticle-potential lattice boltzmann model for fluids with large viscosity ratios. *Physical Review E*, APS, v. 86, n. 3, p. 036701, 2012.
- RAHMAN, T. S. Molecular-dynamics simulation of surface phenomena. In: _____. *Characterization of Materials*. John Wiley & Sons, Inc., 2002. ISBN 9780471266969. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/0471266965.com015.pub2>>.
- REEH, H. Summational invariants. In: _____. *Theoretical Physics Fin de Siècle: Proceedings of the XII Max Born Symposium Held in Wrocław, Poland, 23–26 September 1998*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2000. p. 141–148. ISBN 978-3-540-46700-7. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/3-540-46700-9_9>.
- REIDER, M. B.; STERLING, J. D. Accuracy of discrete-velocity bgk models for the simulation of the incompressible navier-stokes equations. *Computers & fluids*, Elsevier, v. 24, n. 4, p. 459–467, 1995.
- REIS, T.; PHILLIPS, T. Lattice boltzmann model for simulating immiscible two-phase flows. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 40, n. 14, p. 4033, 2007.
- ROTHMAN, D. H.; KELLER, J. M. Immiscible cellular-automaton fluids. *Journal of Statistical Physics*, Springer, v. 52, n. 3, p. 1119–1127, 1988.
- SALATHIEL, R. *et al.* Oil recovery by surface film drainage in mixed-wettability rocks. *Journal of Petroleum Technology*, Society of Petroleum Engineers, v. 25, n. 10, p. 1–216, 1973.
- SBRAGAGLIA, M.; BENZI, R.; BIFERALE, L.; SUCCI, S.; SUGIYAMA, K.; TOSCHI, F. Generalized lattice boltzmann method with multirange pseudopotential. *Physical Review E*, APS, v. 75, n. 2, p. 026702, 2007.
- SHAN, X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice boltzmann models. *Physical Review E*, APS, v. 73, n. 4, p. 047701, 2006.
- SHAN, X.; CHEN, H. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, APS, v. 47, n. 3, p. 1815, 1993.
- SHAN, X.; CHEN, H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice boltzmann equation. *Physical Review E*, APS, v. 49, n. 4, p. 2941, 1994.
- 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.; 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.; PHILIPPI, P. C.; MATTILA, K. Consistent lattice boltzmann equations for phase transitions. *Physical Review E, APS*, v. 90, n. 5, p. 053310, 2014.

SIKKENK, J. H.; INDEKEU, J. O.; LEEUWEN, J. M. J. van; VOSSNACK, E. O. Molecular-dynamics simulation of wetting and drying at solid-fluid interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 59, p. 98–101, Jul 1987. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.98>>.

SWIFT, M. R.; ORLANDINI, E.; OSBORN, W.; YEOMANS, J. Lattice boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Physical Review E, APS*, v. 54, n. 5, p. 5041, 1996.

SWIFT, M. R.; OSBORN, W.; YEOMANS, J. Lattice boltzmann simulation of nonideal fluids. *Physical review letters, APS*, v. 75, n. 5, p. 830, 1995.

TORRECILLA, M. d. M. *Numerical simulation of multi-fluid flows with the Particle Finite Element Method*. [S.l.]: Universitat Politècnica de Catalunya, 2010.

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.

UNVERDI, S. O.; TRYGGVASON, G. Computations of multi-fluid flows. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 60, n. 1, p. 70 – 83, 1992. ISSN 0167-2789. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016727899290227E>>.

WANG, Y.; ZHANG, C.; WEI, N.; OOSTROM, M.; WIETSMA, T. W.; LI, X.; BONNEVILLE, A. Experimental study of crossover from capillary to viscous fingering for supercritical co₂–water displacement in a homogeneous pore network. *Environmental science & technology, ACS Publications*, v. 47, n. 1, p. 212–218, 2012.

WHITAKER, S. Flow in porous media i: A theoretical derivation of darcy's law. *Transport in porous media, Springer*, v. 1, n. 1, p. 3–25, 1986.

WU, Y.-S. Chapter 1 - introduction. In: WU, Y.-S. (Ed.). *Multiphase Fluid Flow in Porous and Fractured Reservoirs*. Boston: Gulf Professional Publishing, 2016. p. 1 – 13. ISBN 978-0-12-803848-2. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128038482000015>>.

ZHANG, C.; OOSTROM, M.; GRATE, J. W.; WIETSMA, T. W.; WARNER, M. G. Liquid co₂ displacement of water in a dual-permeability pore network micromodel. *Environmental science & technology, ACS Publications*, v. 45, n. 17, p. 7581–7588, 2011.

ZHANG, C.; OOSTROM, M.; WIETSMA, T. W.; GRATE, J. W.; WARNER, M. G. 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.

ZHENG, H.; SHU, C.; CHEW, Y.-T. A lattice boltzmann model for multiphase flows with large density ratio. *Journal of Computational Physics, Elsevier*, v. 218, n. 1, p. 353–371, 2006.

ZOU, Q.; HE, X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. *Physics of fluids, AIP*, v. 9, n. 6, p. 1591–1598, 1997.

APÊNDICE A – NOTAÇÕES

Neste capítulo são definidas as notações matemáticas utilizadas no decorrer da dissertação.

As variáveis escalares são denotadas com caracteres minúsculo e maiúsculos, enquanto os vetores com caracteres minúsculos e em negrito e os tensores com caracteres maiúsculos e em negrito. 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 a e b , por ab . Para os vetores e tensores também será utilizada a notação indexada, 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. Aplicando para um caso tridimensional, como exemplo, tem-se o produto escalar $\xi \cdot u$ escrito

$$\xi \cdot u = \xi_\alpha u_\alpha = \xi_x u_x + \xi_y u_y + \xi_z u_z. \quad (\text{A.1})$$

O operador nabla, ∇ , é o vetor que contém as derivadas espaciais em cada direção. Na Tabela A.1 encontra-se um sumário de notações com alguns exemplos.

Tabela A.1 – Notações escalar, vetorial, tensorial e produtos.

Variáveis	Exemplo	Notação Indexada
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	$\xi \cdot u$ $\mathbf{\Pi} : \mathbf{P}$	$\xi_\alpha u_\alpha$ $\Pi_{\alpha\beta} P_{\alpha\beta}$
Produto Vetorial	$\mathbf{\Pi} \cdot u$	$\Pi_{\alpha\beta} u_\beta$
Produto Tensorial	ξu	$\xi_\alpha u_\beta$
Nabla	∇_x, ∇_r	$\partial x_\alpha, \partial r_\alpha$

APÊNDICE B – FUNDAMENTOS DA TEORIA CINÉTICA DOS GASES

Neste capítulo são apresentados brevemente os fundamentos da teoria cinética dos gases, levando em conta o desenvolvimento matemático da equação de Boltzmann e a representação das equações de conservação macroscópicas.

B.1 Espaço de Fase

Analisando microscopicamente um gás, pode-se considerá-lo como um sistema representado de N partículas, que possuem posição \mathbf{x} e velocidade $\boldsymbol{\xi}$. Portanto, considera-se um sistema de N partículas em um espaço $6N$ dimensional, correspondendo a $3N$ coordenadas generalizadas de posição

$$\check{\mathbf{x}} = (x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N) \quad (\text{B.1})$$

ou

$$\check{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N), \quad (\text{B.2})$$

onde \mathbf{x}_N representa as três coordenadas de posição da partícula i , e $3N$ coordenadas generalizadas de velocidade

$$\check{\boldsymbol{\xi}} = (\xi_{x_1}, \xi_{y_1}, \xi_{z_1}, \dots, \xi_{x_N}, \xi_{y_N}, \xi_{z_N}) \quad (\text{B.3})$$

ou

$$\check{\boldsymbol{\xi}} = (\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \dots, \boldsymbol{\xi}_N), \quad (\text{B.4})$$

onde $\boldsymbol{\xi}_N$ representa as três coordenadas de velocidade da partícula i (KREMER, 2010). Este espaço é denominado de espaço de fase.

B.2 Função Densidade de Probabilidade

Utilizando uma abordagem probabilística para a descrição do sistema de partículas em relação a posição e velocidade em função do tempo, é definido uma função densidade

probabilidade $\mathcal{F}_N(\check{x}, \check{\xi}, t)$, sendo

$$\mathcal{F}_N(\check{x}, \check{\xi}, t) d\check{x} d\check{\xi} \quad (\text{B.5})$$

a probabilidade do sistema de N partículas se encontrar no volume $d\check{x}d\check{\xi}$ do espaço de fase, num certo tempo t (LIBOFF, 2003). Por definição

$$\int \mathcal{F}_N d\check{x} d\check{\xi} \leq 1. \quad (\text{B.6})$$

B.3 Equação de Liouville

Utilizando uma interpretação geométrica do teorema Liouville, tem-se que um volume arbitrário no espaço de fase é invariante a sua transformação canônico. Deste modo, a variação do volume no tempo permanece constante, ou seja

$$\frac{dV}{dt} = 0, \quad (\text{B.7})$$

onde V é um volume do espaço de fase. Para mais detalhes do teorema Liouville ver Liboff (2003).

Com base no teorema de Liouville, aplica-se um balanço da função densidade de probabilidade através do volume de controle arbitrário do espaço de fase ao longo do tempo, obtendo

$$\frac{d\mathcal{F}_N}{dt} = \frac{\partial \mathcal{F}_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\xi_i \cdot \nabla_{x_i} \mathcal{F}_N + \dot{\xi}_i \cdot \nabla_{\xi_i} \mathcal{F}_N \right) = 0, \quad (\text{B.8})$$

onde $\dot{\xi} = d\xi/dt$ é a força por unidade de massa atuante na partícula. A equação de Liouville (Eq. B.8), fornece um descrição probabilística do sistema de partículas onde a variação da função densidade de probabilidade permanece constante ao longo do tempo para um volume específico do espaço de fase.

B.4 Hierarquia BBGKY

Considerando um subsistema do conjunto de N com s partículas, onde $s < N$, pode-se reduzir a função densidade de probabilidade a este subconjunto, onde

$$\mathcal{F}_s(x_1, \dots, x_s, \xi_1, \dots, \xi_s, t) = \int \mathcal{F}_N(x_1, \dots, x_N, \xi_1, \dots, \xi_N, t) dx_{s+1} \dots dx_N d\xi_{s+1} \dots \xi_N \quad (\text{B.9})$$

em um certo volume do espaço de fase. Para casos específicos de $s = 1$ e $s = 2$, tem-se

$$\mathcal{F}_1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) = \int \mathcal{F}_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_N, t) d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N, \quad (\text{B.10})$$

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) = \int \mathcal{F}_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_N, t) d\mathbf{x}_3 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_3 \dots d\boldsymbol{\xi}_N. \quad (\text{B.11})$$

Portanto, a Equação B.9 permite encontrar a densidade de probabilidade das s primeiras partículas, independente das $s + 1$ até N partículas, para certas posições e velocidades do espaço de fase.

Aplicando a redução da função de densidade de probabilidade, definida pela Equação B.9, para $s = 1$ e $s = 2$, na Equação B.8 considerando a força por unidade de massa $\dot{\boldsymbol{\xi}}_i = \mathbf{g}_i + \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{g}_{ij}$, onde \mathbf{g}_i corresponde a força resultante de fontes externas e \mathbf{g}_{ij} corresponde a força de interação entre as partículas, tem-se respectivamente

$$\frac{\partial \mathcal{F}_1}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} \mathcal{F}_1 + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} \mathcal{F}_1 = -(N-1) \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} \cdot \int \mathbf{g}_{12} \mathcal{F}_2 d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2, \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} \mathcal{F}_2 + \boldsymbol{\xi}_2 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_2} \mathcal{F}_2 + (\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_{12}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} \mathcal{F}_2 + (\mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_{21}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2} \mathcal{F}_2 \\ = -(N-2) \left(\nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} \cdot \int \mathbf{X}_{13} \mathcal{F}_3 d\mathbf{x}_3 d\boldsymbol{\xi}_3 + \nabla_{\boldsymbol{\xi}_2} \cdot \int \mathbf{X}_{23} \mathcal{F}_3 d\mathbf{x}_3 d\boldsymbol{\xi}_3 \right). \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Nota-se uma dependência da Equação B.12 com a Equação B.13, sendo que o desenvolvimento de \mathcal{F}_1 e depende \mathcal{F}_2 . As equações da hierarquia, desenvolvidas por N. N. Bogoliubov, M. Born, G. Kirkwood, H. S. Green e J. Yvon (BBGKY), apresentam sempre uma dependência da equação de ordem s para a função \mathcal{F}_{s+1} . Escrevendo a equação da Hierarquia de BBGKY na forma generalizada, tem-se

$$\frac{\partial \mathcal{F}_s}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left[\boldsymbol{\xi}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}_i} \mathcal{F}_s + \left(\mathbf{g}_i + \sum_{j=1}^s \mathbf{g}_{ij} \right) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} \mathcal{F}_s \right] = - \sum_{i=1}^s (N-s) \nabla_{\boldsymbol{\xi}_i} \cdot \int \mathbf{g}_{i(s+1)} \mathcal{F}_{s+1} d\mathbf{x}_{s+1} d\boldsymbol{\xi}_{s+1}. \quad (\text{B.14})$$

O ganho sobre a equação de Liouville (Eq.B.8) com relação a hierarquia BBGKY não é claro, pois no caso de Liouville tem-se um somatório da ordem de N partículas para suas posições, velocidades e respectivas variações, e em BBGKY tem-se N equações com dependências sucessivas. Porém, a hierarquia BBGKY permite que algumas considerações quebrem sua cadeia de dependências sucessivas e resulte numa equação mais simplificada (KREMER, 2010).

B.5 Equação de Boltzmann

A equação apresentada pelo físico austríaco Ludwig Boltzmann é resultante de seu trabalho "Vorlesungen über Gastheorie", publicado em 1898 na língua alemã (BOLTZMANN, 1898), que foi traduzido para o inglês mais tarde por Bush (1995). A metodologia utilizada por Boltzmann para a dedução de sua equação não é a mesma utilizada no presente apêndice. Porém, a dedução da equação de Boltzmann a partir da equação de Liouville permite uma boa compreensão dos limites e das simplificações em relação as equações mais gerais. Para mais detalhes do procedimento de dedução da equação de Boltzmann, ver Kremer (2010).

Para a dedução da equação de Boltzmann através da hierarquia de BBGKY, considera-se as hipóteses de:

- Gás de massa extremamente baixa (gás rarefeito), onde as interações entre partículas possa ser considerada como binária, do modo que colisões de três ou mais partículas seja possível porém pouco provável. Desta forma, a Equação B.13 pode ser reduzida para

$$\frac{\partial \mathcal{F}_2}{\partial t} + \xi_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} \mathcal{F}_2 + \xi_2 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_2} \mathcal{F}_2 + (\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_{12}) \cdot \nabla_{\xi_1} \mathcal{F}_2 + (\mathbf{g}_2 + \mathbf{g}_{21}) \cdot \nabla_{\xi_2} \mathcal{F}_2 = 0, \quad (\text{B.15})$$

eliminando os termo de ordem $N = 3$.

- Ação de forças externas negligenciáveis em relação as forças de interação das partículas, podendo-se escrever a Equação B.15 na forma

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2, t) = \mathcal{F}_2(\mathbf{x}_1 - \xi_1 \Delta t, \mathbf{x}_2 - \xi_2 \Delta t, \xi_1 - \mathbf{g}_{12} \Delta t, \xi_2 - \mathbf{g}_{21} \Delta t, t - \Delta t). \quad (\text{B.16})$$

- Caos molecular, onde no tempo $\Delta t = 0$ as partículas estão distantes e com velocidade não correlacionadas, desta forma a Equação B.16 pode ser reformulada para

$$\mathcal{F}_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2, t + \Delta t) = \mathcal{F}_1(\mathbf{x}_1 - \Delta \mathbf{x}_1, \xi_1 - \Delta \xi_1, t - \Delta t) \mathcal{F}_1(\mathbf{x}_2 - \Delta \mathbf{x}_2, \xi_2 - \Delta \xi_2, t - \Delta t). \quad (\text{B.17})$$

- Função densidade de proabilidade não varia ao longo de \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 no início do processo de colisão. Portanto, entre os pontos \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 pode-se negligenciar $\Delta \mathbf{x}_1$, $\Delta \mathbf{x}_2$ e Δt , e considerar a $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}$, tendo

$$\mathbf{g}_{12} \cdot \nabla_{\xi_1} \mathcal{F}_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \xi_1, \xi_2, t) = \frac{\partial}{\partial t} [\mathcal{F}_1(\mathbf{x}, \xi_1 - \Delta \xi_1, t) \mathcal{F}_1(\mathbf{x}, \xi_2 - \Delta \xi_2, t)]. \quad (\text{B.18})$$

Aplicando as hipóteses acima para a Equação B.12, integrando a função densidade de probabilidade no intervalo Δt

$$\overline{\mathcal{F}}_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{1}{\Delta t} \int^{\Delta t} \mathcal{F}_1 dt, \quad (\text{B.19})$$

e fazendo

$$f_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_s, t) = \frac{N!}{(N-s)!} \overline{\mathcal{F}}_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_s, t), \quad (\text{B.20})$$

obtem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} f_1 + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} f_1 = \frac{1}{\Delta t} \int \left[f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_1, t) f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_2, t) \right. \\ \left. - f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t) f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_2, t) \right] d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2, \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

onde f_1 é função distribuição de uma partícula e $\boldsymbol{\xi}' = \boldsymbol{\xi} - \Delta\boldsymbol{\xi}$. Aplicando na Equação B.21 uma mudança de coordenadas cartesianas para cilíndricas, tem-se a equação de Boltzmann em sua forma original dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{x}_1} f_1 + \mathbf{g}_1 \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}_1} f_1 = \int \left[f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_1, t) f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_2, t) \right. \\ \left. - f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t) f_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_2, t) \right] \varsigma b db d\varepsilon d\boldsymbol{\xi}_2, \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

onde b é o fator de impacto, ε é o ângulo azimutal e $\varsigma = |\boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1|$ é a grandeza da velocidade relativa da partícula de colisão. Simplificando a escrita da Equação B.22 retira-se o subíndice 1 e muda-se o subíndice 2 pra 1, ficando na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \mathbf{g} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}} f = \int \left[f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_1, t) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_2, t) \right. \\ \left. - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_2, t) \right] \varsigma b db d\varepsilon d\boldsymbol{\xi}_1. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

B.6 Função Distribuição de Equilíbrio

O termo presente do lado direito da Equação B.23, dado por

$$\Omega = \int \left[f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_1, t) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}'_2, t) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t) f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_2, t) \right] g b db d\varepsilon d\boldsymbol{\xi}_2, \quad (\text{B.24})$$

é denominado operador de colisão, sendo uma equação integro-diferencial responsável por alterar a função $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ ao decorrer do tempo (KREMER, 2010).

Segundo Reeh (2000), em 1872 Ludwig Boltzmann derivou a função distribuição de Maxwell para o momento de partículas em um gás através da Equação (Eq. B.23), utilizando as propriedades de invariância somacional das funções presentes no operador de colisão.

Portanto, considerando um sistema em equilíbrio, onde conserva-se as propriedades de densidade, quantidade de movimento e energia, a atuação do operador de colisão deve ser nula. Do modo que, para $\Omega = 0$, tem-se

$$f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}', t)f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1', t) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t). \quad (\text{B.25})$$

Aplicando o logaritmo na equação B.25

$$\ln f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}', t) + \ln f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1', t) = \ln f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \ln f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_1, t), \quad (\text{B.26})$$

onde $\ln f = \ln f^{eq}$ é uma função invariante somacional, que pode ser escrita na forma

$$f^{eq} = ae^{-b(\boldsymbol{\xi}-\mathbf{u})^2}, \quad (\text{B.27})$$

onde a e b são constantes quaisquer (KREMER, 2010). Admitindo as relações de conservação

$$\begin{aligned} n &= \int f^{eq} d\boldsymbol{\xi}, \\ \rho &= \int m f^{eq} d\boldsymbol{\xi}, \\ \mathbf{u} &= \frac{1}{\rho} \int m f^{eq} \boldsymbol{\xi} d\boldsymbol{\xi}, \\ \epsilon &= \frac{DkT}{2} = \frac{1}{\rho} \int m f^{eq} \frac{m}{2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u})^2 d\boldsymbol{\xi}, \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

obtem-se a função distribuição de equilíbrio derivada por Maxwell, dada por

$$f^{eq}(\boldsymbol{\xi}) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{m}{2kT} \mathbf{c}^2}, \quad (\text{B.29})$$

onde n é o número de partículas por volume, m é a massa da partícula, ρ é a densidade, \mathbf{u} é a velocidade macroscópica, $\mathbf{c} = \boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}$ é a velocidade de flutuação, ϵ é a energia cinética de flutuação, k é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e D é a dimensão de análise.

B.7 Modelo de Colisão

Devido à dificuldade de resolução da equação integro-diferencial, a qual representa o operador de colisão, diferentes modelos que simplificam o operador foram desenvolvidos.

Dentre estes destaca-se o modelo de Bhatnagar, Gross e Krook (1954) (BGK), dado pela equação

$$\Omega_{BGK} = \frac{1}{\tau}(f^{eq} - f) \quad (\text{B.30})$$

onde τ é o tempo de relaxação. O modelo apresentado satisfaz as propriedades de conservação estabelecidas por Boltzmann para a dedução da função distribuição de Maxwell em um estado de equilíbrio. Portanto, reescrevendo a Equação B.23 com o modelo BGK, tem-se a equação Boltzmann-BGK na forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}(f) + \mathcal{F} \cdot \nabla_{\boldsymbol{\xi}}(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq}). \quad (\text{B.31})$$

B.8 Propriedades Macroscópicas

As propriedades macroscópicas que descrevem o estado de um gás podem ser derivadas através da função distribuição f . Devido à sua característica probabilística de representação do número de partículas em um certo volume do espaço de fase, a integração da função distribuição sobre todo o espaço de velocidades para diferentes ordens de momento, resulta nas propriedades de equilíbrio

$$n(\mathbf{x}, t) = \int f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c} = \int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c}, \quad (\text{B.32})$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int m f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c} = \int m f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c}, \quad (\text{B.33})$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int \boldsymbol{\xi} m f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c} = \frac{1}{\rho} \int \boldsymbol{\xi} m f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c}, \quad (\text{B.34})$$

$$\epsilon(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int \frac{1}{2} \mathbf{c}^2 m f^{eq}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c} = \frac{1}{\rho} \int \frac{1}{2} \mathbf{c}^2 m f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\mathbf{c}. \quad (\text{B.35})$$

Integrando a função distribuição para momentos de segunda, terceira e quarta ordem, que envolvem termos de não equilíbrio, tem-se

$$\mathbf{P} = \int \mathbf{c} \mathbf{c} m f d\mathbf{c}, \quad (\text{B.36})$$

$$\mathbf{Q} = \int \mathbf{c} \mathbf{c} \mathbf{c} m f d\mathbf{c}, \quad (\text{B.37})$$

$$\mathbf{q} = \int \frac{1}{2} \mathbf{c}^2 c m f d\mathbf{c}, \quad (\text{B.38})$$

$$\mathbf{R} = \int c c c c m f d\mathbf{c}, \quad (\text{B.39})$$

onde \mathbf{P} é o tensor pressão, \mathbf{Q} é o tensor momento de terceira ordem, \mathbf{q} é o vetor fluxo de energia interna e \mathbf{R} é o tensor do momento de quarta ordem.

B.9 Adimensionalização

Escrevendo a Equação B.31 na forma adimensional, com base nas variáveis adimensionais

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{\ell}, \quad t^* = t \frac{\xi_{med}}{\ell}, \quad \xi^* = \frac{\xi}{\xi_{med}}, \quad \mathbf{g}^* = \mathbf{g} \frac{\ell}{\xi_{med}^2}, \quad f^* = f \frac{\xi_{med}^{-D}}{n_{ref}}, \quad \Omega^* = \Omega \frac{\xi_{med}^{-D-1} \ell}{n_{ref}} \quad (\text{B.40})$$

tem-se

$$\frac{\partial f^*}{\partial t^*} + \xi^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}^*} f^* + \mathbf{g}^* \cdot \nabla_{\xi^*} f^* = \Omega^* = \frac{f^* - f^{eq,*}}{\tau^*} \quad (\text{B.41})$$

onde $\xi_{med} = \sqrt{kT_{ref}/m}$ é a velocidade molecular média, T_{ref} é a temperatura de referência, n_{ref} é a densidade de referência, ℓ é o caminho médio livre da partícula e $\tau^* = \tau \xi_{med}/\ell$.

Adimensionalizando também as propriedades macroscópicas, tem-se

$$\rho^* = \frac{n}{n_{ref}} = \int f^{eq,*} d\mathbf{c}^* = \int f^* d\mathbf{c}^*, \quad (\text{B.42})$$

$$\rho^* \mathbf{u}^* = \int \xi^* f^{eq,*} d\mathbf{c}^* = \int \xi^* f^* d\mathbf{c}^*, \quad (\text{B.43})$$

$$\rho^* \epsilon^* = \int \frac{1}{2} \mathbf{c}^{*2} f^{eq,*} d\mathbf{c}^* = \int \frac{1}{2} \mathbf{c}^{*2} f^* d\mathbf{c}^*, \quad (\text{B.44})$$

$$\mathbf{P}^* = \int \mathbf{c}^* \mathbf{c}^* f^* d\mathbf{c}^*, \quad (\text{B.45})$$

$$\mathbf{q}^* = \int \frac{1}{2} \mathbf{c}^{*2} \mathbf{c}^* f^* d\mathbf{c}^*, \quad (\text{B.46})$$

onde $c^* = c/\xi_{med}$ é a velocidade de flutuação adimensional. A função distribuição de equilíbrio em sua forma adimensional, utilizada acima, se resumi a

$$f^{eq,*} = \frac{\xi_{med}^{-D}}{n_{ref}} f^{eq} = \rho^* \left(\frac{1}{2\pi T/T_{ref}} \right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{(\xi^* - \mathbf{u}^*)^2}{2T/T_{ref}}}, \quad (\text{B.47})$$

definindo $\Theta = (T/T_{ref}) - 1$ como desvio relativo de temperatura, e substituindo na equação acima

$$f^{eq,*} = \frac{\xi_{med}^{-D}}{n_{ref}} f^{eq} = \rho^* \left(\frac{1}{2\pi(\Theta + 1)} \right)^{\frac{D}{2}} e^{-\frac{(\xi^* - \mathbf{u}^*)^2}{2(\Theta + 1)}}. \quad (\text{B.48})$$

B.10 Equações de Conservação

A integração da Equação B.41 em diferentes ordens de momento, possibilita uma dedução das equações hidrodinâmicas de conservação da massa, da quantidade de movimento e da energia, demonstrando a representação macroscópica da escala mesoscópica pela equação de Boltzmann-BGK.

Definindo uma variável arbitrária \mathcal{I} que multiplica a equação B.41, e integrando ambos os lados por dc^* , tem-se

$$\int \left(\frac{\partial f^*}{\partial t^*} + \xi^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}^*} f^* + \mathbf{g}^* \cdot \nabla_{\xi^*} f^* \right) \mathcal{I} dc^* = - \int \left(\frac{f^* - f^{eq,*}}{\tau^*} \right) \mathcal{I} dc^*. \quad (\text{B.49})$$

Manipulando a Equação B.49, de modo que \mathbf{x}^* e \mathbf{g}^* não dependem de c^* , tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t^*} \int f^* \mathcal{I} dc^* + \nabla_{\mathbf{x}^*} \cdot \left(\int \xi^* f^* \mathcal{I} dc^* \right) - \\ & \int \left[\frac{\partial \mathcal{I}}{\partial t^*} + \xi^* \cdot \nabla_{\mathbf{x}^*} \cdot (\mathcal{I}) + \mathbf{g}^* \cdot \nabla_{\xi^*} \cdot (\mathcal{I}) \right] f^* dc^* = - \int \left(\frac{f^* - f^{eq,*}}{\tau^*} \right) \mathcal{I} dc^*. \end{aligned} \quad (\text{B.50})$$

Fazendo $\mathcal{I} = 1$ na equação B.50, obtém-se equação de conservação da massa

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t^*} + \nabla_{\mathbf{x}^*} \cdot (\rho^* \mathbf{u}^*) = 0, \quad (\text{B.51})$$

fazendo agora $\mathcal{I} = \xi^*$ na equação B.50, obtém-se a equação de conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial \rho^* \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \nabla_{\mathbf{x}^*} \cdot (\rho^* \mathbf{u}^* \mathbf{u}^*) = \nabla_{\mathbf{x}^*} \cdot \mathbf{P}^* + \rho^* \mathbf{g}^*, \quad (\text{B.52})$$

e fazendo agora $\mathcal{I} = \xi^{*2}/2$ na equação B.50 obtém-se a equação de conservação da

energia

$$\frac{\partial}{\partial t^*} \left(\rho^* \epsilon^* + \frac{1}{2} \rho^* \mathbf{u}^{*2} \right) + \nabla \mathbf{x}^* \cdot \left[\mathbf{u}^* \left(\rho^* \epsilon^* + \frac{1}{2} \rho^* \mathbf{u}^{*2} \right) + \mathbf{P}^* \cdot \mathbf{u}^* + \mathbf{q}^* \right] = \rho^* \mathbf{g}^* \cdot \mathbf{u}^*. \quad (\text{B.53})$$

APÊNDICE C – DETALHES DAS SIMULAÇÕES

Neste capítulo são apresentados as relações de escala, testes de malha e outros detalhes relacionados à simulação de cada problema.

C.1 Bolha Estática

C.1.1 Teste de Imiscibilidade

Os fatores de escala utilizados no teste de imiscibilidade são dados na Tabela C.1

Tabela C.1 – Relação de escala aplicada ao teste de imiscibilidade.

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 1[m]$	$dx = 1/80$	$H_e = 80[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3} \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$M = 1 \rightarrow dt = 2,441.10^{-2}$	$\nu_e = 0,15625 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 100 \rightarrow dt = 6,103.10^{-3}$	$\nu_e = 1,953.10^{-2} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 500 \rightarrow dt = 3,814.10^{-4}$	$\nu_e = 2,441.10^{-3} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 1 \rightarrow rel = \frac{dx}{dt} = 0,512$	
	$M = 100 \rightarrow rel = \frac{dx}{dt} = 4,096$	
	$M = 500 \rightarrow rel = \frac{dx}{dt} = 32,768$	

Para os três diferentes casos $M = 1$, $M = 100$ e $M = 500$ as faixas simuláveis de rel , para toda a faixa de G_c analisada, são $0,256 \leq rel \leq 0,512$, $1,024 \leq rel \leq 4,096$ e $24,576 \leq rel \leq 32,728$, respectivamente. Como o custo computacional deste problema é relativamente baixo, os maiores valores de rel simuláveis foram utilizados.

O critério de convergência adotado para as simulações se baseiam na variação da densidade no centro do volume, em um intervalo de 1000 interações com tolerância de 10^{-8} , ou seja

$$\left| \frac{\rho^{it}(H/2, H/2) - \rho^{it+1000}(H/2, H/2)}{\rho^{it+1000}(H/2, H/2)} \right| \leq 10^{-8}, \quad (C.1)$$

onde ρ^{it} é a densidade na interação it .

C.1.2 Tensão Interfacial

Os fatores de escala utilizados no teste de tensão interfacial são dados na Tabela C.2 para variação da razão de viscosidade e na Tabela C.3 para variação da viscosidade.

Tabela C.2 – Relação de escala aplicada ao teste de variação de r_b para obtenção da tensão interfacial.

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 1[m]$	$dx = 1/100$	$H_e = 100[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3} \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$M = 1 \rightarrow rel = \frac{dx}{dt} = 0,512$	$\nu_e = 0,1953 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 100 \rightarrow rel = \frac{dx}{dt} = 4,096$	$\nu_e = 2,441 \cdot 10^{-2} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 500 \rightarrow rel = \frac{dx}{dt} = 32,768$	$\nu_e = 3,051 \cdot 10^{-3} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$

Tabela C.3 – Relação de escala aplicada ao teste de variação de G_c para obtenção das tensões interfaciais.

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 1[m]$	$dx = 1/100$	$H_e = 100[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3} \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$rel = 0,512 \rightarrow dt = 1,953 \cdot 10^{-2}$	$\nu_e = 0,1953 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$rel = 0,256 \rightarrow dt = 3,906 \cdot 10^{-2}$	$\nu_e = 0,3096 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$rel = 0,128 \rightarrow dt = 7,812 \cdot 10^{-2}$	$\nu_e = 0,7812 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$

C.2 Escoamento de Dois Fluidos Paralelos entre Placas Planas

A solução analítica do problema, que pode ser encontrada em Huang, Sukop e Lu (2015b), é dada por

$$\begin{aligned}
 u_1(y) &= A_1 y^2 + C_1, \quad u_2(y) = A_2 y^2 + B_2 y + C_2, \\
 A_1 &= -\frac{G_1}{2\mu_1 L}, \quad A_2 = -\frac{G_2}{2\mu_2 L}, \\
 B_2 &= -A_2 a + 2MA_1 a, \\
 C_1 &= (A_2 - A_1)a^2 - B_2(H - a) - A_2 H^2 \quad \text{e} \quad C_2 = -A_2 H^2 - B_2 H,
 \end{aligned} \tag{C.2}$$

onde a é a altura ocupada pelo fluido 1, $G = \Delta p/(Lw)$ é força atuante em cada fluido, $2H$ é a altura do canal, L é o comprimento do canal e $w = 1$ é espessura do canal. A razão de aspecto do canal igual 1, ou seja $L = 2H$.

O critério de convergência adotado para a simulação se baseia na variação da velocidade no centro do canal, num intervalo de 1000 iterações com tolerância de 10^{-8} , ou seja

$$\left| \frac{\mathbf{u}^{it}(L/2, H) - \mathbf{u}^{it+1000}(L/2, H)}{\mathbf{u}^{it+1000}(L/2, H)} \right| \leq 10^{-8}, \tag{C.3}$$

onde \mathbf{u}^{it} é a velocidade na interação it .

Com base em uma pré-análise do problema, o teste de malha estabelecido na Seção 5.6 é aplicado ao caso crítico $M = 50$. Na etapa inicial do teste é fixado a malha inicial 50×50 ($L = 50[m]^{LB}$ e $H = 25[m]^{LB}$) e dobrado rel de maneira a refinar dt , sendo a velocidade no centro do canal o parâmetro de referência do teste. Como o problema é analiticamente independente do coeficiente G_c o teste de malha será aplicado a toda sua faixa simulável. Na Figura C.1 pode-se observar os resultados obtidos, notando um aumento de $u(L/2, H)$ com o aumento de G_c e o aumento da faixa simulável de G_c com o aumento de rel . Comparando a $u(L/2, H)$ para $G_c = 4$, onde os 4 valores rel são simuláveis, pode-se observar na Tabela C.4 que a variação de $u(L/2, H)$ entre as relações diminui com o aumento de rel , portanto, considerando uma tolerância de 5% tem-se $rel = 16,384$ para aplicação da próxima etapa.

Tabela C.4 – Comparação de $u(L/2, H)$ no refinamento de dt para $G_c = 4$

rel	$u(L/2, b/2)$	Varição $\left(\frac{u(rel) - u(rel/2)}{u(rel)} 100 \right)$
16,384	$2,06 \cdot 10^{-3}$	2,91%
8,192	$2,0 \cdot 10^{-3}$	6,00%
4,096	$1,88 \cdot 10^{-3}$	15,42%
2,048	$1,59 \cdot 10^{-3}$	-

Aplicando agora a segunda etapa do teste, dobra-se a malha e a relação ao mesmo

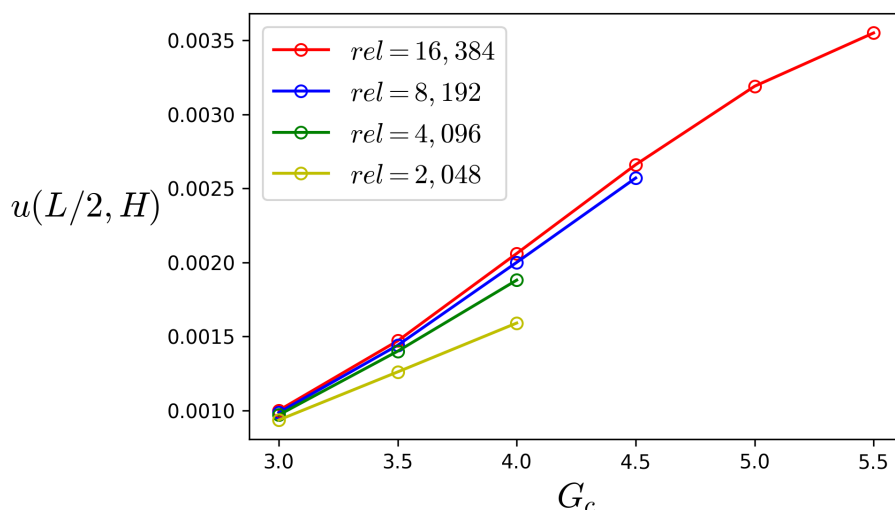


Figura C.1 – Refinamento de dt para malha fixa 50×50 , em toda faixa simulável de G_c .

tempo, de modo a diminuir o erro total associado ao método. Na Figura C.2, assim como no refinamento de dt , pode-se observar o aumento de $u(L/2, H)$ com o aumento do G_c , sendo que, quanto maior é o valor de G_c melhor é controle da interface de interação entre os fluidos. Portanto, comparando as velocidades em $G_c = 5,5$, pode-se observar na Tabela C.5 uma diminuição da variação de $u(L/2, H)$ em relação a malha anterior, portanto, considerando uma tolerância de 2% define-se a malha 200×200 como a malha de referência do problema.

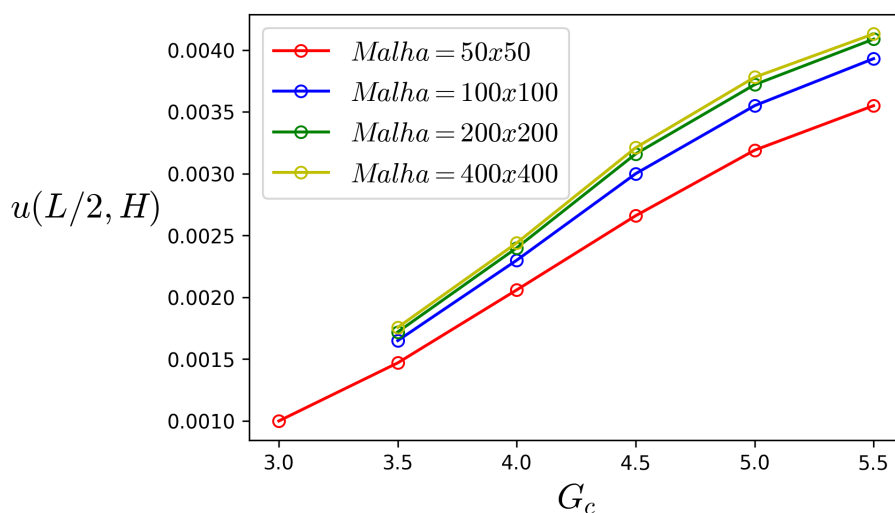


Figura C.2 – Teste de refinamento de dx em toda faixa simulável de G_c .

Os fatores de escala utilizados no escoamento de dois fluidos paralelos entre placas planas são dados na Tabela C.6 para variação da razão de viscosidade.

Tabela C.5 – Comparação de $u(L/2, H)$ para o refinamento dx em $G_c = 5, 5$.

Malha	$u(L/2, b/2)$	Variação $\left(\frac{u(\text{Malha}) - u(\text{Malha}/2)}{u(\text{Malha})} 100 \right)$
400×400	$4,13 \cdot 10^{-3}$	1,21%
200×200	$4,08 \cdot 10^{-3}$	3,67%
100×100	$3,93 \cdot 10^{-3}$	18,82%
50×50	$3,19 \cdot 10^{-3}$	-

Tabela C.6 – Relação de escala aplicada a variação de M no escoamento de dois fluidos paralelos entre placas planas.

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 0,5[m]$	$dx = 0,5/100$	$H_e = 100[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3} \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$M = 100 \rightarrow rel = 131,072$	$\nu_e = 1,525 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 50 \rightarrow rel = 65,536$	$\nu_e = 1,525 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 10, \rightarrow rel = 4,096$	$\nu_e = 0,488 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 5, \rightarrow rel = 2,048$	$\nu_e = 0,488 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 1/5, \rightarrow rel = 2,048$	$\nu_e = 9,765 \cdot 10^{-2} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 1/10, \rightarrow rel = 4,096$	$\nu_e = 4,882 \cdot 10^{-2} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
	$M = 1/50, \rightarrow rel = 8,192$	$\nu_e = 2,441 \cdot 10^{-2} \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$

C.3 Deslocamento de Fluido Imiscível num Canal

Na Tabela C.7 pode-se observar a relação de escala utilizada por Kang, Zhang e Chen (2004).

O teste de malha é aplicado ao caso considerado crítico, devido a maior razão de viscosidade e número de capilaridade ($M = 10, u_{max} = 0,01[m]$ e $Ca = 0,256$), utilizando como referência os parâmetros geométricos adimensionais de comprimento de *finger* L_{finger}/L , largura de *finger* H_{finger}/H e distância de escorregamento L_{des}/L , no tempo de $5000[s]^{LB}$. Na Tabela C.8 pode-se observar os valores obtidos e uma convergência dos parâmetros com o refinamento da malha, a variação é calculada por

$$\text{Variação} = \left| \frac{X(\text{Malha}) - X(\text{Malha}/2)}{X(\text{Malha})} 100 \right| \quad (C.4)$$

Tabela C.7 – Relação de escala aplicada por Kang, Zhang e Chen (2004).

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 0,165[m]$	$dx = 0,165/66$	$H_e = 66[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3} \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$dt = 0,0765$	$\nu_e = 0,3333 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$
$U_{max} = 0,02 \left[\frac{m}{s} \right]$	$rel = 0,198$	$\nu_e = 0,1 \left[\frac{m}{s} \right]^{LB}$
$U_{max} = 0,01 \left[\frac{m}{s} \right]$		$\nu_e = 0,05 \left[\frac{m}{s} \right]^{LB}$
$U_{max} = 0,002 \left[\frac{m}{s} \right]$		$\nu_e = 0,01 \left[\frac{m}{s} \right]^{LB}$

onde X é um dos três parâmetro geométricos adimensionais.

Tabela C.8 – Teste de malha para o caso crítico de deslocamento de fluidos ($M = 10$ e $Ca = 0,256$).

Malha	L_{finger}/L	Variação	H_{finger}/H	Variação	L_{des}/L	Variação
1600×264	0,712	2,38%	0,680	0,59%	0,212	9,01%
800×132	0,695	4,89%	0,676	2,07%	0,232	18,53%
400×66	0,661	16,49%	0,662	5,58%	0,275	34,90%
200×33	0,552	87,50%	0,625	6,00%	0,371	76,81%
100×17	0,069	—	1	—	0,656	—

Considerando, portanto, uma tolerância de 10% na variação dos parâmetro geométricos adimensionais, tem-se como malha de referência 800×132 , em vez de 400×66 como utilizado por Kang, Zhang e Chen (2004).

C.4 Ângulo de Contato Estático

O teste de malha é aplicado considerando a malha inicial $L = 50[m]^{LB}$ e $H = 25[m]^{LB}$, $r_{gq} = 6[m]^{LB}$, $rel = 0,1792$, $G_c = 4$ e $G_{ads} = 0,7$. Na Tabela C.9 pode-se observar os valores obtidos de θ_c , notando-se uma diminuição da variação com o refinamento de dx . Portanto, considerando uma tolerância de 2% tem-se $L = 200[m]^{LB}$ e $H = 100[m]^{LB}$ como malha de referência.

A relação de escala para malha de referência pode ser observada na Tabela C.10.

Tabela C.9 – Teste de malha para o ângulo de contato estático.

Malha	θ_c	$\left(\frac{\theta_c(\text{Malha}) - \theta_c(\text{Malha}/2)}{\theta_c(\text{Malha})}\right)_{100}$
400×200	142,6	1,40%
200×100	140,6	2,70%
100×50	136,8	4,66%
50×25	130,7	–

Tabela C.10 – Relação de escala aplicada a malha de referência 200×100 .

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$L = 1[m]$	$dx = 1/200$	$H_e = 200[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3}\right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3}\right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3} \left[\frac{m^2}{s}\right]$	$rel = 0,7168$	$\nu_e = 0,1423 \left[\frac{m^2}{s}\right]^{LB}$

C.5 Teste 1: Efeito do Número de Capilaridade, Razão de Viscosidade e Molhabilidade

O teste de malha é aplicado considerando a malha inicial de 36×144 . Na Figura C.3 pode-se observar a evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações, para cada malha.

Calculando as variações da média aritmética da eficiência de varredura e da eficiência de varredura constante, pode-se observar na Tabela C.11 os resultados obtidos.

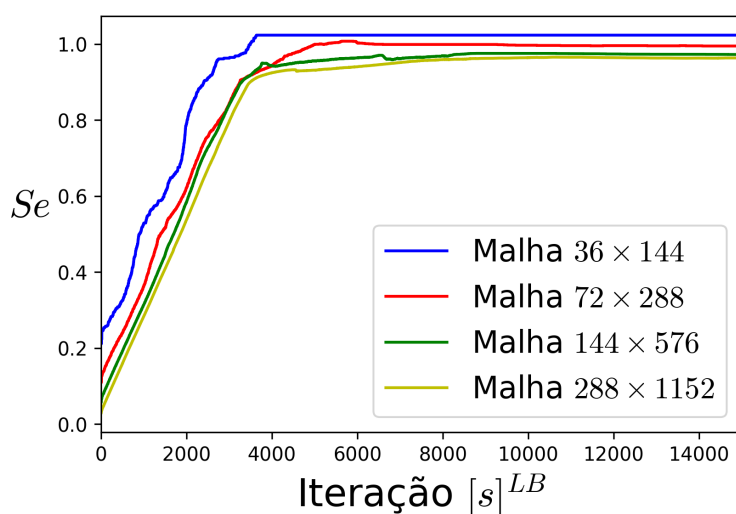


Figura C.3 – Evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para diferentes malhas

Portanto considerando uma tolerância de 2% para as variações da eficiência de varredura tem-se como malha de referência $H = 144[m]^{LB}$ e $L = 576[m]^{LB}$. Na Tabela C.12 pode-se

Tabela C.11 – Comparação da eficiência de varredura.

Malha	Se_{med}	$\left(\frac{Se_{med}(\text{Malha}) - Se_{med}(\text{Malha}/2)}{Se_{med}(\text{Malha})} 100 \right)$
288×1152	0,8529	0,62%
144×576	0,8582	3,56%
72×288	0,8888	6,39%
36×144	0,9456	–
Malha	Se	$\left(\frac{Se(\text{Malha}) - Se(\text{Malha}/2)}{Se(\text{Malha})} 100 \right)$
288×1152	0,9635	0,51%
144×576	0,9685	1,20%
72×288	0,9802	2,01%
36×144	1	–

observar a relação de escala utilizada para a malha de referência.

Tabela C.12 – Relação de escala aplicada a malha de referência 144×576 .

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 1[m]$	$dx = 1/144$	$H_e = 144[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3}/M \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$rel = 1,0285$	$\nu_e = 0,14 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$

C.6 Teste 2: Variação da Porosidade para Primeira e Segunda ordem do Tapete de Sierpinski

O teste de malha é aplicado considerando a malha inicial de 72×288 . Na Figura C.4 pode-se observar a evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para cada malha. Calculando as variações da média aritmética da eficiência de varredura (Se_{med}) e da eficiência de varredura constante (Se), pode-se observar na Tabela C.13 os resultados obtidos.

Portanto considerando uma tolerância de 2% para as variações da eficiência de varredura tem-se como malha de referência $H = 288[m]^{LB}$ e $L = 1152[m]^{LB}$. Na Tabela C.14 pode-se observar a relação de escala utilizada para a malha de referência.

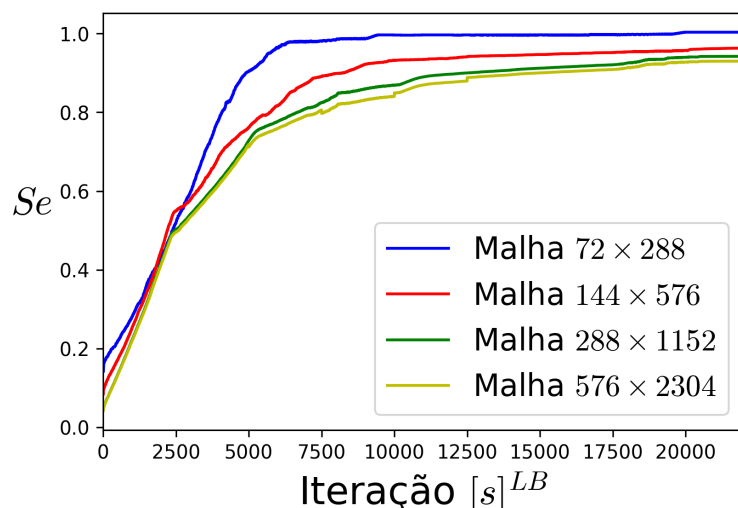


Figura C.4 – Evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para diferentes malhas.

Tabela C.13 – Comparação da eficiência de varredura.

Malha	Se_{med}	$\left(\frac{Se_{med}(\text{Malha}) - Se_{med}(\text{Malha}/2)}{Se_{med}(\text{Malha})} 100 \right)$
576 × 2304	0,7754	1,80%
288 × 1152	0,7894	8,14%
144 × 576	0,8537	6,25%
72 × 288	0,9071	–
Malha	Se	$\left(\frac{Se(\text{Malha}) - Se(\text{Malha}/2)}{Se(\text{Malha})} 100 \right)$
576 × 2304	0,9301	1,32%
288 × 1152	0,9424	2,89%
144 × 576	0,9697	3,12%
72 × 288	1,0	–

Tabela C.14 – Relação de escala aplicada a malha de referência 288 × 1152.

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 1[m]$	$dx = 1/288$	$H_e = 288[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3}/M \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$rel = 2,057$	$\nu_e = 0,14 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$

C.7 Teste 3: Terceira ordem do tapete de Sierpinski

Na Figura C.5 pode-se observar a evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para cada malha. Calculando as variações da média aritmética da eficiência de varredura (Se_{med}) e da eficiência de varredura constante (Se), pode-se observar na Tabela

C.15 os resultados obtidos.

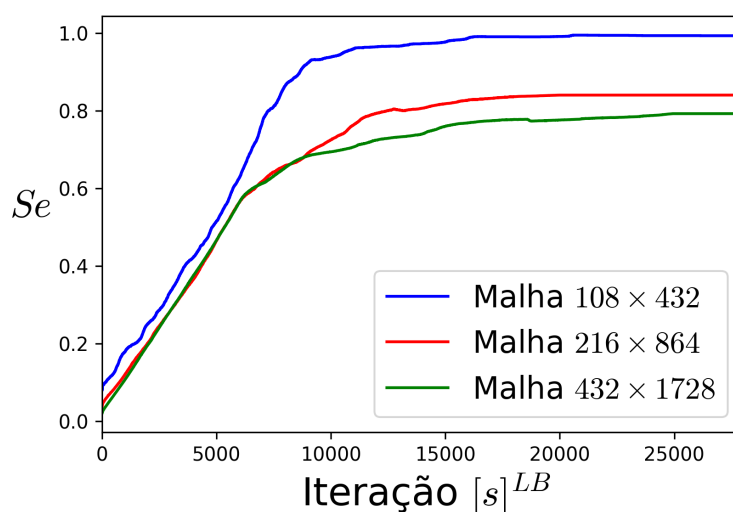


Figura C.5 – Evolução da eficiência de varredura ao decorrer das iterações para diferentes malhas.

Tabela C.15 – Comparação da eficiência de varredura.

Malha	Se_{med}	$\left(\frac{Se_{med}(\text{Malha}) - Se_{med}(\text{Malha}/2)}{Se_{med}(\text{Malha})} 100 \right)$
432 × 1728	0,6459	14,21%
216 × 864	0,7377	19,69%
108 × 432	0,8830	–
Malha	Se	$\left(\frac{Se(\text{Malha}) - Se(\text{Malha}/2)}{Se(\text{Malha})} 100 \right)$
432 × 1728	0,7921	6,03%
216 × 864	0,8399	19,06%
108 × 432	1,0	–

Devido ao custo computacional necessário para simular uma malha 864×3456 , assume-se uma tolerância de 15% para as variações da eficiência de varredura, tendo como malha de referência $H = 432[m]^{LB}$ e $L = 1728[m]^{LB}$. Na Tabela C.16 pode-se observar a relação de escala utilizada para a malha de referência.

Tabela C.16 – Relação de escala aplicada a malha de referência 432×1728 .

Sistema Original	Fator de Escala	Sistema em Escala
$H = 1[m]$	$dx = 1/432$	$H_e = 432[m]^{LB}$
$\rho = 800 \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	$dm = \rho dx^3$	$\rho_e = 1 \left[\frac{kg}{m^3} \right]^{LB}$
$\nu_2 = 10^{-3}/M \left[\frac{m^2}{s} \right]$	$rel = 3,085$	$\nu_e = 0,14 \left[\frac{m^2}{s} \right]^{LB}$