



DETERMINAÇÃO DA PERMEABILIDADE ABSOLUTA UTILIZANDO O MÉTODO DE BOLTZMANN PARA REDES

Daniel Nalin

danielnalin@lmpt.ufsc.br

Rodrigo Surmas

surmas@lmpt.ufsc.br

Carlos Enrique Pico Ortiz

capico@lmpt.ufsc.br

Paulo Cesar Philippi

philippi@lmpt.ufsc.br

LMPT, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC
Trindade, Florianópolis, Santa Catarina
CEP 88040-900, Caixa Postal 476

Resumo: Neste trabalho o método de Boltzmann para redes é utilizado na simulação de escoamentos através de meios porosos. Apresentam-se simulações em geometrias realistas de rochas obtidas através do método de microtomografia. A permeabilidade intrínseca é medida e os resultados são mostrados e comparados com a medida experimental. Os bons resultados obtidos comprovam a eficiência do método em geometrias realistas e complexas apesar da dificuldade na realização de simulações nas mesmas e da necessidade de processamento paralelo.

Palavras-chave: Lattice Boltzmann, permeabilidade absoluta, permeabilidade intrínseca, programação em paralelo, meios porosos.

1. INTRODUÇÃO

A determinação de propriedades de equilíbrio e transporte dos meios porosos é um problema de interesse prático grande, principalmente para engenharia do petróleo. A permeabilidade é uma propriedade física importante de um meio poroso e a sua determinação exata é vital ao projeto e aplicação de esquemas na produção de óleo. Porém, a geometria complexa da estrutura porosa dificulta extremamente a simulação de processos físicos ao nível de poros. O método de Boltzmann para redes (LBM) fornece uma alternativa aos métodos tradicionais, que são baseados na discretização da equação de Navier-Stokes. Este método é baseado na equação de transporte de Boltzmann e é menos sensível a complexidade da geometria porosa dos meios e, além disso, devido a evolução explícita característica do método, seu algoritmo é facilmente paralelizável, característica altamente desejável quando a simulação em meios grandes de geometria complexa é necessária.

2. MÉTODO DE BOLTZMANN PARA REDES

O método de Boltzmann para redes ou *Lattice Boltzmann Method* (LBM) é um método numérico baseado na teoria cinética usado para modelar vários problemas relacionados à dinâmica dos fluidos. Devido ao sucesso do método de Boltzmann para redes em soluções numéricas para escoamentos em geometrias e fluidos complexos este se tornou amplamente utilizado no estudo de escoamentos em meios porosos e escoamentos multifásicos (Succi, 2001).

O LBM surgiu através de aprimoramentos de outro método numérico, o LGA, também conhecido como método booleano, que teve sua origem no artigo de Frisch, Hasslacher e Pomeau, publicado em 1986.

Este método obteve um êxito razoável na simulação de problemas em mecânica dos fluidos, tendo como vantagens principais o baixo custo computacional de se trabalhar com variáveis booleanas, a estabilidade numérica e a versatilidade no tratamento de geometrias complexas devido a simplicidade da sua condição de contorno.

Apesar dos pontos positivos, este método apresentou várias deficiências significativas, ressaltando a dependência da pressão com a velocidade do fluido, a existência de um valor mínimo para a viscosidade, dificultando assim problemas com número de Reynolds elevado, juntamente com a presença de ruídos ou flutuações.

Visando a resolução do problema dos ruídos, foi proposto um método alternativo que simula diretamente a média da ocupação de um sítio. Devido a analogia deste procedimento com a obtenção da equação de Boltzmann a partir das leis da mecânica, este foi chamado de *Lattice Boltzmann Method* (LBM) ou Método de Boltzmann para redes.

A primeira versão do LBM acaba herdando várias características do modelo LGA, tanto positivas, como a estabilidade numérica e a separação das etapas de colisão e propagação, quanto negativas, como a pressão dependente da velocidade e a limitação nos valores da viscosidade. Porém, ao fazer esta transição, perde-se o baixo custo computacional, um dos aspectos mais notáveis do método booleano, que se deve, principalmente, pelo aumento da quantidade de memória pelo uso de valores de ponto flutuante e o aumento do tempo de processamento requerido pela etapa de colisão. Esses fatores tornaram praticamente inviável a aplicação deste LBM para problemas tridimensionais.

A equação que rege a evolução do método de Boltzmann para redes, denominada de equação de Boltzmann (LBE), pode ser escrita como:

$$f_i(x + hc_i, t + \delta) = f_i(x, t) + \delta \Omega_i[f] \quad (1)$$

Nesta equação estão incorporados os processos de colisão e propagação, ambos herdados do LGA. O parâmetro h é a distância entre os sítios adjacentes e δ é o tempo físico durante um passo na simulação. O cálculo do lado direito da equação representa a colisão, de modo que a atribuição do resultado desse cálculo para o lado esquerdo consiste na propagação. O termo $\Omega_i[f]$ é conhecido como operador de colisão, em analogia equação de Boltzmann da teoria cinética.

O operador de colisão sugerido por McNamara e Zanetti consiste em uma média do termo que trata das colisões no LGA, resultando num operador não linear. Por este motivo, a equação ficou conhecida como LBE não linear. Posteriormente, um trabalho apresentado por Higuera e Zanetti, concentrou-se na simplificação deste operador. Os autores chegaram em uma forma simplificada para o operador de colisão,

$$\Omega_i[f] = \sum_{j=0}^b A_{ij} (f_j - f_j^{eq}), \quad (2)$$

onde A_{ij} permanece constante durante a simulação e pode ser determinado a partir do operador de colisão da LBE não linear. A resultante do uso desse operador foi chamada de LBE quase-linear. Mesmo com a permanência de termos não lineares, esta modificação tornou a etapa de colisão mais eficiente, permitindo o uso do LBM em problemas tridimensionais.

Motivados por este operador quase-linear, Chen et al. sugeriram utilizar uma forma diagonal para a matriz A_{ij} , resultando na seguinte forma para o operador de colisão:

$$\Omega_i[f] = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{eq}), \quad (3)$$

onde τ é um parâmetro chamado tempo de relaxação e esta relacionado com a viscosidade cinemática através da Equação 4, que permite controlar os coeficientes de transporte. Esta forma para o operador de colisão já havia sido utilizada por Bhatnagar, Gross e Krook em 1954 visando simplificar a equação de Boltzmann e é conhecido como operador BGK. Por esse motivo a equação resultante do uso desse operador na Equação 1 é conhecida como *Lattice BGK Equation* (LBGK).

$$\nu = RT\left(\tau - \frac{1}{2}\right) \quad (4)$$

Quase simultaneamente, Qian, d'Humières e Lallemand, 1992, contribuíram em notar que a distribuição de equilíbrio utilizada no operador BGK não precisa ser necessariamente aquela herdada do método LGA. Partindo disso, eles sugeriram uma nova forma para a distribuição de equilíbrio¹:

$$f^{eq} = \rho\omega_i \left[1 + 3c_{\alpha i} u_{\alpha}^* + \frac{9}{2}(c_{\alpha i} u_{\alpha}^*)(c_{\beta i} u_{\beta}^*) - \frac{3u_{\alpha}^* u_{\alpha}^*}{2} \right] \quad (5)$$

Através dessa alteração, as redes utilizadas não precisam mais obedecer os requisitos de isotropia do LGA, sendo os pesos ω_i escolhidos de maneira a assegurar a isotropia das equações macroscópicas. A Equação 5 pode ser utilizada com redes unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais. Esta família de redes foi classificada pelo número de velocidades (b) e pela dimensão (d), sendo as redes denotadas por $DdQb$. As principais redes deste grupo podem ser visualizadas na Figura 1. Os valores de ω_i para estas redes são encontradas na Tabela 1.

Tabela 1: Pesos das redes usadas em conjunto com a Equação 5.

Modelo	w_i		
	Repouso	Principais	Diagonais
D1Q3	2/3	1/6	0
D2Q9	4/9	1/9	1/36
D3Q19	1/3	1/18	1/36

Esta nova abordagem trouxe vantagens como a eliminação dos termos que dão origem à ausência da invariância galileana e à dependência da pressão com a velocidade. Estes modelos se tornaram muito utilizados na área de gases em rede, devido principalmente à simplicidade dos mesmos e pelas vantagens citadas anteriormente.

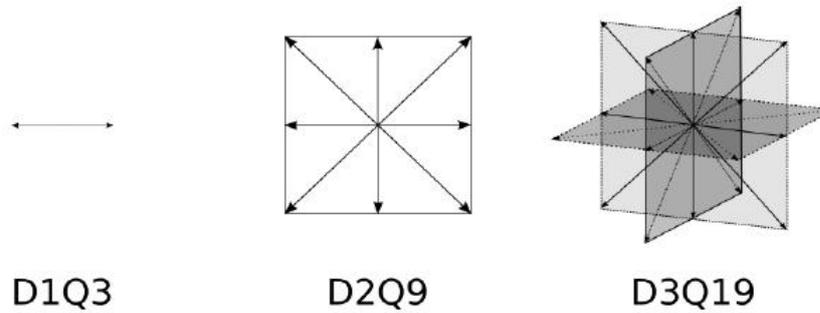


Figura 1: Redes quadradas utilizadas por Qian, d'Humières e Lallemand.

Ludwig Boltzmann ajudou a fundamentar uma das teorias mais importantes da física atual, a teoria cinética dos gases, que tem como objetivo a descrição do comportamento dinâmico dos gases partindo da descrição molecular da matéria e das leis da mecânica. Uma de suas contribuições mais importantes foi a equação que leva seu nome:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f = \Omega[f]. \quad (6)$$

A função $f(\mathbf{x}, \xi, t)$, conhecida como função distribuição, fornece a fração de partículas do fluido por unidade de volume que ocupam a posição \mathbf{x} e que possuem uma velocidade molecular ξ . O termo do lado direito da Equação 6 é conhecido como operador de colisão, já que este considera a interação a curta distância das partículas.

Estes autores demonstraram que alguns modelos que utilizam a equação LBGK, podem ser obtidos através da equação de Boltzmann com um operador de colisão do tipo BGK empregando uma discretização combinada do tempo, posição e espaço de velocidades. O processo é realizado de modo que o espaçamento entre os sítios da rede sejam iguais a multiplicação entre as velocidades discretas e o intervalo de integração δ . A derivação da função de equilíbrio é parte essencial da discretização, e esta é obtida expandindo-se parte da distribuição local de Maxwell-Boltzmann (MB). Para calcular o valor dos pesos é primeiramente escolhida uma rede particular pelo método das abscissas prescritas, e então é imposto que os momentos até segunda ordem sejam recuperados no espaço discreto, ou seja:

$$\sum_{i=0}^b w_i \psi(\xi_i) f_i^{eq} = \int f^{eq} \psi(\xi) d\xi \quad (7)$$

onde $\psi(\xi) = (1, \xi, \xi \xi)$, transformando assim o problema de encontrar as constantes w_i utilizados por Qian, d'Humières e Lallemand, 1992, em um problema de quadratura, Philippi et al. (2006), Shan (2006).

Devido a isso, a LBE pode ser interpretada como uma forma discreta da equação de Boltzmann. Juntamente com essa interpretação, o trabalho de He e Luo criou um caminho novo para obtenção de modelos LBM, através de outras formas de discretização da equação de Boltzmann.

3. DETERMINAÇÃO DA PERMEABILIDADE ABSOLUTA

Para determinar a permeabilidade absoluta em meios porosos tridimensionais, desenvolveu-se um algoritmo usando o método de Boltzmann para redes D3Q19 juntamente com a utilização da lei de Darcy.

A lei de Darcy é uma relação entre o fluxo de um poro médio, a viscosidade do fluido e a queda de pressão sobre uma dada distância.

$$\bar{q} = \frac{-\kappa A}{\mu} \rho \bar{g} \quad (8)$$

Neste caso em particular, calcula-se o fluxo de momentum durante a colisão em cada passo (Shan, 1998) utilizando a média das velocidades anterior e posterior a colisão, e o momento adicional gerado pela força aplicada ao fluido, e aplica-se a seguinte relação proveniente da lei de Darcy:

$$\kappa_i = \frac{M_i \phi \mu}{F_i}, \quad (9)$$

relacionando assim a permeabilidade absoluta na direção i (x,y,z), com o produto entre o somatório do fluxo de momentum M_i em todos os sítios, a porosidade ϕ , a viscosidade μ , divididos pelo somatório do momento adicional causado pela força aplicada em todos os sítios.

Ao utilizarmos condições de contorno periódicas juntamente com bounce back, nos deparamos com a necessidade de espelhar o meio na direção em que desejamos determinar a permeabilidade para mantermos a continuidade do meio poroso. Isso acarretaria ainda mais o problema do tempo de processamento e consumo de memória das simulações, optamos então por utilizar programação paralela e executar as simulações em computadores multi-processados juntamente com a adoção do tempo de relaxação $\tau = 1$, que simplifica a Equação 3 e conseqüentemente a Equação 1, eliminando a divisão e tornando muito mais simples a expressão, diminuindo assim o tempo de processamento, resultando na Equação 10.

$$f_i(x + hc_i, t + \delta) = f_i^{eq} \quad (10)$$

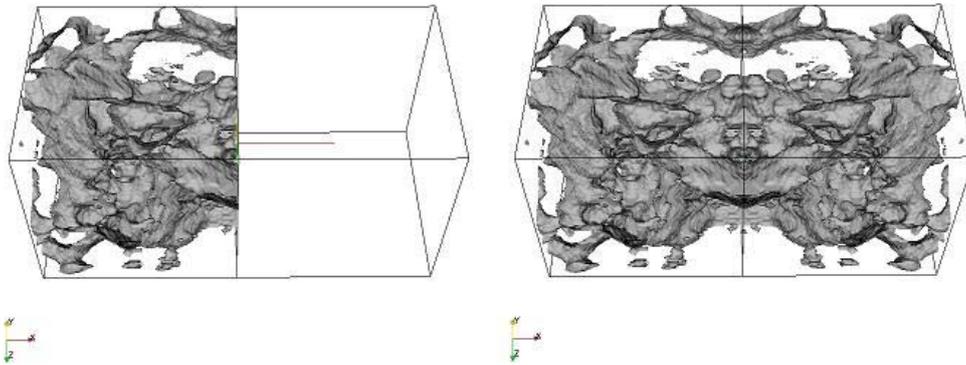


Figura 2: Espelhamento no eixo x para manter a continuidade do meio poroso.

A programação em paralelo consiste numa técnica utilizada para dividir e organizar tarefas entre diversos processadores, otimizando assim o desempenho e velocidade de processamento. Utilizou-se nesse caso C++ como linguagem de programação juntamente com uma biblioteca chamada MPI, a fim de habilitar e efetuar a programação em paralelo. Com essa biblioteca pode-se controlar separadamente todos os processadores, dividindo assim, o processamento entre eles. A MPI também disponibiliza uma série de funções versáteis que tornam fácil a comunicação entre os processadores.

Devido ao fato de somente os sítios de fluido serem colididos e propagados, primeiramente dividiu-se o meio proporcionalmente em relação ao número de sítios de fluido por fatia entre o número de processadores disponíveis de modo a tentar minimizar as diferenças entre os tempos de processamento, diminuindo assim a espera de um processador em relação ao outro durante a colisão para efetuar a propagação, ou seja, a troca de dados entre os processadores.

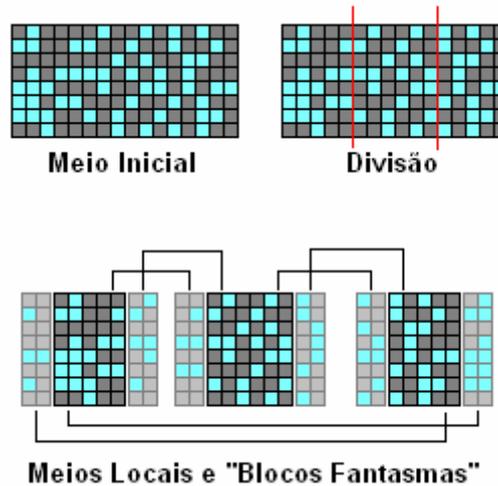


Figura 3: Exemplo de divisão de meio e criação de “blocos fantasmas” nos meios locais.

Para facilitar o processo de propagação foram criados “blocos fantasmas” em cada processador. Estes blocos, que ficam à direita e à esquerda do meio local de cada processador, têm por objetivo fazer a propagação dos sítios das “bordas” esquerda e direita do meio local sem haver necessidade de comunicação entre os processadores durante este processo. Após a propagação ocorrer nas bordas, os “blocos fantasmas” são enviados para os processadores vizinhos, e incorporados aos sítios de destino reais. Devido ao fato da troca de informações retardar o processamento geral da simulação, optamos por propagar os sítios das bordas antes dos demais sítios, enviando os “blocos fantasmas” durante o processo de propagação dos outros sítios, obtendo assim uma redução muito significativa no tempo de processamento, isso foi possível através de funções especiais da biblioteca MPI que permitem enviar e receber dados sem interromper o processamento.

4. RESULTADOS

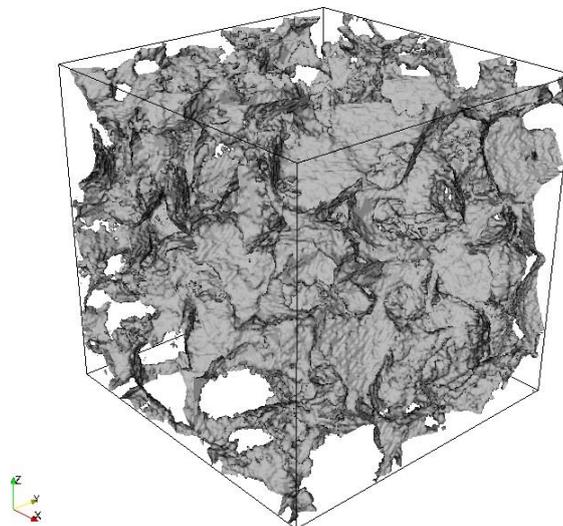


Figura 4: Meio poroso obtido através de microtomografias digitalizadas.

Várias simulações foram efetuadas para calcular a permeabilidade absoluta das rochas brasileiras. Estas foram iniciadas com duas representações tri-dimensionais de uma estrutura porosa, obtida através de microtomografias digitalizadas. Uma reconstrução típica pode ser visualizada na Figura 4. As Tabelas 2 e a Tabela 3 fornecem os resultados das simulações e comparam com o resultado experimental fornecido pela Petrobras/CENPES, que também forneceram as imagens digitais utilizadas para reconstruir o meio. As simulações foram feitas com diferentes números de sítios (diferentes tamanhos de meio foram retirados à partir da mesma origem) para verificarmos a influência da modificação do tamanho meio nos resultados, e com duas microtomografias, uma com espaço entre sítios de 3.81 μ m e outra com 11 μ m.

Tabela 2: Rocha reconstituída – 11 μ m ($\kappa_{\text{experimental}} = 5000\text{mD}$).

Sítios	Permeabilidade Absoluta (mD)					Erro
	X	Y	Z	Média	Desvio Padrão	
400 ³	3715	4144	3678	3846	6.74%	23.08%
200 ³	3760	4162	4346	4089	7.34%	18.22%

Tabela 3: Rocha reconstituída - 3.81 μ m ($\kappa_{\text{experimental}} = 5000\text{mD}$).

Sítios	Permeabilidade Absoluta (mD)					Erro
	X	Y	Z	Média	Desvio Padrão	
150 ³	4597	5041	3961	4533	11.97%	9.34%
120 ³	4823	5785	4274	4961	15.42%	0.78%
100 ³	4051	4020	4817	4296	10.51%	14.08%
80 ³	4520	3917	4223	4220	7.14%	15.6%
60 ³	6613	5634	5563	5937	9.89%	18.74%

A comparação com o resultado experimental demonstra excelente determinação da permeabilidade absoluta considerando a dificuldade envolvida no processo de reconstrução e simulação dos fluidos nas imagens reconstruídas além da falta de representatividade do meio. Os resultados que apresentam maior proporção de erro em relação ao valor experimental são, provavelmente, conseqüências da descaracterização do meio dependendo do tamanho do sítio.

5. CONCLUSÕES

Mesmo com as dificuldades encontradas para simulações em fluidos nas imagens reconstruídas juntamente com possível falta de representatividade do meio obtivemos excelentes resultados na determinação da permeabilidade relativa nessas simulações, comprovando assim a eficiência, confiabilidade e versatilidade do método utilizado.

6. AGRADECIMENTOS

O autor gostaria de agradecer a CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos), ANP (Agência Nacional do Petróleo).

7. REFERÊNCIAS

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, n. 3, p. 511–525, May 1954.

- CHEN, S. et al. Lattice boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 67, n. 27, p. 3776–3779, Dec 1991.
- 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, n. 6, p. 6811–6817, Dec 1997.
- HIGUERA, F.; ZANETTI, G. Boltzmann approach to lattice gas simulations. Europhys. Lett., v. 9, n. 663, 1989.
- MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 61, n. 20, p. 2332–2335, Nov 1988.
- Paulo C. Philippi et al. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. PHYSICAL REVIEW E 73, 056702 2006.
- QIAN, Y. H.; D'HUMIERES, D.; LALLEMAND, P. Lattice bkg models for navier-stokes equation. Europhys. Lett., v. 17, n. 6, p. 479–484, jan. 1992.

PREDICTION OF THE PERMEABILITY USING THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

Daniel Nalin

danielnalin@lmpt.ufsc.br

Rodrigo Surmas

surmas@lmpt.ufsc.br

Carlos Enrique Pico Ortiz

capico@lmpt.ufsc.br

Paulo Cesar Philippi

philippi@lmpt.ufsc.br

LMPT, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC
Trindade, Florianópolis, Santa Catarina
CEP 88040-900, Caixa Postal 476

Abstract: *In this work, the Lattice Boltzmann method is used to simulate flows through porous media. Here are presented simulations through realistic geometries obtained by microtomography. The absolute permeability is measured then the results are showed and compared with experimental data. The excellent results proves the efficiency of the method in realistic and complex geometries although the difficulty in the accomplishment of simulation in them and of the necessity of parallel processing.*

Keywords: *Lattice Boltzmann, absolut permeability, intrinsic permeability, parallel programming, porous media.*