

**SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS BIFÁSICOS EM ESTRUTURAS
POROSAS UTILIZANDO MODELOS DE GÁS EM REDE****Fabiano Gilberto Wolf**

Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC
Departamento de Engenharia Mecânica
Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas – LMPT
Trindade - Florianópolis/SC - 88040-900 - Brasil
fabiano@lmpt.ufsc.br

Luís Orlando Emerich dos Santos

Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC
Departamento de Engenharia Mecânica
Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas – LMPT
Trindade - Florianópolis/SC - 88040-900 - Brasil
emerich@lmpt.ufsc.br

Paulo César Philippi

Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC
Departamento de Engenharia Mecânica
Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas – LMPT
Trindade - Florianópolis/SC - 88040-900 - Brasil
philippi@lmpt.ufsc.br

Resumo. O Modelo de Gás em Rede Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) foi utilizado para a análise da dinâmica de deslocamentos imiscíveis bifásicos em geometrias porosas simplificadas bidimensionais. A lei de Young-Laplace foi verificada a partir da configuração das fases em capilares após a configuração de equilíbrio mecânico ser alcançada. A dinâmica do processo de molhamento é analisada considerando o espalhamento de uma gota líquida em contato com uma superfície sólida plana. A ascensão capilar com influência da gravidade é simulada em um capilar bidimensional. Configurações geométricas simplificadas são usadas para estudar problemas de aprisionamento em mecanismos de embebição e drenagem, e comparados com resultados experimentais. Os resultados obtidos, aparentemente, confirmam a viabilidade do modelo MLGA na análise dinâmica de processos de deslocamento imiscível em estruturas porosas bidimensionais.

Palavras chave: Deslocamento Imiscível, escoamentos Bifásicos, Modelos de Gás em Rede, Meios Porosos.

1. Introdução

O deslocamento imiscível de uma fase por outra em uma estrutura porosa é conhecido ser influenciado por forças capilares e viscosas. Essa influência está relacionada com as condições de contorno impostas ao escoamento de ambas as fases, além de outros fatores, como a variabilidade espacial da geometria porosa, as propriedades físicas e químicas das fases e as interações fluido-sólido. Quando a análise dos processos de deslocamento ocorre em uma escala mesoscópica ou microscópica (ao nível de poro), diversos mecanismos físicos podem ser observados, dentre os quais: deslocamentos tipo pistão, deslocamento de bolhas, diferentes dinâmicas de molhamento, a ruptura de interfaces frente a regiões sólidas, a coalescência de bolhas e de filmes finos precursores. Uma análise detalhada de tais fenômenos pode fornecer um melhor entendimento dos mecanismos de aprisionamento que ocorrem em meios porosos e resultar em informações importantes em relação ao escoamento numa escala macroscópica.

Visando o melhor entendimento de processos imiscíveis que ocorrem em escala de poro, utiliza-se nesse trabalho um modelo de gás em rede (Frisch et al., 1986) para escoamentos imiscíveis em meios porosos, chamado Modelo de Gás em Rede Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) (Santos & Philippi, 2002). Os problemas investigados são clássicos na literatura e visam verificar a viabilidade do modelo MLGA para a simulação de escoamentos bifásicos em geometrias porosas bidimensionais.

2. Modelos de Gás em Rede

Modelos de gás em rede (LGA) são compostos basicamente de partículas que podem ser encontradas somente nos vértices de uma rede discreta. As partículas podem mover-se na rede saltando de um sítio para outro sítio vizinho num passo de tempo. Como o espaço percorrido pela partícula e o tempo necessário para percorrer esse espaço são discretos,

tem-se um conjunto discreto de velocidades. Todos os modelos de gás em rede apresentam em um passo de evolução no tempo, duas etapas: colisão e propagação. Na etapa de colisão, as partículas interagem entre si trocando quantidade de movimento, o que altera suas velocidades. Após a colisão, as partículas passam pela etapa de propagação, a qual visa conduzi-las para os sítios vizinhos de acordo com o sentido de suas velocidades. As regras de colisão são específicas de cada modelo e rede utilizada, mas todos esses modelos têm em comum a conservação da quantidade de movimento total e do número de partículas no sítio.

2.1. Modelo FHP

O modelo de gás em rede FHP foi introduzido inicialmente por Frisch, Hasslacher e Pomeau (FHP) (1986) e é baseado em uma rede discreta hexagonal com seis direções. Na evolução dos estados dos sítios da rede, as partículas colidem entre si e são propagadas para os sítios vizinhos mais próximos, sempre conservando massa e quantidade de movimento total. As partículas respeitam um princípio de exclusão, o qual permite somente uma partícula em cada direção. Dependendo do modelo de interesse, podem existir tanto partículas com velocidade unitária quanto partículas em repouso presentes nos vértices da rede. As partículas em repouso participam juntamente com partículas em movimento nas etapas colisionais. O modelo FHP possui o tensor viscosidade isotrópico (Frisch et al., 1986), e conseqüentemente pode ser utilizado para simulação de escoamentos de fluidos que seguem a equação de Navier-Stokes. A figura (1) ilustra as etapas de colisão e propagação em uma rede hexagonal.

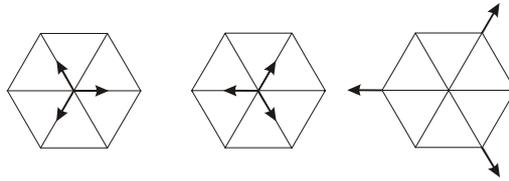


Figura 1 – Etapas de colisão e propagação de três partículas para um modelo LGA em uma rede hexagonal. Na figura são mostrados os estados: inicial, posterior à colisão e posterior à propagação, da esquerda para a direita, respectivamente.

2.2. Equações Microscópicas

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

Com essas definições, é possível descrever a dinâmica das partículas ilustrada na figura (1), usando a seguinte equação

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

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

$$\omega_i[\mathbf{n}(\mathbf{X}, T)] = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1-s_j} \quad (2)$$

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

2.3. Equações Macroscópicas

Como objetivo principal é a obtenção de equações macroscópicas que representem o comportamento médio das quantidades conservadas, o detalhamento microscópico descrito pela equação (1) não é necessário. Desse modo, pode-se manipular apenas os valores médios de n_i . Tomando a média populacional (“ensemble averaging”) da equação (1), obtêm-se

$$N_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) = N_i(\mathbf{X}, T) + \Omega_i[\mathbf{N}(\mathbf{X}, T)] \quad (3)$$

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

$$\Omega_i[\mathbf{N}(\mathbf{X}, T)] = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') (s'_i - s_i) \prod_{j=1}^b N_j^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} \quad (4)$$

sendo $\Omega_i = \langle \omega_i \rangle$ e $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = \langle \alpha(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') \rangle$. Note que $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$ é a média dos elementos das matrizes de transição, e representa a probabilidade de evolução do estado \mathbf{s} para \mathbf{s}' . Juntamente com o conceito de probabilidade de evolução, introduz-se o conceito de balanço semi-detalhado para modelos de gás em rede, dado por

$$\sum_{\mathbf{s}} A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = 1 \Rightarrow \forall \mathbf{s}'. \quad (5)$$

Localmente, tem-se que a densidade ρ e a quantidade de movimento $\rho \mathbf{u}$ podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \sum_i N_i &= \rho \\ \sum_i N_i \mathbf{c}_i &= \rho \mathbf{u}. \end{aligned} \quad (6)$$

Utilizando as definições (6) e o balanço semi-detalhado (5), os N_i 's podem ser calculados em equilíbrio termodinâmico, o que resulta é uma distribuição de Fermi-Dirac, dada por

$$N_i = \frac{1}{1 + e^{h(\rho, \mathbf{u}) + q(\rho, \mathbf{u}) \cdot \mathbf{c}_i}}. \quad (7)$$

onde as constantes $h(\rho, \mathbf{u})$ e $q(\rho, \mathbf{u})$ podem ser expandidas em séries de Taylor em torno de $\mathbf{u} = 0$. O resultado pode ser utilizado para calcular a massa e quantidade de movimento para as primeiras ordens nos gradientes macroscópicos. Os termos de segunda ordem nos gradientes (termos viscosos) podem ser obtidos a partir do método de expansão de Chapman-Enskog (Chapman & Cowling, 1952; Frisch et al., 1986; Wolfram, 1986), o qual permite a obtenção do seguinte conjunto de equações:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho v_\alpha) = 0 \quad (8)$$

$$\partial_t \rho v_\beta + \partial_\alpha [\rho g(\rho) v_\beta v_\alpha] = \partial_\alpha [\mu (\partial_\alpha \rho v_\beta + \partial_\beta \rho v_\alpha)] + \partial_\beta (\kappa \partial_\alpha \rho v_\alpha) - \partial_\beta P \quad (9)$$

onde $P = c_s^2 \rho$, c_s , μ e κ são a pressão, a velocidade do som na rede, a viscosidade dinâmica e a viscosidade expansional. O parâmetro $g(\rho)$ é um efeito de rede que pode ser eliminado com uma troca de variáveis (Frisch et al., 1986).

3. Modelo de Gás em Rede para Escoamento Imiscível

Nesta seção, descreve-se o modelo de gás em rede booleano com *mediadores de campo* (MLGA) introduzido por Santos & Philippi (2002) para simulação de escoamentos bifásicos. O modelo utiliza o conceito de *mediadores*, como sendo “partículas” responsáveis pelo transporte das informações de campo relacionadas à distribuição de fases distintas na rede. Dessa forma, os mediadores atuam como “partículas” (sem massa) que conduzem a informação de concentração de determinadas fases em regiões do domínio, de modo que tais informações possam estar disponíveis localmente sem a necessidade de consulta aos sítios vizinhos.

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

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

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

$$\begin{aligned} r_i'(\mathbf{X}, T) &= r_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i[\mathbf{r}(\mathbf{X}, T)] \\ b_i'(\mathbf{X}, T) &= b_i(\mathbf{X}, T) + \omega_i[\mathbf{b}(\mathbf{X}, T)] \end{aligned} \quad (10)$$

(ii) *Colisão entre partículas de cores distintas*: Nesta etapa partículas azuis e vermelhas trocam de velocidade, conservando o número de partículas de cada cor e a quantidade de movimento total do sítio. Uma maneira eficiente de realizar esta etapa, é fazer a troca entre partículas azuis e vermelhas sem alterar a soma total $\mathbf{r}_i + \mathbf{b}_i$ em cada direção, o que conserva a quantidade de movimento total do sítio.

(iii) *Etapa de interferência dos mediadores*: Esta etapa é responsável pela separação entre as partículas de cores diferentes. Os mediadores não interferem entre si e atuam somente em partículas da mesma cor. Assim, quando um mediador encontra uma partícula de mesma cor na direção i , este interage (caso não haja nenhuma partícula de mesma cor em $-i$) com a mesma mudando a direção de sua velocidade para a direção $-i$. Na figura (2) é apresentado um exemplo do processo de interferência entre os mediadores e as partículas.

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

$$\begin{aligned} r_i''(\mathbf{X}, T) &= r_i'(\mathbf{X}, T) + \xi_i(\mathbf{r}', \mathbf{m}^r) \\ b_i''(\mathbf{X}, T) &= b_i'(\mathbf{X}, T) + \xi_i(\mathbf{b}', \mathbf{m}^b) \end{aligned} \quad (11)$$

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

$$\xi_i(\mathbf{m}^r, \mathbf{r}) = m_{-i}^r(1 - m_i^r)(1 - r_{-i})r_{-i} - m_i^r(1 - m_{-i}^r)(1 - r_{-i})r_i. \quad (12)$$

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

$$\begin{aligned} \sum_i r_i(\mathbf{X}, T) > \sum_i b_i(\mathbf{X}, T) &\Rightarrow m_i^r(\mathbf{X}, T) = 1 \\ \sum_i r_i(\mathbf{X}, T) < \sum_i b_i(\mathbf{X}, T) &\Rightarrow m_i^b(\mathbf{X}, T) = 1. \end{aligned} \quad (13)$$

A fim de controlar a *distância de interação* entre as partículas, introduz-se o parâmetro de probabilidade de aniquilação P_{anig} , o qual determina o instante da aniquilação dos mediadores de uma determinada cor.

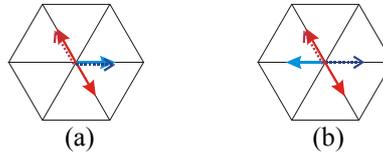


Figura 2 – Processo de interferência entre os mediadores e as partículas no modelo MLGA. Os mediadores são representados como setas pontilhadas. Em (a), é mostrado o estado do sítio anterior à interferência dos mediadores e em (b), o estado do sítio posterior à interferência dos mediadores.

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

$$\begin{aligned} r_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= r_i''(\mathbf{X}, T) \\ b_i(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= b_i''(\mathbf{X}, T) \end{aligned} \quad (14)$$

e para os mediadores,

$$\begin{aligned} m_i^r(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= m_i^r(\mathbf{X}, T) \\ m_i^b(\mathbf{X} + \mathbf{c}_i, T + 1) &= m_i^b(\mathbf{X}, T). \end{aligned} \quad (15)$$

4. Processos de Deslocamento Imiscível

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

Durante o deslocamento imiscível, podem existir dois ou mais fluidos escoando simultaneamente em um meio poroso, sendo um desses fluidos responsável pela movimentação dos outros. Tal processo é controlado e influenciado por uma série de fatores, alguns deles já mencionadas anteriormente. Entre esses fatores, o número capilar Ca e a razão de mobilidade M têm a maior importância. O número capilar dimensiona a relação entre forças viscosas e capilares, e é definido como,

$$Ca = \frac{\bar{v}\mu}{\sigma} \quad (16)$$

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

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

Antes de prosseguir, introduz-se a terminologia freqüentemente utilizada na literatura. Em um processo de *drenagem*, uma fase não-molhante desloca uma fase molhante através do meio poroso, enquanto que num processo de *embebição*, uma fase molhante desloca uma fase não-molhante.

4.1. Molhabilidade

Num sentido mais amplo, a interação sólido-fluido é chamada de molhabilidade. Tal interação tem um papel muito importante no escoamento de dois fluidos imiscíveis em um meio poroso, pois pode influenciar fortemente o processo de deslocamento com um todo (escala macroscópica).

Considere, como exemplo, uma situação na qual uma gota de água é colocada em uma superfície imersa em óleo. O ângulo de contato formado pode variar de 0° e 180° . Uma situação típica é mostrada na figura (3), onde são mostradas as três diferentes tensões interfaciais existentes que estão relacionadas pela equação de Young-Dupré

$$\sigma_{ow} \cos \theta = \sigma_{os} - \sigma_{ws} \quad (17)$$

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

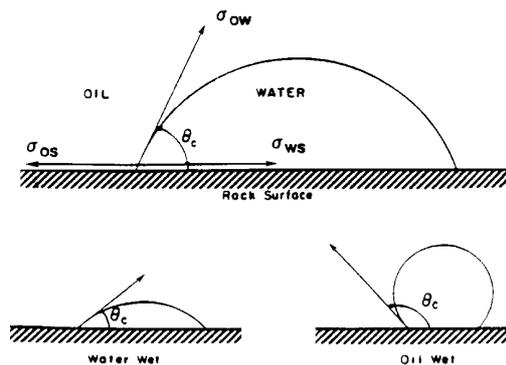


Figura 3 – Formação do ângulo de contato entre uma superfície sólida e um líquido (Anderson, 1986).

4.2. Pressão Capilar

Quando dois fluidos estão em contato e confinados em uma estrutura porosa, uma descontinuidade na pressão existe através da interface que separa ambos os fluidos. A magnitude dessa diferença depende da curvatura da interface em determinado ponto (região do espaço poroso). Essa diferença de pressão através da interface é conhecida como pressão capilar P_c , e é definida como $P_c = P_{nw} - P_w$, onde P_{nw} é a pressão na fase não-molhante e P_w é a pressão na fase molhante.

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

$$P_{mw} - P_w = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (18)$$

Observando a equação acima, pode-se interpretar a pressão capilar P_c como uma medida da tendência de um meio poroso absorver um fluido molhante ou repelir um fluido não-molhante (Bear, 1972). Dessa forma, a equação de Young-Laplace torna possível a descrição de fenômenos capilares encontrados em meios porosos.

4.3. Equações Macroscópicas

Em problemas práticos, a equação de Darcy para escoamento monofásico em meios porosos é generalizada para o caso bifásico, onde se assume que cada fase tende a escoar por determinados caminhos isolados. Para o caso de escoamento bifásico em condições de regime permanente, as equações de Darcy para ambas as fases, têm sido escritas na forma

$$\mathbf{J}_i = -\frac{k_i}{\mu_i} (\nabla P_i - \rho_i \mathbf{g}) \quad (19)$$

onde \mathbf{J}_i , μ_i e k_i são a vazão, a viscosidade e a permeabilidade efetiva, onde i denota as fases 1 e 2. O termo $(\nabla P_i - \rho_i \mathbf{g})$ representa a força na fase i devido aos gradientes de pressão e a gravidade. A permeabilidade efetiva k_i é comumente escrita como $k_i = k_{ri} k$, onde k é a permeabilidade absoluta do meio poroso e k_{ri} é a permeabilidade relativa à fase i .

5. Resultados e Discussão

Nesta seção, serão mostrados os resultados obtidos utilizando o modelo MLGA (Santos & Philippi, 2002) em uma rede FCHC (d’Humières et al., 1986) ($c_s \approx 0.707$) com 24 direções projetadas em 2D. Como o objetivo principal é verificar a validade do modelo perante diferentes estruturas porosas e condições de contorno, foram utilizadas diversas formas de geometrias simplificadas. Entre as simulações realizadas encontram-se: verificação da linearidade da lei de Young-Laplace para capilares, dinâmica de molhamento em superfícies sólidas, invasão capilar com influência da gravidade, processos de drenagem e embebição em diferentes configurações geométricas de poros. As simulações foram conduzidas utilizando a distância de interação de ~ 4 unidades de rede.

5.1. Verificação da Lei de Young-Laplace

Com o objetivo de verificar a proporcionalidade $\Delta P \propto 1/R$ foram realizadas diversas simulações com o modelo MLGA. As simulações tiveram como base, o processo de invasão de um capilar 2D sob ação somente de forças capilares. O procedimento adotado consistiu da simulação da invasão de um capilar que separa duas câmaras contendo dois fluidos diferentes, um deles molhante e o outro, não-molhante. A diferença de pressão ΔP requerida é aquela cuja interface encontra-se aproximadamente em repouso para um dado raio R . Assim, as simulações foram realizadas mantendo-se a pressão constante somente na fase molhante, de modo que esta “empurre” o máximo possível a fase não-molhante através do capilar. Depois de atingida a configuração de equilíbrio, tem-se a diferença de pressão na interface. Os resultados obtidos para diferentes raios são mostrados na figura (4).

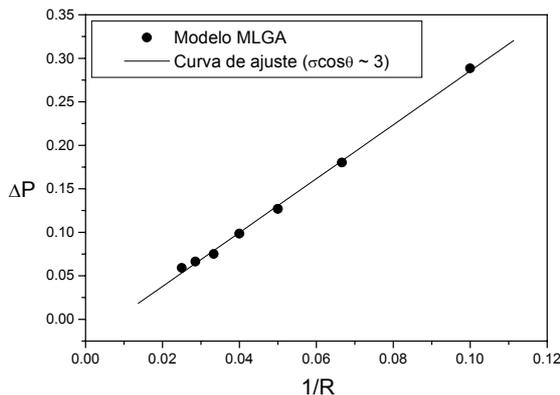


Figura 4 – Curva $\Delta P \times 1/R$ obtida através do modelo MLGA. Os círculos representam os pontos obtidos com média temporal de 30000 passos. A tensão interfacial σ é ~ 3.5 (unidades de rede) para um ângulo de contato de $\sim 30^\circ$.

Como pode ser observado na figura (4), o modelo MLGA recupera a linearidade da lei de Young-Laplace. Isso demonstra que o modelo pode oferecer bons resultados na simulação de fenômenos de interface, assim como na simulação de processos de deslocamento imiscível.

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

5.2. Dinâmica de Molhamento

A fim de simular diferentes molhabilidades, utiliza-se a emissão de mediadores de uma determinada cor pelas paredes sólidas. Dessa forma, pode-se controlar a probabilidade de emissão dos mediadores de cada fase de acordo com a molhabilidade desejada. Portanto, quanto maior a probabilidade de emissão para uma dada fase, maior será a sua molhabilidade.

É interessante notar que as paredes emitem mediadores de ambas as fases, mas dependendo do caso, as probabilidades podem ser diferentes.

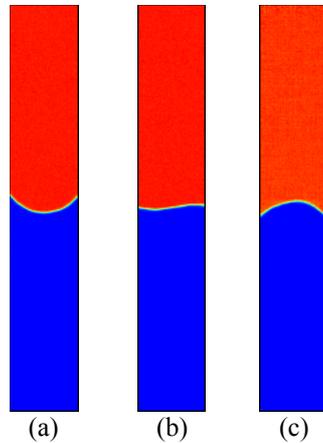


Figura 5 – Simulação de diferentes configurações de molhabilidade utilizando o modelo MLGA em uma rede 50x300. Em (a), a fase azul é molhante, em (b), a parede não tem preferência por nenhuma das fases e em (c), a fase azul é não-molhante. Cada campo de densidades foi obtido com média temporal de 500 passos.

A figura (5) ilustra o efeito da emissão de mediadores de cada fase pelas paredes de um capilar 2D. Quando a probabilidade de emissão é de 90% para a fase azul e 10% para a fase vermelha, a fase azul molha o capilar, (a); para a probabilidade de 50% para ambas as fases, uma interface plana é obtida, (b); e para a probabilidade de 10% para a fase azul e 90% para a fase vermelha, a fase azul é não-molhante, (c).

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

$$X(T) \sim T^{\frac{1}{10}} \quad (20)$$

para situações tridimensionais, e

$$X(T) \sim T^{\frac{1}{7}} \quad (21)$$

para o caso bidimensional, onde T é o tempo.

Com o objetivo de verificar a proporcionalidade dada na equação (21) para o modelo em questão, simula-se a dinâmica de molhamento em superfícies sólidas. Como condição inicial, uma gota de uma fase molhante (azul) é colocada em contato com uma superfície sólida idealmente plana.

Devido à probabilidade de emissão de mediadores azuis pela parede ser 85%, a parede exerce uma força de atração sobre as partículas azuis, fazendo com que estas se espalhem ao longo da superfície, como mostrado na figura (6).

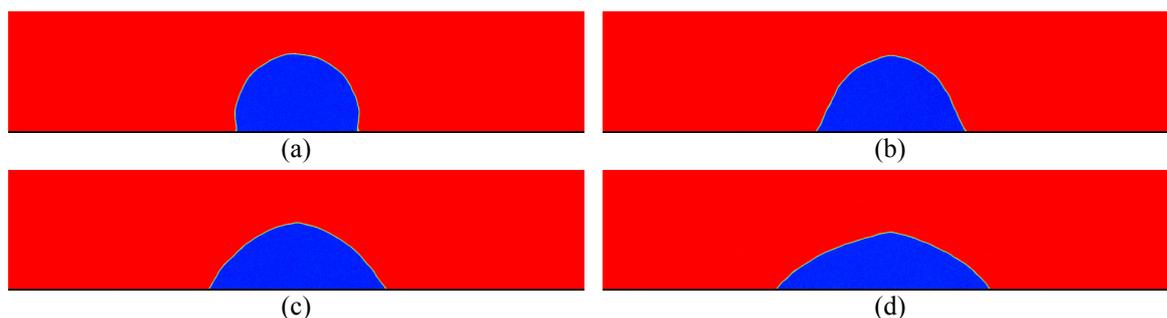


Figura 6 – Evolução dinâmica de molhamento simulada utilizando o modelo MLGA em uma rede 950x200. As imagens (a), (b), (c) e (d) correspondem a 500, 6000, 28000 e 93000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 500 passos.

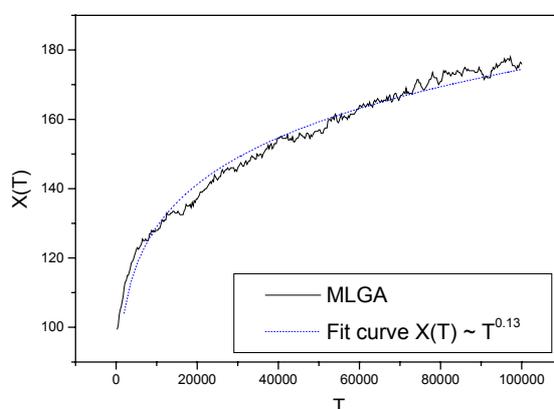


Figura 7 – Resultados obtidos para o deslocamento $X(T)$ da camada de fluido molhante mais próxima à superfície sólida. Na figura é mostrado o comportamento $X(T)$ simulado e a curva de ajuste na forma $X(T) \sim T^{0.13}$.

Os resultados obtidos para o deslocamento $X(T)$ são mostrados nas figuras 6 e 7. Como pode ser observado, o modelo MLGA recupera o comportamento de $X(T)$ com a potência 0.13 com o tempo, mostrando uma boa concordância com os resultados experimentais.

5.3. Ascensão Capilar

Nessa seção, simula-se o processo de invasão capilar influenciado pela gravidade. O sistema físico escolhido é composto pelas fases água e ar, onde a água é a fase invasora (molhante) e o ar a fase deslocada (não-molhante). Sendo o ar um fluido de baixa viscosidade, este aproximadamente não apresenta resistência viscosa no deslocamento. Esse comportamento relativo à fase deslocada, deve ser recuperado nas simulações. Para isso, adota-se o procedimento de simular ambas as fases com a mesma viscosidade dinâmica de ~ 1.73 (unidades de rede), mas com o regime de escoamento dado pelo número capilar $Ca \sim 10^{-3}$. Nesse regime, as forças capilares são completamente dominantes sobre as forças viscosas, de modo que a resistência viscosa encontrada na fase deslocada é desprezível em relação à força capilar motora do escoamento.

O procedimento adotado consistiu da simulação da invasão de um capilar que separa duas câmaras contendo dois fluidos diferentes, estando presentes tanto forças capilares quanto forças gravitacionais. O fluido vermelho, sendo molhante, está inicialmente ocupando a câmara inferior, enquanto o fluido azul, sendo não-molhante, ocupa o capilar e a câmara superior. A fim de imitar a força da gravidade, utiliza-se a condição de imposição de gravidade, a qual adiciona quantidade de movimento a cada sítio por passo de tempo em uma direção preferencial. A magnitude dessa força aplicada é de $\sim 10^{-4}$. Além disso, para garantir que é simulada a mesma dinâmica do sistema físico, considera-se o mesmo regime de escoamento em relação à ponderação entre forças gravitacionais e forças capilares, dada pelo número de Bond B , $B = \Delta\rho g R^2 / \sigma$, onde $\Delta\rho$, σ , g e R são a diferença de densidade, a tensão interfacial, a aceleração da gravidade e o raio do capilar. No caso em questão, utiliza-se $B \sim 0.06$.

Como o intuito principal foi verificar a dinâmica da ascensão capilar em função do tempo, a interface entre as fases foi acompanhada até a obtenção aproximada do equilíbrio (após ~ 800000 passos de tempo), onde a interface se encontra aproximadamente em repouso em virtude do equilíbrio entre forças capilares e gravitacionais. Dessa forma, obtêm-se uma curva que corresponde à dinâmica da ascensão capilar $X(T)$, que pode ser comparada com o modelo teórico mais simples para ascensão capilar, descrito em Joos et al, 1990. Os resultados obtidos são mostrados nas figuras 8 e 9.

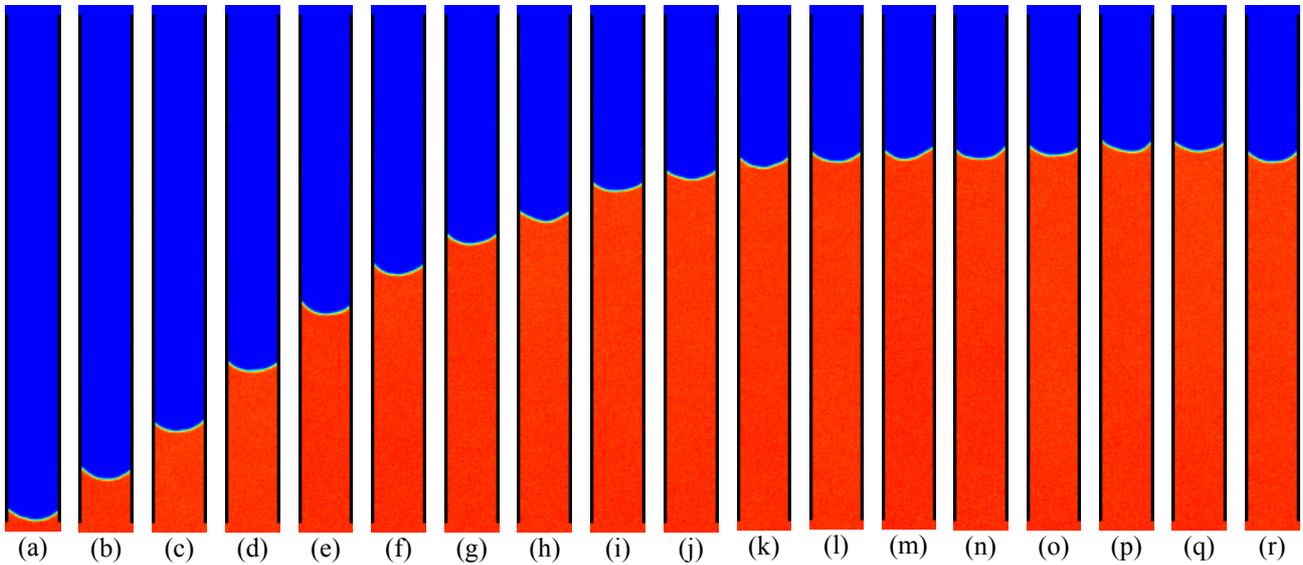


Figura 8 – Sequência da simulação da invasão de um capilar 2D com dimensão de 325x30 influenciada pela gravidade utilizando o modelo MLGA. As imagens de (a) a (r) correspondem aos passos de tempo de 1000 a 350000, respectivamente, e foram obtidas com média temporal de 200 passos.

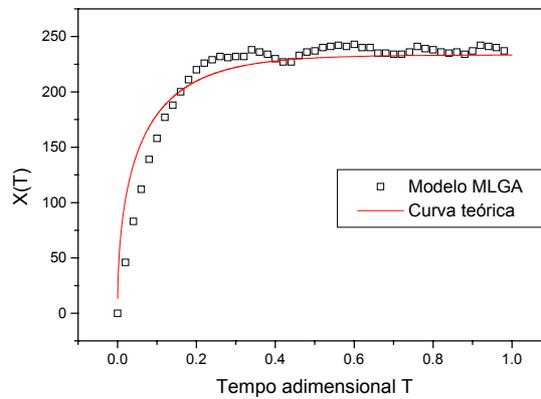


Figura 9 – Curva de ascensão capilar $X(T)$ obtida a partir do modelo MLGA. Os quadrados correspondem aos pontos obtidos na simulação, enquanto a linha contínua corresponde a curva teórica obtida usando o modelo mais simples para ascensão capilar, considerando que as duas fases presentes são água e ar. A altura h de equilíbrio é ~ 237 unidades de rede.

Tabela 1 – Parâmetros utilizados e resultados obtidos na simulação.

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

* Parâmetros expressos em unidades de rede

De acordo com a tabela (1) e com a figura (9), os resultados obtidos utilizando o modelo MLGA têm boa concordância com o resultados teóricos. A dinâmica observada é condizente com o que é esperado, pois a medida que a fase molhante invade o capilar, esta tem maior dificuldade de invadir, devido a coluna de fluido molhante aumentar com o tempo. Observando a figura (9), notamos que a curva $X(T)$ apresenta oscilações antes da interface alcançar o

equilíbrio. Esse comportamento realmente existe no processo real, mas nesse caso está exagerado, devido às flutuações (ou ruídos) características dos modelos de gás em rede.

5.4. Invasão em Configurações Geométricas Representativas

Nessa seção, foram simulados processos de invasão em estruturas porosas simplificadas representativas daquelas encontradas em meios porosos reais. Essas geometrias foram escolhidas com o intuito de visualizar o comportamento do modelo MLGA mediante formas irregulares, que podem gerar regiões de aprisionamento de uma ou mais fases. Os resultados obtidos foram comparados qualitativamente com os resultados experimentais obtidos por Chatzis & Dullien (1983), mostrados na figura (10).

Inicialmente, simula-se um processo de drenagem em um poro formado por dois capilares de diâmetros diferentes. Como a fase não-molhante (azul) não invade espontaneamente o capilar de entrada, há a necessidade de se impor um gradiente de pressão no domínio. A diferença de pressão aplicada foi de $\Delta P \sim 0.5$ (unidades de rede). Os resultados obtidos são mostrados na figura (11). Após o processo de drenagem, simula-se um processo de embebição espontânea na mesma geometria. Os resultados obtidos são mostrados na figura (12). Em todas as simulações, ambas as fases apresentam a mesma viscosidade.

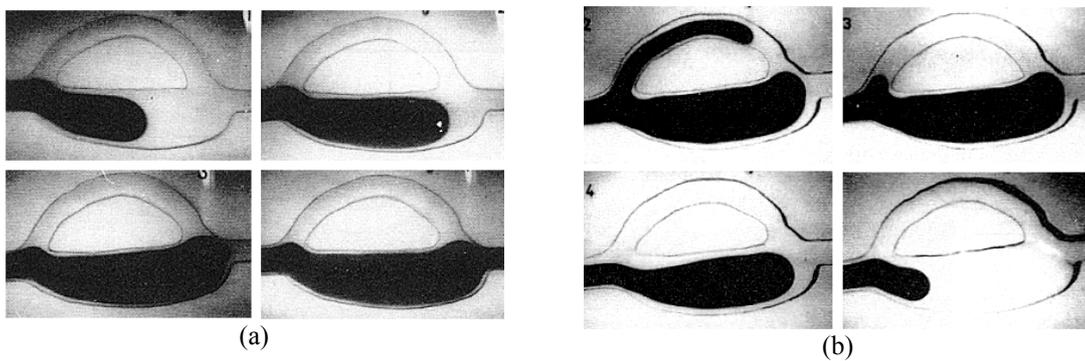


Figura 10 – Sequência de um processo de drenagem (a) e um processo de embebição (b) entre a água e o óleo obtidos experimentalmente por Chatzis & Dullien (1983).

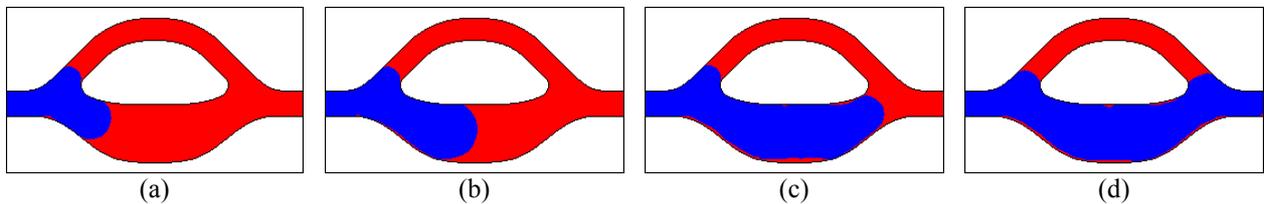


Figura 11 – Sequência de um processo de drenagem simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 151x487. As imagens de (a) a (d) correspondem a 22000, 29000, 42000 e 57000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos.

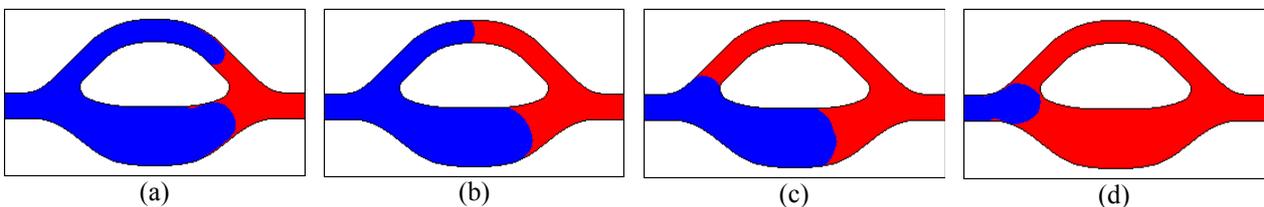


Figura 12 – Sequência de um processo de embebição simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 151x487. As imagens de (a) a (d) correspondem a 114000, 123000, 134000 e 175000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos.

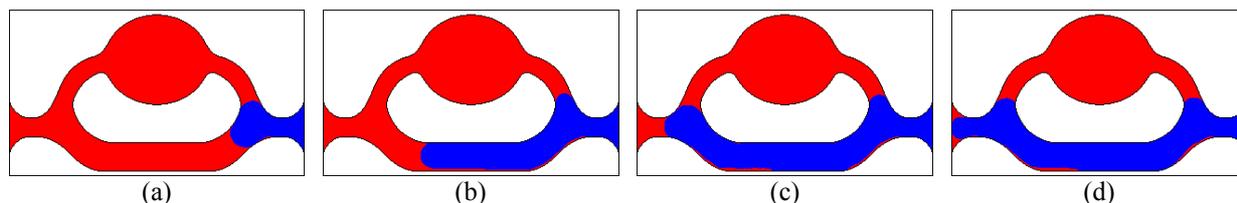


Figura 13 – Seqüência de um processo de drenagem simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 181x541. As imagens de (a) a (d) correspondem a 21000, 46000, 61000 e 71000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos .

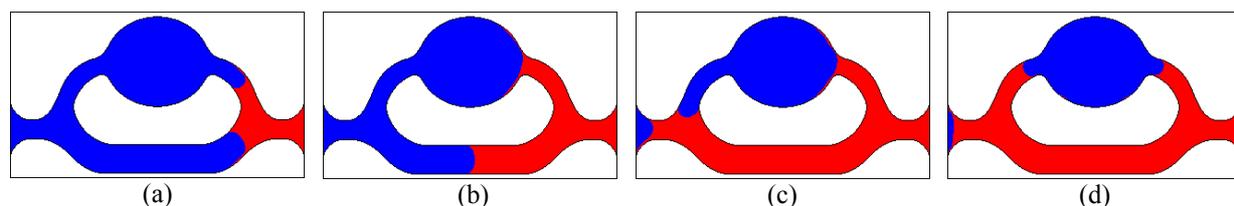


Figura 14 – Seqüência de um processo de embebição simulado utilizando o modelo MLGA em uma rede 181x541. As imagens de (a) a (d) correspondem a 47000, 65000, 97000 e 130000 passos de tempo, respectivamente. Cada imagem foi obtida com média temporal de 250 passos.

Como podemos observar, os resultados obtidos nas figuras (11), (12) e (13) têm boa concordância com os resultados experimentais mostrados na figura (10). Comparando ambos os resultados para drenagem, notamos que tanto na visualização experimental quanto no processo simulado a fase deslocada fica aprisionada no capilar de menor diâmetro, ou no caso da figura (13), naquela região onde a entrada e a saída têm um capilar de menor diâmetro conectado. Em relação aos resultados para embebição, estes também apresentam boa concordância com os resultados experimentais. Como podemos observar nas figuras (10b) e (12), em ambos os casos a eficiência do deslocamento é de 100%, o que mostra que esse tipo de poro não pode ser utilizado para explicar o fenômeno de “trapping” em meios porosos no caso de embebição (Chatzis & Dullien, 1983). Além disso, nota-se que no caso simulado não há um filme precursor da fase molhante, visto que a característica discreta (conseqüentemente irregular) do meio impede que este se desloque rapidamente. Desse modo, a interface move-se até encontrar a região sólida central, separando-se então em duas, uma no capilar menor e outra no capilar maior. Em virtude das forças capilares nesse escoamento serem dominantes ($Ca \sim 10^{-3}$), a interface no capilar menor move-se mais rapidamente do que a interface do capilar maior.

Os resultados simulados na figura (14) também estão em acordo com os resultados mostrados em Chatzis & Dullien (1983). Nesse caso, grande parte da fase não-molhante fica nitidamente aprisionada no poro, mostrando que esse tipo de poro é representativo na explicação do fenômeno de “trapping” em meios porosos para o caso de processos de embebição. Verifica-se nas figuras (11) e (12) que a própria dinâmica simulada é muito semelhante à experimental, principalmente em relação às curvaturas das interfaces e aquelas porções da fase molhante que ficam retidas junto às paredes. Essas porções podem causar o fenômeno de “lubrificação” da fase não-molhante, pois muitas vezes, a fase invasora perde o contato direto com a parede, o que faz com que a mesma escoe com maior velocidade através do poro.

6. Conclusão

O Modelo de Gás em Rede Booleano com Mediadores de Campo (MLGA) demonstrou ser eficiente na simulação computacional de escoamentos bifásicos em estruturas porosas bidimensionais. O modelo foi capaz de recuperar a natureza física da lei de Young-Laplace, em relação à linearidade da diferença de pressão na interface com o inverso do raio. Foi possível simular a dinâmica macroscópica de molhamento observada experimentalmente com a modificação das interações entre partículas e regiões sólidas. Mesmo com toda simplicidade presente no modelo, este se mostrou robusto para a simulação de fenômenos complexos, e ainda não completamente entendidos, como a ascensão capilar com influência da gravidade e processos de deslocamento imiscível em poros de diferentes configurações geométricas, além de simular aspectos físicos referentes à interação entre diferentes espécies de forças, como capilares e viscosas. Isso mostra que o modelo MLGA pode vir a ser uma ferramenta poderosa para simulação e predição do comportamento de diferentes fluidos no escoamento em meios porosos reais.

7. Agradecimentos

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

8. Referências

- Anderson, W. G., 1986, Journal of Petroleum Technology. Vol. 38, pp. 1246.
- Bear, J., 1972, "Dynamics of fluids in porous media", Dover Publications, New York.
- De Coninck, J.; Ruijter, M. J.; Voué, M., 2000, "Dynamics of wetting", Current Opinion in Colloid & Interface Science, Vol. 6, p.49-53.
- Chapman, S., Cowling, T. G., 1952, "The Mathematical Theory of Non-uniform Gases", Cambridge University Press.
- Chatzis, I, Dullien, F. A. L., 1983, "Dynamic Immiscible Displacement Mechanisms In Pore Doublets: Theory Versus Experiment", Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 91, n.1.
- d'Humières, D., Lallemand, P., Frisch, U., 1986, "Lattice gas models for 3D hydrodynamics", Europhys. Lett., Vol. 2, pp. 291-297.
- Frisch, U., Hasslacher B., Pomeau Y., 1986, "Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation", Physical Review Letters, Vol. 56, pp. 1505-1508.
- Joos, P, Van Remoortere, P, Bracke, M., 1990, "The kinetics of wetting in a capillary", Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 136, n. 1.
- Sahimi, M., 1993, "Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata and simulated annealing", Reviews of Modern Physics, Vol. 65, n. 4.
- Santos, L. O. E., Philippi, P.C., 2002, "Lattice-gas model based on field mediators for immiscible fluids", Physical Review E, Vol. 65, n. 46305.
- Tanner, L. H., 1979, "The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces", *J. Phys. D:Appl. Phys.* **12**, 1473-1484.
- Wolf, F. G., 2002, "Simulação de Processos de Deslocamento Imiscível em Estruturas Porosas Utilizando Modelos de Gás em Rede com Mediadores de Campo", Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.
- Wolfram, S., 1986, "Cellular Automaton Fluids: Basic Theory", J. Stat. Phys., Vol. 45, pp. 471-526.

TWO-PHASE FLOW SIMULATION INSIDE STRUCTURE POROUS USING A LATTICE-GAS MODEL

Fabiano Gilberto Wolf

Federal University of Santa Catarina – UFSC
 Department of Mechanical Engineering
 Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory – LMPT
 Trindade - Florianópolis/SC - 88040-900 - Brazil
fabiano@lmpt.ufsc.br

Luiz Orlando Emerich dos Santos

Federal University of Santa Catarina – UFSC
 Department of Mechanical Engineering
 Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory – LMPT
 Trindade - Florianópolis/SC - 88040-900 - Brazil
emerich@lmpt.ufsc.br

Paulo César Philippi

Federal University of Santa Catarina – UFSC
 Department of Mechanical Engineering
 Porous Media and Thermophysical Properties Laboratory – LMPT
 Trindade - Florianópolis/SC - 88040-900 - Brazil
philippi@lmpt.ufsc.br

Abstract. The Field Mediators Boolean Lattice-Gas Model (MLGA) was used for the dynamical analysis of two-phase immiscible displacement inside bi-dimensional simplified porous structure. Young-Laplace equation is verified from the phase-configuration inside capillary channels, when mechanical equilibrium was reached. The dynamics of the wetting process is analyzed by considering the spreading of a liquid drop in contact with a flat solid surface. Capillary rise under the action of gravity is simulated inside a two-dimensional channels. Simplified two-dimensional geometrical configurations are used for studying imbibition and drainage and the role of trapping in invasion processes and compared with experimental results. The obtained results, apparently, confirm the suitability of MLGA model in the dynamical analysis of immiscible displacement in bi-dimensional porous structure.

Keywords. Immiscible Displacement, Two-Phase Flow, Lattice-Gas Model, Porous Media.