



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO À PESQUISA



Laboratório de Meios Porosos
e Propriedades Termofísicas

SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTOS DE FLUIDOS IMISCÍVEIS USANDO LATTICE BOLTZMANN

ASSINATURA PROFESSOR ORIENTADOR: PAULO CESAR PHILIPPI

ASSINATURA BOLSISTA: MICHAEL FREDERICO PAIVA DA SILVA

Florianópolis, 30 de agosto de 2005.

1. Resumo

O correto conhecimento dos processos físicos que controlam o deslocamento de interfaces fluídicas nos poros é, presentemente, de interesse crescente, devido ao aumento das possibilidades da simulação direta de deslocamentos imiscíveis em geometrias complexas oferecidas pelo grande desenvolvimento dos computadores e dos métodos numéricos e ao aumento da precisão das representações tridimensionais da estrutura porosa promovida pelo grande progresso dos métodos de reconstrução tridimensional e pelo aumento da resolução espacial que é possível de se obter com os métodos baseados em microtomografia. O escoamento de fluidos imiscíveis é tratado, classicamente, considerando a região de transição entre fluidos com espessura nula. Desse modo, a tensão interfacial é a única propriedade macroscópica relevante, além das propriedades intrínsecas a cada fluido. De um ponto de vista microscópico, quando dois fluidos imiscíveis são misturados, as forças de interação de longa-distância entre as moléculas de mesma espécie são as responsáveis pelo processo de segregação. A espessura da zona de transição e a tensão interfacial são, conseqüentemente, controladas pela intensidade e alcance dos potenciais de interação e pela difusividade binária. A dificuldade teórica é significativamente aumentada quando esses dois fluidos interagem com uma superfície sólida. De fato, além da tensão interfacial entre os fluidos, as energias superficiais de interação com a superfície sólida são os principais mecanismos macroscópicos que controlam o processo de deslocamento da interface sobre uma superfície sólida. Quando a interface avança ou retrai sobre uma superfície sólida, efeitos dinâmicos irão mudar o ângulo de contato em relação ao ângulo que essa interface teria com a superfície, no equilíbrio. No presente trabalho, um modelo de rede de Boltzmann para fluidos imiscíveis é apresentado e utilizado para o estudo dos efeitos dinâmicos sobre o ângulo de contato, produzido pelo deslocamento da interface sobre superfícies lisas e rugosas.

Palavras-chave: deslocamento imiscível; ângulo de contato; Modelo Lattice Boltzmann

2. Introdução

Com o avanço da tecnologia, os pequenos problemas de antes se tornaram nossos novos desafios. Nos últimos anos, começaram a surgir diversos produtos constituídos de componentes microscópicos e, portanto, a necessidade de se compreender a dinâmica de operação envolvida nestes componentes. Dominar este tipo de tecnologia mostra-se fundamental para qualquer empresário que deseje aumentar sua participação no mercado microtecnológico.

Tubos capilares (ou os efeitos capilares presentes nestes) possuem aplicações em áreas bastante diferentes como a microeletrônica e a indústria petroquímica. Também são usados em bombas capilares de uso aeroespacial. Já na exploração de petróleo, a sua extração é fortemente influenciada por efeitos capilares no interior dos reservatórios.

A necessidade de se entender as diversas aplicações de tubos capilares na indústria moderna e a aderência de fluidos em superfícies, para que se faça possível o seu bom funcionamento, nos leva ao estudo dos fenômenos de molhamento de superfícies sólidas por fluidos e seu comportamento em capilares idealizados, que, apesar de certas simplificações, ainda representam bem o modelo real. Para tal validação do modelo, compararemos os resultados analíticos encontrados na literatura com os resultados obtidos através de simulações numéricas.

No entanto, primeiro enfocaremos o escoamento laminar completamente desenvolvido entre placas planas paralelas infinitas estacionárias, também conhecido como escoamento de Hagen-Poiseuille. Embora este seja monofásico, entenderemos melhor o comportamento do fluido em escoamento.

Neste tipo de escoamento existem duas placas paralelas separadas de uma distância a que serão consideradas infinitas na direção x , sem variação de qualquer propriedade nesta direção. Um fluido newtoniano é forçado a escoar entre estas placas até que se obtenha em regime laminar um perfil de velocidades parabólico. Devido à condição de não deslizamento junto às placas, a velocidade nestas será nula. A velocidade máxima se encontra num plano mediano às placas, no ponto de máximo valor da velocidade.

Também se admite que o escoamento é permanente e incompressível. Para um escoamento incompressível, a conservação da massa exige que a velocidade no plano central aumente com a distância em relação à entrada. Longe da entrada do tubo, a camada-limite em desenvolvimento nas paredes das placas atinge o seu plano central e o

escoamento torna-se inteiramente viscoso. A partir do momento em que a forma do perfil de velocidade não se modifica mais e este se apresenta parabólico, e o escoamento é considerado completamente desenvolvido para regime laminar.

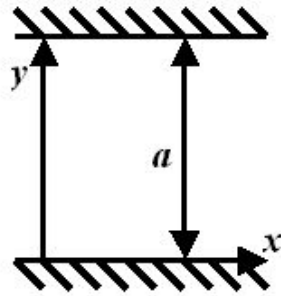


Fig. 1. Eixos coordenados considerados.

Uma vez que o escoamento for completamente desenvolvido, a velocidade não variará mais com x , sendo dependente apenas de y , de modo que $u = u(y)$. Além disso, não há componentes de velocidades na direção y ou na direção z . Fox & McDonald[4] nos fornece uma equação para o perfil de velocidades de Poiseuille baseada nas equações de Navier-Stokes. Derivando esta equação, isolando sua derivada parcial e substituindo este resultado na primeira, temos então uma equação dependente apenas de y , mostrada a seguir.

$$u = \frac{4u_{\max}}{a^2}(ay - y^2) \quad (1)$$

Entrando com a velocidade máxima encontrada em cada simulação, podemos comparar os perfis obtidos da equação (1) com os obtidos numericamente.

Passamos agora ao problema da invasão capilar, objetivo principal deste trabalho. Usualmente a descrição do fluxo de fluidos imiscíveis é feita a partir de um balanço de massa e quantidade de movimento em torno da interface, desprezando-se a sua largura. Desse modo, além das propriedades de cada fluido, há apenas um parâmetro adicional, a tensão interfacial. Quando estes fluidos estão em contato com uma superfície sólida a dificuldade na descrição aumenta sensivelmente. Normalmente a caracterização é feita utilizando-se um ângulo de contato entre a interface e a superfície. Para a descrição ser mais completa, entretanto, é necessário que se conheça não somente o valor do ângulo no equilíbrio, mas também a forma como este ângulo varia com a velocidade tanto num processo de embebição quanto num processo de drenagem. Além da dificuldade em se obter, ou prever, a forma de variação do ângulo, há a dificuldade na obtenção do ângulo de contato mesmo quando a interface se encontra em equilíbrio,

pois o ângulo pode ser afetado por impurezas, pela posição da interface com relação à força de gravidade e também devido às rugosidades na superfície[1].

De um ponto de vista microscópico, a interface é o resultado de forças atrativas de longa distância agindo no interior de cada fluido. Neste caso, a tensão interfacial reflete o alcance e a intensidade das forças envolvidas. Da mesma forma, também o ângulo de contato passa a ser uma consequência de interações que ocorrem em nível microscópico. No caso, o ângulo depende das interações de cada fluido com a superfície sólida além das interações dos fluidos entre si. Assim, a caracterização dos fluidos e das interfaces passa a ser feita a partir de parâmetros microscópicos como forças de longa distância e potenciais de atração fluido-sólido. Uma abordagem desse tipo pode ser adequada quando se pretende simular processos nos quais o fenômeno da capilaridade tem um papel significativo, pois os efeitos dinâmicos no ângulo de contato não precisam ser conhecidos a priori. Estes efeitos devem surgir como uma consequência da dinâmica do modelo.

A dinâmica da ascensão capilar foi descrita pela primeira vez por Lucas e Washburn, em 1921, onde consideraram-na como um balanço entre forças capilares, viscosas e gravitacionais e um perfil de velocidades parabólico. Embora dados experimentais atestem sua validade para escoamentos laminares, esta equação falha por não considerar efeitos inerciais[2]. Com base neste estudo, Bosanquet propôs em 1923 uma equação alternativa para a de Lucas-Washburn. Assim como no modelo numérico utilizado, a equação de Bosanquet não considera os efeitos de entrada do fluido em escoamento. Após rederivar a equação de Bosanquet, considerando dois fluidos com mesma viscosidade e densidade, Santos et al[3]. encontrou a seguinte equação para a altura do menisco

$$\frac{d^2h(t)}{dt^2} + \frac{(D^2 - 1)\mu}{r^2\rho} \frac{dh(t)}{dt} = \frac{(D - 1)\sigma \cos \theta}{r\rho H} - \frac{gh(t)}{H} \quad (2)$$

onde $D = 2$ em duas dimensões (placas paralelas) e $D = 3$ para um capilar cilíndrico. Os outros parâmetros da equação (2), σ , θ , g e H são, respectivamente, tensão interfacial, ângulo de contato, aceleração da gravidade e comprimento do capilar.

Aqui observaremos o comportamento do ângulo de contato em capilares lisos e rugosos, nos processos de drenagem e embebição, sendo este o ângulo formado pela interface fluido-fluido e pelo sólido, como mostrado na Fig. 2. O ângulo de contato

representa uma medida da molhabilidade dos fluidos envolvidos e pode ser medido geometricamente, como mostrado na Fig. 3.

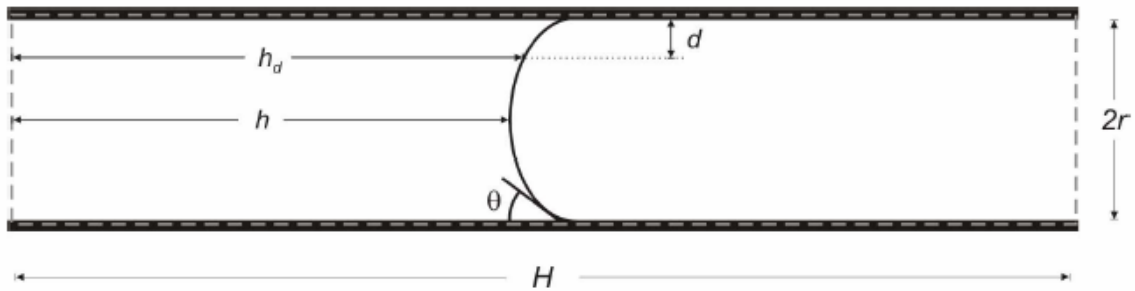


Fig. 2. Parâmetros para medição do ângulo de contato θ .

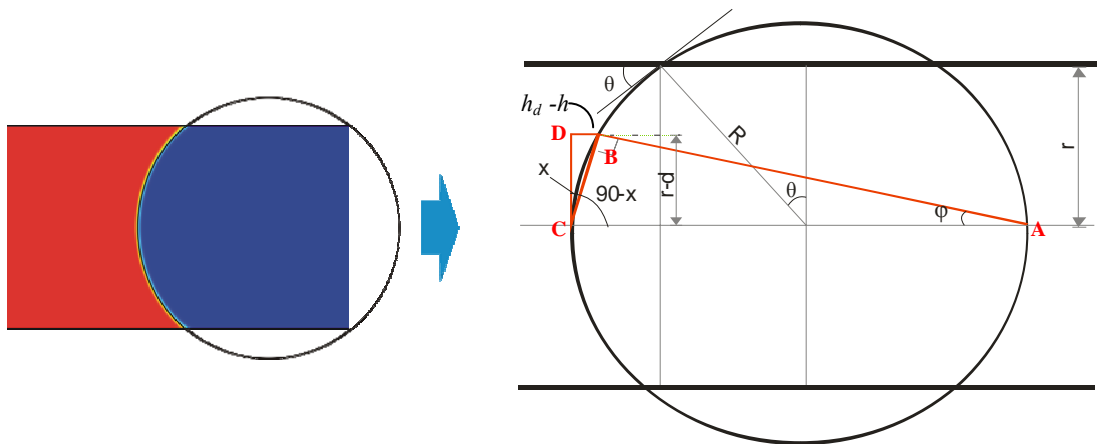


Fig. 3. Parâmetros para medição do ângulo de contato θ .

Igualando a soma dos ângulos do triângulo ABC a 180° da Fig. 3 provamos que $x = \varphi$. Aplicando a definição de seno neste triângulo encontramos a seguinte equação:

$$\text{sen } \varphi = \frac{\sqrt{(r-d)^2 + (h_d - h)^2}}{2R}$$

Outra relação de fácil percepção é $r = R \cos \theta$. Como provamos que $x = \varphi$, podemos aplicar a definição de seno também do triângulo de BCD e substituí-lo na última equação, resultando em:

$$\frac{(h_d - h)}{\sqrt{(r-d)^2 + (h_d - h)^2}} = \frac{\sqrt{(r-d)^2 + (h_d - h)^2}}{2r/\cos \theta}$$

Rearranjando-a encontramos a equação abaixo que nos fornecerá o ângulo de contato diretamente dos dados simulados[3].

$$\cos \theta = \frac{2r(h_d - h)}{(r - d)^2 + (h_d - h)^2} \quad (3)$$

Uma característica bastante interessante e que será analisada após as simulações é a diferença entre os ângulos de contato nos processos de embebição e de drenagem. Denominada histerese de ângulo de contato, esta diferença pode ser grande, superando com facilidade os 10° para superfícies não especialmente preparadas. Esta histerese geralmente é causada pela rugosidade superficial, por contaminantes presentes na superfície ou solutos presentes no líquido como surfactantes ou polímeros, mas pode ser causada simplesmente por forças capilares ou pela pressão necessária ao movimento do fluido em sentido normal ou contrário ao de invasão espontânea do capilar.

3. Método de Lattice Boltzmann

O Modelo de Lattice Boltzmann é um método de simulação hidrodinâmico baseado na teoria cinética dos gases, muito adequado à resolução dos problemas de molhamento e invasão capilar aqui considerados. Este método surgiu no final da década de oitenta como uma extensão dos modelos de gás em rede (Lattice Gas Automata), existindo atualmente algumas variantes dele. Entre estes métodos, encontra-se o Modelo de Lattice Boltzmann para escoamentos imiscíveis baseado em mediadores de campo[5,6], desenvolvido no Laboratório de Meios Porosos e Propriedades Termofísicas (LMPT/UFSC), e este modelo específico foi empregado para a obtenção dos dados numéricos.

3.1. Lattice Boltzmann para escoamentos monofásicos.

Podemos imaginar o método de Lattice Boltzmann como uma discretização da equação de Boltzmann, utilizando um espaço discreto (os vértices de uma rede regular) e tempos discretos (atualização simultânea de todos os pontos da rede). Através de uma função distribuição $N_i(\vec{X}, T)$ representa-se o fluido, onde é indicado o valor esperado do número de partículas em uma posição \vec{X} (um dos vértices da rede) no tempo T (número de passos de tempo). A função distribuição é atualizada pela seguinte equação

$$N_i(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i(\vec{X}, T) + \Omega_i(\vec{X}, T) \quad (4)$$

onde \vec{c}_i representa a distância entre dois sítios na rede e Ω_i é o operador de colisão, descrito a seguir.

A interação entre as partículas que compõe o fluido é representada pelo operador de colisão. Considerando que em um escoamento monofásico o principal efeito das colisões é levar a distribuição N_i para uma distribuição de equilíbrio N_i^{eq} (que pode ser descrita por parâmetros macroscópicos como densidade e velocidade do fluido), podemos utilizar um operador de colisão tipo BGK:

$$\Omega_i = \frac{N_i^{eq} - N_i}{\tau} \quad (5)$$

onde τ é o tempo de relaxação, relacionado com a viscosidade do fluido que se queira simular.

As variáveis macroscópicas, densidade ρ e quantidade de movimento $\rho\vec{u}$, são definidas como momentos da função distribuição:

$$\rho = \sum_i N_i \quad (6)$$

$$\rho\vec{u} = \sum_i N_i \vec{c}_i \quad (7)$$

A distribuição de equilíbrio pode ser deduzida a partir de considerações microscópicas, como a conservação da massa e da quantidade de movimento no processo de colisão, e também a partir da forma das equações macroscópicas que se deseja simular. Uma escolha adequada de N_i^{eq} leva a um comportamento macroscópico (das variáveis ρ e $\rho\vec{u}$) que pode ser descrito pelas equações:

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

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = \partial_\alpha(p) + \nu \partial_\beta(\partial_\beta(\rho u_\alpha) + \partial_\alpha(\rho u_\beta)) \quad (9)$$

onde p é a pressão (no caso, proporcional à densidade), e a viscosidade ν é função do tempo de relaxação.

3.2. *Lattice Boltzmann para escoamentos bifásicos*

A separação entre fases, tal como ocorre em fluidos imiscíveis, é resultado de interações de longa distância entre as partículas que compõe cada fluido. Para introduzir no modelo estas interações foram utilizados mediadores de campo[5,6]. Estes têm a função de levar, através da rede, as informações sobre a concentração de cada fluido. Tendo esta informação é possível modificar o processo de colisão, simulando o efeito da interação de longa distância. Isto é feito com a separação do operador de colisão em dois termos, um termo sendo responsável pelas interações entre partículas de um mesmo tipo (partículas de um mesmo fluido), e o outro termo sendo devido às interações entre partículas de tipos diferentes. As interações de longa distância são incluídas no segundo termo, pois somente quando há ocorrência de mais de um fluido é que as interações de longa distância são importantes, com exceção dos processos de transição de fase, não abordados neste trabalho.

Para colocar de um modo mais formal as informações do parágrafo anterior serão utilizadas quatro funções distribuição, representando os dois tipos de partículas e os respectivos mediadores: $N_i^\psi(\vec{X}, T)$ e $M_i^\psi(\vec{X}, T)$, onde $\psi = r, b$ representa o tipo de

fluido. Os mediadores, como foi dito, levam a informação sobre as concentrações. Sendo assim, sua dinâmica pode ser representada pela equação:

$$M_i^{\psi}(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = \frac{\rho^{\psi}(\vec{X}, T)}{\rho^r(\vec{X}, T) + \rho^b(\vec{X}, T)} \quad (10)$$

A velocidade dos mediadores \vec{u}^m é definida como sendo:

$$\vec{u}^m(\vec{X}, T) = \sum_i M_i^r(\vec{X}, T) - M_i^b(\vec{X}, T) \quad (11)$$

Lembrando que as interações de longa distância manifestam-se por alterações nas velocidades das partículas, definimos *velocidades modificadas* pela ação dos mediadores:

$$\vec{v}^r = \vec{u}^r - A \frac{\vec{u}^m}{|\vec{u}^m|} \quad (12)$$

$$\vec{v}^b = \vec{u}^b - A \frac{\vec{u}^m}{|\vec{u}^m|} \quad (13)$$

onde o parâmetro A está relacionado com a intensidade da interação e, conseqüentemente, com a tensão interfacial.

A dinâmica das partículas pode então ser colocada na forma:

$$N_i^{\psi}(\vec{X} + \vec{c}_i, T + 1) = N_i^{\psi}(\vec{X}, T) + \left(\frac{\rho^{\psi}}{\rho^r + \rho^b} \right) \Omega_i^{\psi\psi}(\vec{X}, T) + \left(\frac{\rho^{\bar{\psi}}}{\rho^r + \rho^b} \right) \Omega_i^{\psi\bar{\psi}}(\vec{X}, T) \quad (14)$$

onde o operador de colisão monofásico $\Omega_i^{\psi\psi}$ (representando colisões entre partículas do mesmo tipo) é o mesmo utilizado no modelo monofásico, dado pela equação (5). O operador de colisão bifásico $\Omega_i^{\psi\bar{\psi}}$ também pode ser escrito na forma dada pela equação (5), entretanto a distribuição de equilíbrio utilizada deve ser calculada utilizando as velocidades modificadas de acordo com as equações (12) e (13). A utilização de tempos de relaxação diferentes para os dois fluidos permite que se simule fluidos com viscosidades diferentes.

4. Procedimentos e simulações

4.1. Simulação para o escoamento de Hagen-Poiseuille e seus resultados

Foram simulados diversos casos utilizando o modelo para escoamentos monofásicos descrito acima, variando o tempo de relaxação τ e mantendo $A = 0,4$, para uma rede D3Q19. Tratando-se de uma simulação em duas dimensões, uma projeção desta rede cúbica com nove direções de propagação no plano xy é considerada. Nas superfícies sólidas é aplicada a condição de *bounce-back*, ou seja, a partícula ao bater na parede volta na mesma direção, mas em sentido contrário, garantindo, assim, que a velocidade na parede seja nula. Também foi aplicada a condição periódica reproduzindo um capilar infinito.

Foram consideradas duas condições de contorno em momentos diferentes, deslocamento do fluido por aplicação de uma força de corpo ou por diferença de pressão. A viscosidade cinemática relaciona-se com o tempo de relaxação τ da seguinte maneira:

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (15)$$

A velocidade média foi calculada fazendo-se uma média espacial das velocidades obtidas com o auxílio da equação (1). A velocidade máxima $u_{m\acute{a}x}$ foi retirada dos resultados da simulação e, juntamente com o tempo de relaxação, a velocidade média e a viscosidade cinemática, foi possível encontrar os números de Reynolds (Re) e de Mach (M), com o auxílio das fórmulas

$$\text{Re} = \frac{a\bar{V}}{\nu} \quad (16)$$

$$\text{M} = \frac{\bar{V}}{C_s} = \bar{V}\sqrt{3} \quad (17)$$

onde C_s é a velocidade do som para a rede utilizada.

A Tab. 1 apresenta os resultados obtidos para algumas das simulações mais relevantes com aplicação de forças de corpo. Aumentando o tempo de relaxação τ , aumenta-se também a viscosidade do fluido, conforme esperado. Por isso sua velocidade diminuiu e da mesma forma que os números de Reynolds e Mach. Reynolds

e Mach mostraram-se sempre muito menores que 2300 e 0,3, respectivamente, caracterizando um escoamento laminar e incompressível.

τ	ν	$u_{m\acute{a}x}$	Re	M
0,60	0,03333	0,0076851	7,37930	0,008876
1,00	0,16667	0,0016988	0,32625	0,001962
4,00	1,16667	0,0002546	0,00698	0,000294
8,00	2,50000	0,0001295	0,00166	0,000150

Tab. 1. Dados das simulações com aplicação de força de corpo.

A partir dos gráficos da Fig. 4 podemos notar a correspondência dos métodos analítico e computacional utilizados para tempos de relaxação baixos (menores que 2,0). Entretanto, observamos a divergência dos valores obtidos pelas simulações nas paredes, para tempos de relaxação mais altos, afastando-se um pouco do perfil parabólico.

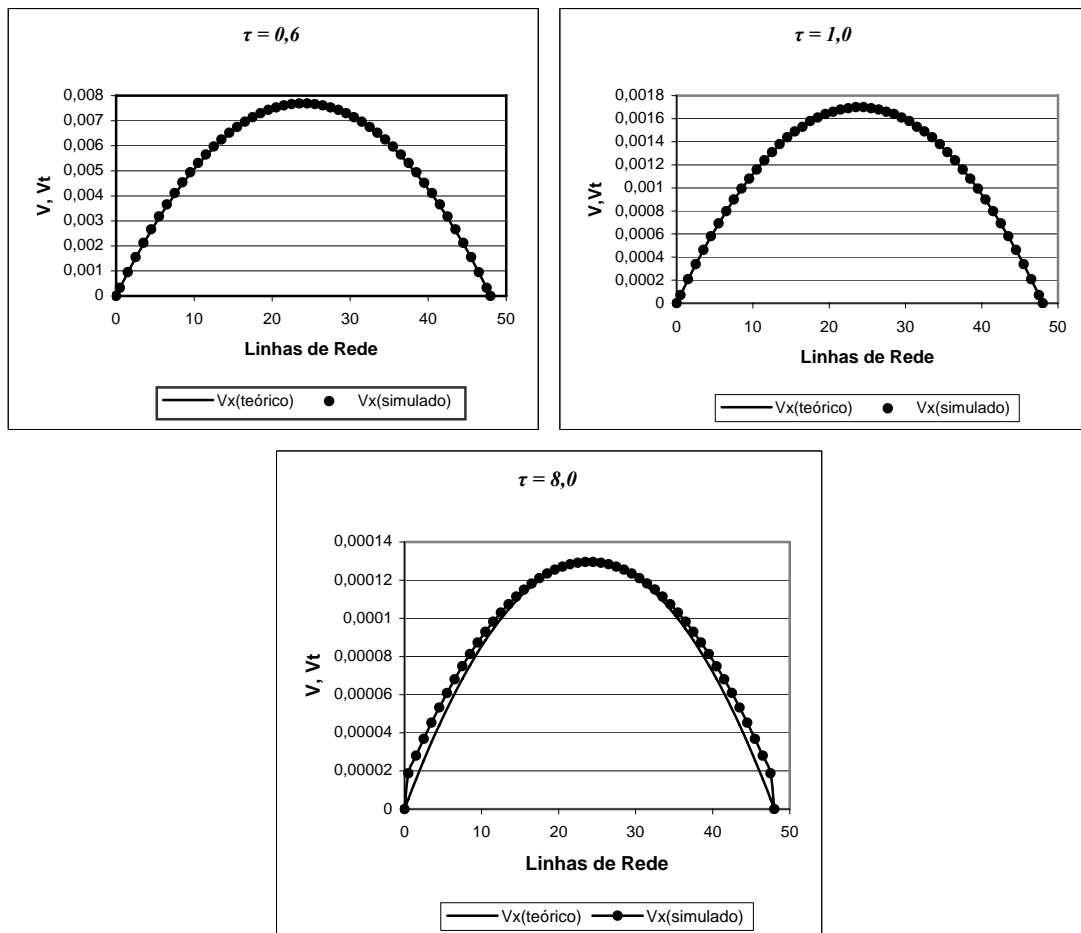


Fig. 4. Perfis de velocidades analítico e numérico para $\tau = 0,6$, 1,0 e 8,0 e força de corpo aplicada.

Para deslocamento do fluido aplicando diferença de pressão, a equação (1) foi substituída pela equação abaixo, pois para este caso esta se mostrou mais apropriada aos cálculos analíticos.

$$u = \frac{1}{2\mu} \frac{(p_2 - p_1)}{L} (ay - y^2) \quad (18)$$

onde encontrou-se a pressão p e a viscosidade μ através das equações abaixo, sendo ρ_1 e ρ_2 as densidades do fluido na entrada e na saída, respectivamente.

$$p = c_s^2 \bar{\rho} \quad \mu = \frac{\bar{\rho}}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad \text{e} \quad \bar{\rho} = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2}$$

O erro entre as velocidades simulada ($v_{simulada}$) e analítica ($v_{teórica}$) foi encontrado pela equação

$$Erro(\%) = \left| \frac{v_{simulada} - v_{teórica}}{v_{simulada}} \right| \cdot 100 \quad (19)$$

A tabela abaixo apresenta alguns dados analíticos e simulados relevantes.

τ	p_1	p_2	$u_{máx}$	Re	M	Erro
0,6	3,33308	3,33209	0,00336973	3,20951	0,00386044	0,86503%
1,0	3,33330	3,33231	0,000674825	0,128372	0,000772037	1,04066%
4,0	3,33383	3,33284	0,0000988305	0,00261942	0,000110273	65,78%

Tab. 2. Dados das simulações com aplicação de diferença de pressão.

Tanto para aplicação de força de corpo quanto para diferença de pressão o aumento de τ fez com que houvesse uma queda da velocidade do fluido reduzindo também Mach e Reynolds. Aqui o escoamento apresentou-se sempre laminar e incompressível e obteve um erro baixo exceto para simulações de tempos de relaxação mais altos ($\tau > 2,0$) onde os dados analíticos e numéricos divergem.

Esta divergência ocorre devido ao aumento do livre caminho médio das partículas em escoamento, ou seja, da distância na qual as partículas fluidas podem se movimentar sem colidirem entre si, sendo que as poucas colisões que ocorrem são insuficientes para anular sua velocidade, causando o deslizamento apresentado junto às superfícies.

4.2. Ângulo de contato em capilar liso e rugoso

Para o estudo do ângulo de contato, foram realizadas simulações de embebição e/ou drenagem de um fluido molhante em um tubo capilar preenchido com fluido não molhante. Empregando o modelo descrito para escoamento bifásico para uma rede D3Q19 planificada, iniciou-se as observações em superfícies lisas, fazendo $\tau^{rr} = 1,5$, τ^{bb}

$= 1,0$ e $\tau^{rb} = 1,0^*$, $A = 0,4$, $\alpha = 0$ e $\beta = 1$, e $\rho^r = \rho^b = 1,0$. A capilaridade foi o principal efeito envolvido na embebição, sendo que em algumas simulações foi adicionada também uma diferença de pressão positiva muito baixa, favorecendo o deslocamento, com o intuito de torná-las mais rápidas. Para efetuar a drenagem, foi aplicada uma diferença de pressão contrária, vencendo as forças capilares e expulsando o fluido molhante.

Foram realizadas várias simulações variando-se essa diferença de pressão, observando os efeitos de molhamento da superfície e o ângulo de contato apresentado. Com o auxílio da equação (3), podemos encontrar os ângulos de contato em qualquer ponto do capilar onde se encontre a interface.

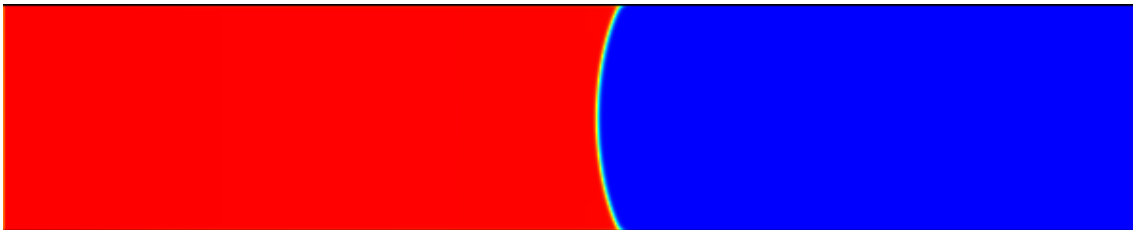


Fig. 5. Fluido em embebição num capilar liso.

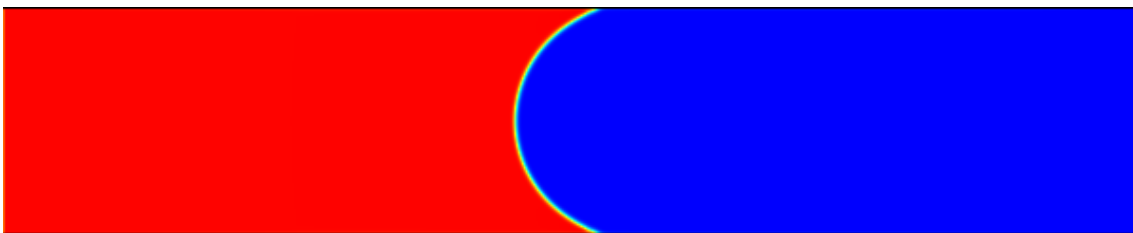


Fig. 6. Fluido em drenagem num capilar liso. Note a diferença do ângulo de contato com a Fig. 5.

Foram então realizadas simulações envolvendo capilares de superfície rugosa utilizando os mesmo parâmetros utilizados para superfície lisa. Entretanto obteve-se resultados apenas visuais, não fazendo sentido calcular o ângulo de contato através da equação (3), pois a angulação da superfície muda a cada passo de tempo devido às rugosidades presentes e também devido ao molhamento das superfícies.

* O tempo de relaxação τ^{rr} é referente as interações existentes entre partículas do fluido molhante, τ^{bb} do fluido não-molhante e τ^{rb} entre eles.

5. Resultados Parciais

A partir das simulações em capilares de superfície lisa obtivemos os ângulos mostrados na Tab. 3. Como se pode notar o ângulo de contato de drenagem diminuiu com o aumento da diferença de pressão aplicada. Já o ângulo para embebição permanece constante por não haver outros efeitos além dos da capilaridade agindo no deslocamento. Comparando as Figs. 5 e 6 torna-se evidente a diferença de angulação nos dois processos. Isto ocorre pois, ao forçar um fluido a escoar, este tende a mover-se nas camadas mais distantes das paredes, como no escoamento de Poiseuille, onde existe a condição de não escorregamento na qual o fluido prende-se às paredes, tendendo a molhá-la.

	$\Delta p_{\text{drenagem}}$	$\Delta p_{\text{embebição}}$	θ_{drenagem}	$\theta_{\text{embebição}}$
Difer. Pressão	0,014	0,0	39,99°	69,08°
Difer. Pressão	0,015	(-) ¹	40,75°	-
Difer. Pressão	0,020	0,0	14,52°	69,07°
Difer. Pressão	0,020	(-)	26,08°	-

Tab. 3. Ângulos de contato para superfícies lisas.

Esta diferença entre os ângulos de contato, ou seja, a histerese destes entre os processos de embebição e de drenagem, podem ser melhor observados na Fig. 7. Nela observamos dois patamares onde cada um representa um processo. No superior estão os ângulos de embebição, enquanto no inferior os de drenagem. As linhas aproximadamente verticais representam períodos de transição entre os dois processos.

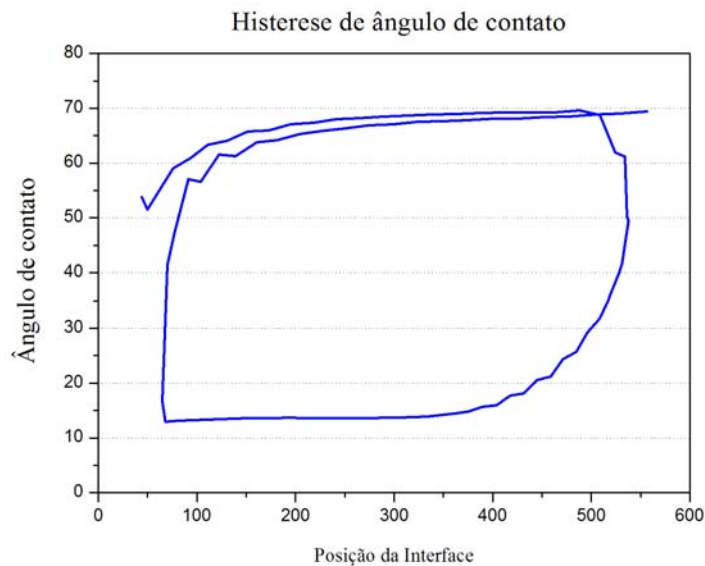


Fig. 7. Histerese de ângulo de contato.

¹ Os símbolos (-) indicam que a não simulação da embebição para determinado caso.

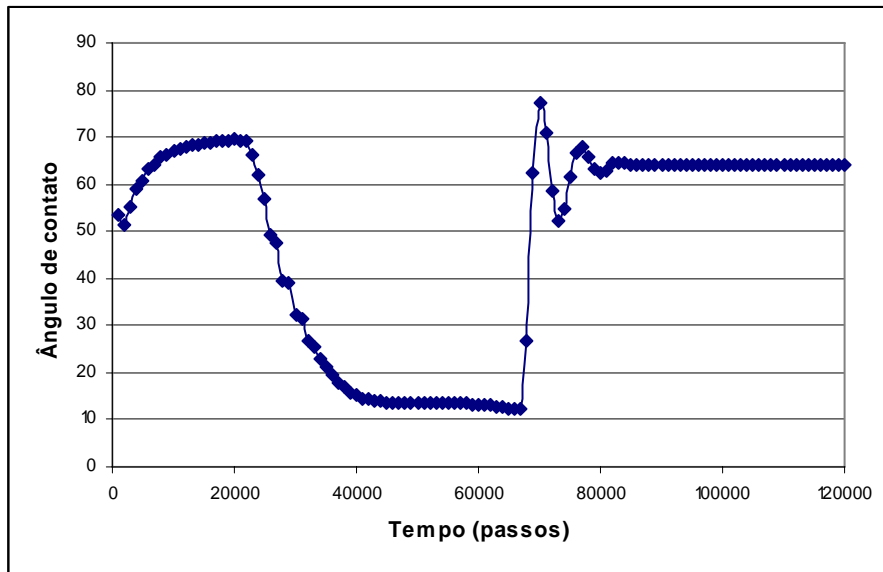


Fig. 8. Evolução do ângulo de contato no tempo.

Na Fig. 8 podemos observar a evolução do ângulo de contato no tempo também apresentando esses dois patamares, porém simulada para $\tau^{rr} = \tau^{bb} = 1,0$ e mantendo os outros parâmetros idênticos aos escolhidos anteriormente.

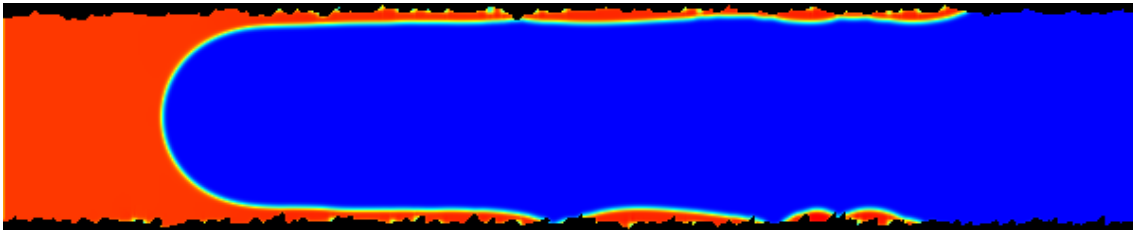


Fig. 9. Invasão capilar para superfície rugosa em drenagem.

Os escoamentos em superfície rugosa refletem melhor o que acontece na realidade, já que no mundo físico não existem superfícies completamente lisas. Para utilizarmos a equação (3) deveríamos encontrar a angulação instantânea de cada ponto da superfície para depois encontramos o real ângulo de contato, o que seria de difícil resolução, além de que a não-simetria das paredes confere a interface uma aparência também assimétrica tornando-se complicado de prever qual formato irá assumir no próximo instante. Entretanto, a avaliação visual mostra-se bastante adequada. Notamos na Fig. 9 o molhamento das paredes durante o processo de drenagem. Isto é causado pelo excesso de irregularidades nesta região, onde o fluido apresenta velocidade extremamente baixa, devido à condição de não-escorregamento, fazendo com que fique preso em vários pontos da superfície, assumindo o aspecto de uma parede molhada real.

6. Novos objetivos

Neste ponto, encontrou-se alguns empecilhos em prosseguir com os trabalhos em invasão capilar, devido a dificuldade de criar um meio de superfície rugosa tridimensional para a realização de novas simulações. Decidiu-se seguir por outros caminhos enquanto não encontrava-se uma solução para este problema, iniciando estudos sobre a tensão interfacial. Mais especificamente, abordou-se a dinâmica das ondas capilares e seus sistemas de amortecimento.

As superfícies fluidas tendem a assumir uma distribuição de equilíbrio, devido às forças gravitacionais e à tensão interfacial aplicadas ao escoamento. A capilaridade também exerce um efeito importante nas ondas gravitacionais de comprimentos de onda curtos. A dinâmica apresentada da configuração inicial ao equilíbrio pode ser representada por um sistema de amortecimento, como demonstrado por Landau & Lifshitz[7] para alguns casos onde diferentes tipos de forças são aplicadas.

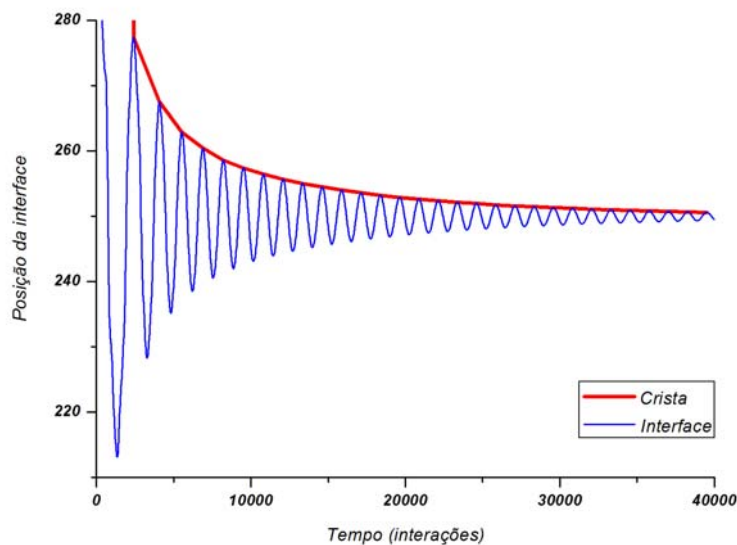


Fig. 10. Sistema de amortecimento de uma interface fluida.

Algumas simulações já foram realizadas, porém ainda devem ser aprimoradas para eliminação dos efeitos da difusão presentes no início de cada simulação, por afetar a forma da exponencial que rege o amortecimento da interface. A Fig. 10. mostra alguns resultados obtidos ainda com a presença de difusão. Também encontrou-se uma maneira de se reconstruir o meio de superfície rugosa e os dois estudos serão levados em paralelo até a obtenção de resultados satisfatórios.

7. Conclusões

Neste trabalho propõe-se a utilização do modelo de Lattice-Boltzmann na simulação de fluidos imiscíveis e, em especial, de processos de invasão capilar. Utilizou-se o modelo com três tempos de relaxação, pois este se mostrou bastante adequado e superior à suas outras variantes.

Com relação ao problema abordado, a principal dificuldade envolvendo simulações de invasão capilar são as variações do ângulo de contato entre a interface e a superfície sólida como consequência da dinâmica da invasão. Assim, prevê-se que modelos tipo Lattice Boltzmann podem ser capazes de prever variações de ângulo de contato, sendo uma alternativa no estudo destes processos.

Entretanto, embora os resultados obtidos estejam em concordância com o que se esperava, ainda são necessários numerosos estudos, destacando-se a análise das condições de contorno utilizadas, e comparações com resultados experimentais, para se avaliar as faixas de variação que o modelo permite simular e a precisão que é possível se obter nestas simulações.

8. Referências Bibliográficas

- [1] de Gennes, P. G. Wetting: statics and dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, v. 57, n. 3, p. 827-863, 1985.
- [2] Kornev, K. G.; Neimark, A. V. Spontaneous penetration of liquids into capillaries and porous membranes revisited. *J. Colloid. Interf. Sci.* 235 (1), p. 101-113, 2001.
- [3] Santos, L. O. E.; Wolf, F. G.; Philippi, P. C. Dynamics of interface displacement in capillary flow. Submetido ao *Journal of Statistical Physics*, 2004.
- [4] Fox, R. W.; McDonald, A. T. *Introdução à mecânica dos fluidos*. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, c2001.
- [5] dos Santos, L. O. E.; Philippi, P. C. Lattice-gas model based on field mediators for immiscible fluids. *Phys. Rev. E*, V.65 (4): Art. No. 046305, 2002.
- [6] Santos, L. O. E.; Facin, P. C.; Philippi, P. C. Lattice-Boltzmann model based on field mediators for immiscible fluids. *Phys. Rev. E*, V.68 (5): Art. No. 056302, 2003.
- [7] Landau, L.D. and Lifshitz, E.M. *Fluid Mechanics*. 2nd edition. Vol. 6 – Course of Theoretical Physics. Oxford: Butterworth-Heinemann Ltd, 1995.