UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS

Matheus dos Santos Guzella

**Simulação numérica da formação de bolhas em
superfícies aquecidas utilizando o método de *Lattice*
Boltzmann dos pseudopotenciais**

São Carlos

2021

Matheus dos Santos Guzella

**Simulação numérica da formação de bolhas em
superfícies aquecidas utilizando o método de *Lattice*
Boltzmann dos pseudopotenciais**

Tese apresentada à Escola de Engenharia de
São Carlos da Universidade de São Paulo,
como parte dos requisitos para obtenção do
título de Doutor em Ciências - Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Térmica e Fluídos

Orientador: Prof. Associado Luben Cabezas-
Gómez

ESTE EXEMPLAR TRATA-SE DA
VERSÃO CORRIGIDA. A ORIGINAL
ENCONTRA-SE DISPONÍVEL JUNTO
AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
MECÂNICA DA EESC-USP.

São Carlos

2021

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Dr. Sérgio Rodrigues Fontes da
EESC/USP com os dados inseridos pelo(a) autor(a).

G426s	<p>Guzella, Matheus dos Santos</p> <p>Simulação numérica da formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando o método de Lattice Boltzmann dos pseudopotenciais / Matheus dos Santos Guzella; orientador Luben Cabezas-Gómez. São Carlos, 2021.</p> <p>Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Termociências e Mecânica dos Fluídos -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2021.</p> <p>1. Método de Lattice Boltzmann. 2. Modelo dos pseudopotenciais. 3. Ebulição. 4. Simulação numérica. I. Título.</p>
-------	---

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Bacharel **MATHEUS DOS SANTOS GUZELLA**.

Título da tese: "Simulação numérica da formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando o método de *Lattice Boltzmann* dos pseudopotenciais".

Data da defesa: 23/07/2021.

Comissão Julgadora

Resultado

Prof. Associado **Luben Cabezas Gómez (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos – EESC/USP)

Aprovado

Prof. Dr. **Pablo Fariñas Alvariño**
(Universidade da Coruña/UC)

Aprovado

Prof. Associado **José Antonio Rabi**
(Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos-FZEA/USP)

Aprovado

Prof. Titular **Gherhardt Ribatski**
(Escola de Engenharia de São Carlos – EESC/USP)

Aprovado

Prof. Dr. **Caetano Rodrigues Miranda**
(Instituto de Física-IF-USP)

Aprovado

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica:
Prof. Associado **Adriano Almeida Gonçalves Siqueira**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:
Prof. Titular **Murilo Araujo Romero**

*Este trabalho é dedicado à minha família, em especial ao meu pai e melhor amigo, José
Fernando (in memoriam)*

AGRADECIMENTOS

- Agradeço ao Professor Luben pela longa e preciosa amizade, inúmeras sugestões e conversas e pela excelência na orientação do trabalho.
- Agradeço a FAPESP (projeto temático - processo 2016/09509-1) e a CAPES pelo apoio financeiro (código de financiamento 001).
- Agradeço a secretaria do programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica pelo apoio administrativo.
- Agradeço ao colega de laboratório Gustavo, por ter me ajudado em vários momentos quando cheguei a EESC e pelas várias conversas e discussões sobre o Método de *Lattice* Boltzmann.
- Agradeço aos colegas de laboratório Luiz Eduardo e Vinícius pelos inúmeros auxílios, discussões e sugestões. Deixo registrado aqui o reconhecimento da grande capacidade intelectual e o elevado conhecimento de ambos no Método de *Lattice* Boltzmann.
- Agradeço ao colega de laboratório Alfredo, que mesmo pelo pouco contato que tivemos até a entrega do documento final da tese, compartilhou conhecimentos e deu várias sugestões no código utilizado, que possibilitaram a redução do tempo das simulações.
- Agradeço aos membros do grupo SISTER da Universidade da Coruña, pela excelente recepção e pela oportunidade de convívio. Agradeço especialmente ao Professor Pablo Fariñas Alvariño e José Maria Saiz-Jabardo, por toda a ajuda na execução dos ensaios experimentais, compartilhamento de conhecimento e exemplos de conduta profissional. Agradeço a eles e também aos Professores Alberto Arce Ceinos e María Luisa Sánchez Simón pelos vários momentos de descontração durante a minha estadia em Ferrol.
- Agradeço ao Professor José Manuel e aos pesquisadores Angel e Javier pelo compartilhamento de conhecimentos e pela ajuda na condução de ensaios experimentais, que mesmo não tendo sido utilizados neste trabalho, serão utilizados em trabalhos futuros.
- Agradeço aos membros da banca pela disposição em criticar o trabalho, de modo a melhorá-lo. Agradeço também aos Professores Gherhardt Ribatski e José Maria Saiz-Jabardo pelas contribuições no exame de qualificação.

- Agradeço aos colegas do Instituto de Ciência e Tecnologia (ICT/UFVJM) que aprovaram o meu afastamento para realização das disciplinas da EESC/USP. Faço um agradecimento especial a Profa. Joyce (Engenharia de Alimentos), Prof. Tiago Mendes (Engenharia Mecânica) e Prof. Thiago Parente (Engenharia Mecânica), que se dispuseram a ministrar as disciplinas de minha responsabilidade.
- Agradeço a Ana Paula "Jo", por todo o carinho e apoio dedicados a mim ao longo dos anos. Agradeço também à sua família, por todo o apoio.
- Por fim, agradeço a todos que me ajudaram de alguma forma e que por falha minha não tenham sido referenciados neste texto.

RESUMO

GUZELLA, M.S. **Simulação numérica da formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando o método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais.** 2021. 148p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

Neste trabalho são realizadas simulações numéricas bidimensionais da formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando o Método de Lattice Boltzmann dos pseudopotenciais. As equações hidrodinâmicas são resolvidas por este método e a equação da energia é resolvida pelo método de Runge-Kutta. Uma revisão bibliográfica a respeito dos modelos numéricos baseados no método é apresentada e uma análise crítica dos modelos da literatura é realizada. Com base na revisão bibliográfica, um modelo numérico baseado na combinação de dois modelos da literatura é utilizado, de modo a garantir a consistência termodinâmica e ajuste da tensão superficial de modo independente da razão de densidades. Um modelo para obtenção dos parâmetros em unidades de *lattice* com base em parâmetros do sistema internacional é desenvolvido. Resultados numéricos do diâmetro e período de desprendimento para o ciclo de uma bolha para temperatura reduzida de $T_r = 0,86$ são obtidos de modo a avaliar a consistência do modelo. Comparações destes resultados com correlações empíricas são realizadas e uma razoável acórdância é observada. Posteriormente, resultados de curvas de ebulição são obtidos para diferentes temperaturas reduzidas: $T_r = 0.86$ e $T_r = 0,90$. Por fim, o modelo de obtenção de parâmetros em unidades de *lattice* é utilizado para duas temperaturas reduzidas ($T_r = 0,7604$ e $T_r = 0,7126$) do fluido HFE-7100. Simulações numéricas com os referidos parâmetros mostraram-se proibitivas em termos do custo computacional e, desta forma, simulações foram realizadas com parâmetros em unidades de *lattice* flexibilizados, de modo a avaliar o modelo para simulação em condições distintas das realizadas na literatura, em termos da temperatura reduzida. Uma comparação dos resultados obtidos para as temperaturas reduzidas mostrou-se coerente, do ponto de vista qualitativo.

Palavras-chave: Método de Lattice Boltzmann. Modelo dos pseudopotenciais. Ebulição. Simulação numérica

ABSTRACT

GUZELLA, M.S. **Numerical simulation of the formation of bubbles on heated surfaces using the Pseudopotentials *Lattice* Boltzmann Method**. 2021. 148p.
Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2021.

In this work, two-dimensional numerical simulations of bubble formation on heated surfaces are performed using the Pseudopotential Lattice Boltzmann Method. The hydrodynamic equations are solved by the method and the energy equation is solved by 4th order Runge-Kutta method. A literature review of the numerical models based on the method is presented and a critical analysis of the models in the literature is performed. Based on the literature review, a numerical model based on the combination of two models from the literature is used, in order to guarantee thermodynamic consistency and surface tension adjustment independently of the density ratio. A model to obtain the parameters in *lattice* units based on parameters of the international system. Numerical results of the diameter and release period for the cycle of a bubble for a reduced temperature of $T_r = 0.86$ are obtained in order to evaluate the consistency of the model. These results are compared with empirical correlations and a reasonable agreement is observed. Subsequently, results of boiling curves are obtained for different reduced temperatures: $T_r = 0.86$ and $T_r = 0.90$. Finally, the model of obtaining parameters in *lattice* units is used for two reduced temperatures ($T_r = 0.7604$ and $T_r = 0.7126$) of the fluid HFE-7100. Numerical simulations with the referred parameters were prohibitive in terms of computational cost and, thus, simulations were performed with flexible *lattice* units parameters in order to evaluate the model for simulation in conditions different from those performed in the literature, in reduced temperature. A comparison of the results obtained for the reduced temperatures proved to be coherent, from a qualitative point of view.

Keywords: Lattice Boltzmann method. Pseudopotential model. Boiling. Numerical simulation

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esboço da curva de ebulição	32
Figura 2 – Esquema de discretização D1Q3	42
Figura 3 – Esquema de discretização D2Q9	42
Figura 4 – Esquema de discretização D3Q15, D3Q19 e D3Q27	43
Figura 5 – Representação esquemática dos processos de colisão (à esquerda) e transmissão (à direita) para o operador BGK	48
Figura 6 – Representação esquemática dos processos de colisão e transmissão para o operador MRT	48
Figura 7 – Esquema para representação da Regra de Construção de Maxwell	63
Figura 8 – Resultados do modelo de Li, Luo e Li (2012) para a curva de coexistência termodinâmica.	66
Figura 9 – Resultados do modelo de Li, Luo e Li (2013) para a curva de coexistência termodinâmica.	67
Figura 10 – Resultados do modelo de Czelusniak et al. (2020) para a curva de coexistência termodinâmica considerando a equação de Carnahan-Starling.	70
Figura 11 – Campos de densidades para simulação da ebulição obtidos por Zhang e Chen (2003) para distintos instantes de tempo.	74
Figura 12 – Campo de velocidade obtido por Hazi e Markus (2009)	75
Figura 13 – Comparação do diâmetro de desprendimento da bolha da superfície obtido pelas simulações e pela correlação de Fritz (1935)	76
Figura 14 – Crescimento da bolha em uma superfície aquecida (à esquerda) e campo de velocidades (à direita)	77
Figura 15 – Curva de ebulição versus superaquecimento da superfície	78
Figura 16 – Curva de ebulição versus superaquecimento da superfície para: diferentes condições da difusividade térmica da superfície de aquecimento (à esquerda) e para diferentes capacitâncias por unidade de volume da superfície de aquecimento (à direita)	80
Figura 17 – Crescimento da bolha em uma superfície aquecida (à esquerda) e campo de velocidades (à direita)	81
Figura 18 – Representação esquemática do domínio computacional	89
Figura 19 – Esquema das condições de contorno para o esquema de velocidades D2Q9	90
Figura 20 – Representação esquemática do esquema <i>bounce-back</i>	91
Figura 21 – Formulação do esquema <i>bounce-back</i> para o esquema D2Q9	91
Figura 22 – Fluxograma do procedimento para a definição dos parâmetros de simulação proposta nessa tese	100

Figura 23 – campo de densidade obtido para $\kappa = 0$ com os dados de Li, Zhou e Yan (2017)	103
Figura 24 – Resultados dos campos de densidade obtidos com os dados de Li, Zhou e Yan (2017), considerando $g_{MLB} = 2,5 \times 10^{-5}$ para distintos instantes de tempo	104
Figura 25 – Resultados dos campos de temperatura obtidos com os dados de Li, Zhou e Yan (2017), considerando $g_{MLB} = 2,5 \times 10^{-5}$ para distintos instantes de tempo	104
Figura 26 – Resultados do (a) diâmetro e (b) período de desprendimento da bolha versus aceleração da gravidade obtidos com os dados de Li, Zhou e Yan (2017)	105
Figura 27 – Resultados do diâmetro da bolha e o fluxo de calor médio-espacial adimensional versus tempo adimensional	107
Figura 28 – Resultados de tensão superficial versus parâmetro κ para (a) $T_r = 0,86$ e (b) $T_r = 0,76$	108
Figura 29 – campo de densidade para o ciclo de uma bolha para $T_r = 0,86$ com os modelos para os operadores (a) BGK (b) MRT	108
Figura 30 – campo de densidade para o ciclo de uma bolha para $T_r = 0,76$ com os modelos para os operadores (a) BGK (b) MRT	109
Figura 31 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$; (b) $G_s = 0$; (c) $G_s = 0,75$	110
Figura 32 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$ e (b) $G_s = 0,75$	111
Figura 33 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$ e (b) $G_s = 0,75$	112
Figura 34 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores da tensão superficial: (a) $\kappa = -0,75$ e (b) $\kappa = 0,75$	113
Figura 35 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para $\kappa = -0,75$ e $\kappa = 0,75$	114
Figura 36 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores da difusividade térmica: (a) $\alpha_{MLB} = 0,02$ e (b) $\alpha_{MLB} = 0,18$	115
Figura 37 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para $\alpha_{MLB} = 0,02$ e $\alpha_{MLB} = 0,18$	116
Figura 38 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes formulações para a força de empuxo dada pela: (a) Equação 4.9 e (b) Equação 4.10	117
Figura 39 – Representação esquemática do modelo numérico para ebulição com escoamento	117

Figura 40 – Comparação entre os resultados de velocidade adimensionalizada versus a altura adimensional do domínio obtidos pelo Método de <i>Lattice Boltzmann</i> e a solução analítica	118
Figura 41 – Resultados dos campos de densidade obtidos para (a) $Re = 300$ e (b) $Re = 1200$	119
Figura 42 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para a simulação da ebulição com escoamento.	119
Figura 43 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ e $T_r = 0,86$	122
Figura 44 – Curvas de ebulição para distintas pressões de saturação para o fluido HFE-7100, considerando uma superfície polida	123
Figura 45 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,90$ em regime de ebulição nucleada	124
Figura 46 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,86$ em regime de ebulição nucleada	125
Figura 47 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,90$ em regime de ebulição nucleada plenamente desenvolvida	126
Figura 48 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,86$ em regime de ebulição nucleada plenamente desenvolvida	127
Figura 49 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,90$ em fluxo crítico	128
Figura 50 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,86$ em fluxo crítico	129
Figura 51 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em filme para $T_r = 0,90$	130
Figura 52 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em filme para $T_r = 0,86$	131
Figura 53 – Resultados dos campos de densidade obtidos para $T_r = 0,90$ e para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$; (b) $G_s = 0$; (c) $G_s = 0,75$	131
Figura 54 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ para distintos valores de G_s : $-0,75$; 0 e $0,75$	132
Figura 55 – Resultados de tensão superficial versus parâmetro κ utilizando os dados de Gong e Cheng (2017)	133
Figura 56 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ para distintos valores do parâmetro κ : $-0,75$; 0 ; $0,75$	134

Figura 57 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ para distintos valores da aceleração gravitacional: $g_{MLB} = 1,5 \times 10^{-5}$; $g_{MLB} = 3,0 \times 10^{-5}$; $g_{MLB} = 6,0 \times 10^{-5}$	135
Figura 58 – Resultados da tensão superficial versus parâmetro κ para as propriedades do fluido HFE-7100 para distintas pressões de saturação: (a) $P = 2$ bar; (b) $P = 1$ bar	136
Figura 59 – campos de densidade obtido para a simulação com as propriedades termofísicas do fluido HFE-7100 para as temperaturas reduzidas (a) $T_r = 0,7604$; (b) $T_r = 0,7126$	139

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Grandezas dos esquemas de velocidade	44
Tabela 2 – Relação do parâmetro β' e as equações de estado para o modelo de Gong e Cheng (2012b)	68
Tabela 3 – Propriedades termofísicas do fluido HFE-7100 no sistema internacional para as distintas pressões de saturação de 2 bar e 1 bar	134
Tabela 4 – Parâmetros de simulação em unidades de <i>lattice</i> do fluido HFE-7100 para $P = 2$ bar	136
Tabela 5 – Parâmetros de simulação em unidades de <i>lattice</i> do fluido HFE-7100 para $P = 1$ bar	137
Tabela 6 – Parâmetros de simulação em unidades de <i>lattice</i> do fluido HFE-7100 para $P = 2$ bar	138

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
BBGKY	Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon
DFC	Dinâmica dos Fluidos Computacional

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos latinos

a	Constante da equação de estado não-ideal
b	Constante da equação de estado não-ideal
$B(\mathbf{V}, \mathbf{w}, \mathbf{e})$	Kernel de colisão
c	Constante do <i>lattice</i>
c_p	Calor específico a pressão constante
c_v	Calor específico a volume constante
$\mathbf{c}_i$	Vetor velocidade discretizado das partículas
c_s	Velocidade do som
C	Fator de conversão de unidades
C_i	Termo fonte para ajuste da tensão superficial
C_1	Constante da componente normal do tensor pressão para o problema da interface plana
C_2	Constante da componente normal do tensor pressão para o problema da interface plana
D	Coefficiente de difusão
D_b	Diâmetro de desprendimento da bolha
e	Energia interna específica
$\mathbf{e}$	Direção de reflexão da partícula após a colisão
$f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$	Função distribuição de Boltzmann
$\mathbf{f}_{ij}$	Força exercida pela molécula j sobre a molécula i na escala microscópica
$f_N(\mathbf{z}_{1j}, t, \mathbf{z}_{2j})$	Função distribuição na Equação de Liouville
$F_s(\mathbf{z}_{1j}, t, \mathbf{z}_{2j})$	Função distribuição reduzida
$\mathbf{F}$	Forças externas na escala mesoscópica dependência espacial da força intermolecular

h	Função do método de Runge-Kutta de 4 ^a ordem
g	Aceleração gravitacional
g_1	Constante do esquema de forças intermoleculares
g_2	Constante do esquema de forças intermoleculares
$g(\boldsymbol{x}, t, \boldsymbol{\xi})$	Função distribuição discretizada para o campo de temperaturas
G	Escalar que controla a intensidade da interação intermolecular
$\boldsymbol{G}_i$	Forças externas na escala microscópica
G_s	Parâmetro de ajuste do ângulo de contato
$G(\boldsymbol{x}, \bar{\boldsymbol{x}})$	Forma funcional da
h	Entalpia específica
h_{lv}	Entalpia de vaporização
$H(\boldsymbol{x})$	Campo genérico
$\boldsymbol{I}$	Tensor unitário de segunda ordem
j	Fluxo de momentum
k	Condutividade térmica
L	Comprimento
L_0	Escala de comprimento
m	Massa
$m(\boldsymbol{x}, t)$	Função distribuição no espaço de momentos
$\boldsymbol{M}$	Matrix de transformação linear de operador MRT
N	Número de moléculas
N_{it}	Número de iterações
p	Campo de pressão
$\boldsymbol{P}$	Tensor pressão
$\boldsymbol{q}''$	Fluxo de calor
$\overline{\boldsymbol{q}''}(t)$	Fluxo de calor médio-espacial

$\mathbf{Q}$	Tensor de ajuste da tensão superficial
$\mathbf{r}_i$	Vetor posição na escala microscópica
R	Constante universal dos gases
$\bar{R}$	Raio
s	Entropia específica
$s(\mathbf{x})$	Função para detectar a interface sólido-fluido
$\mathbf{S}$	Tensor deformação
S_i	Termo fonte para inclusão de forças externas
$\bar{S}_i$	Termo fonte para inclusão de forças externas no espaço de momentos
t	Tempo
t_0	Escala de tempo
T	Temperatura
T_b	Período de desprendimento da bolha
T_t	Tempo total de simulação
v	Volume específico
u_0	Escala de velocidade
$T(\mathbf{x}, t)$	Temperatura
ΔT	Superaquecimento da superfície
$\mathbf{v}'$	Velocidade modificada
$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$	Velocidade
$ \mathbf{v} $	Módulo do campo de velocidades
w_i	Fator de ponderação
w'_i	Fator de ponderação normalizado
W	Espessura da interface
$\mathbf{x}$	Vetor posição
$\bar{\mathbf{x}}$	Vetor posição adjacente

z_{1j}	Coordenada generalizada
z_{2j}	Momentum generalizado

Símbolos gregos

α'	Constante da componente normal do tensor pressão para o problema da interface plana
α	Difusividade térmica
$\alpha(T)$	Função utilizada na equação de estado
β	Constante da componente normal do tensor pressão para o problema da interface plana
β'	Constante de ajuste da consistência termodinâmica
$\delta_{\alpha\beta}$	Delta de Dirac
Δ	Variação
ϵ	Constante da componente normal do tensor pressão para o problema da interface plana
ϵ''	Constante de ajuste da consistência termodinâmica
$\eta(\omega_{EE})$	Constante da equação de estado de Peng-Robinson
γ	Tensão superficial
γ'	Constante da componente normal do tensor pressão para o problema da interface plana
Γ	Tensor da tensão viscosa
κ	Parâmetro de ajuste da tensão superficial para o modelo com operador MRT
Λ	Matrix de frequências de relaxação do operador MRT
ω_{EE}	Fator acêntrico
ω	Frequência de relaxação temporal
$\overline{\omega}$	Vetor de frequências de relaxação do operador MRT
$\Omega(f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}))$	Operador colisão

μ	Viscosidade dinâmica
μ'	Viscosidade volumétrica
ν	Viscosidade cinemática
Π	Momento da função distribuição
ϕ	Termo fonte da equação da energia
ψ	Pseudopotencial
Ψ	Termo das contribuições da dissipação viscosa e da tensão superficial na equação da energia
$\rho(\boldsymbol{x}, t)$	Densidade
ε	Profundidade do poço de potencial
ϱ	Distância finita na qual o potencial interpartícula é zero
θ_c	Ângulo de contato
$\Theta(\boldsymbol{r}_i)$	Função potencial na escala microscópica
σ	Parâmetro de ajuste da condição de estabilidade mecânica
σ'	Parâmetro de ajuste da tensão superficial para o modelo com operador BGK/MRT
τ	Tempo de relaxação temporal
φ	Propriedade de transporte geral
$\boldsymbol{\xi}$	Vetor velocidade das partículas

Subscritos

BGK	operador BGK
c	crítica
c,SC	forma contínua no método dos pseudopotenciais
esc	escoamento
fim	final
g	gravitacional

i	superfície de aquecimento
ini	inicial
int	intermolecular
l	líquido
L	comprimento
MLB	Método de <i>Lattice</i> Boltzmann
MRT	operador MRT
o	<i>bulk</i>
p	parede sólida
r	reduzida
s	saturação
SC	pseudopotenciais
SI	sistema internacional de unidades
sup	superficial
t	tempo
v	vapor
total	total
T	temperatura
y	direção Y
x	direção X
0	referência
ρ	densidade
γ	tensão superficial

Sobrescritos

adim	adimensional
------	--------------

n	ordem n
eq	equilíbrio
neq	não equilíbrio
$*$	após a colisão
$'$	modificada

Parâmetros adimensionais

Kn	Número de Knudsen
Ja	Número de Jakob
Ma	Número de Mach
Pr	Número de Prandtl
Re	Número de Reynolds

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	31
1.1	Escoamentos multifásicos	31
1.2	Objetivos e escopo da tese	33
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	35
2.1	Descrição de um fluido em diferentes escalas	35
2.1.1	Descrição microscópica: dinâmica molecular	35
2.1.2	Descrição macroscópica	36
2.1.3	Descrição mesoscópica baseada na teoria cinética: equação de Boltzmann	37
2.2	Discretização da equação de Boltzmann	40
2.3	Solução da Equação de <i>Lattice</i> Boltzmann	47
2.4	Expansão de Chapman-Enskog	49
2.4.1	Obtenção das Equações de Navier-Stokes	49
2.4.2	Obtenção da Equação de Conservação da Energia	53
2.5	Esquemas para inclusão de forças externas	55
2.6	Método de <i>Lattice</i> Boltzmann dos pseudopotenciais	57
2.6.1	Equações de estado não-ideais	61
2.6.2	Consistência termodinâmica e ajuste da tensão superficial no Método de <i>Lattice</i> Boltzmann dos pseudopotenciais	62
2.6.3	Equação da conservação da energia para modelos de interface discreta	70
2.6.4	Trabalhos da literatura baseados no método dos pseudopotenciais	72
2.6.5	Análise crítica dos trabalhos da literatura	83
3	MODELO E METODOLOGIA NUMÉRICA	85
3.1	Equações complementares e metodologia numérica para o modelo hidrodinâmico	85
3.2	Metodologia numérica para o modelo térmico	86
3.3	Condições de contorno	87
3.3.1	Modelo hidrodinâmico	87
3.3.2	Modelo térmico	93
3.4	Condições iniciais	94
3.4.1	Modelo hidrodinâmico	94
3.4.2	Modelo térmico	94
3.5	Algoritmo de solução	94
3.6	Definição de unidades e de parâmetros no Método de <i>Lattice</i> Boltzmann	95

3.7	Proposta de um modelo para obtenção dos parâmetros em unidades de <i>lattice</i> para a simulação da formação de bolhas em superfícies aquecidas	96
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	101
4.1	Simulação do ciclo de uma bolha utilizando os dados da literatura .	101
4.1.1	Comparação dos resultados obtidos por um modelo com o operador BGK e um modelo com o operador MRT	106
4.1.2	Influência da molhabilidade do líquido	110
4.1.3	Influência da tensão superficial	111
4.1.4	Influência da difusividade térmica	112
4.1.5	Influência da formulação da força de empuxo	113
4.1.6	Influência de escoamento plenamente desenvolvido	115
4.2	Simulação da curva de ebulição utilizando dados da literatura para diferentes temperaturas reduzidas	120
4.2.1	Influência da molhabilidade do líquido	126
4.2.2	Influência da tensão superficial	128
4.2.3	Influência da aceleração gravitacional	130
4.3	Aplicação do modelo proposto de obtenção de unidades para simulação do ciclo de uma bolha do fluido HFE-7100	132
4.3.1	Simulação do ciclo de uma bolha utilizando as propriedades do fluido HFE-7100 por uma metodologia simplificada	137
5	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS .	141
5.1	Sugestões para trabalhos futuros	142
	REFERÊNCIAS	143

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será apresentada uma breve introdução do tema a ser estudado nesta tese: formação de bolhas em superfícies aquecidas.

1.1 Escoamentos multifásicos

Fenômenos que envolvem escoamentos multifásicos ocorrem pela presença de pelo menos duas fases separadas por uma interface. Estes podem envolver a mesma substância (por exemplo, fases líquida e vapor) ou substâncias distintas. A ocorrência destes fenômenos é presente na indústria do petróleo, geração de potência, refrigeração, dentre outros exemplos. Uma característica marcante desta classe de fenômenos físicos é a sua complexidade intrínseca, principalmente quando comparada aos fenômenos que envolvem um fluido com fase única.

Das aplicações citadas anteriormente, a formação de bolhas em superfícies aquecidas encontra aplicação em diversas áreas da engenharia, podendo ser exemplificada a ebulição em evaporadores inundados, tipicamente empregados em sistemas de refrigeração por compressão de vapor. A transferência de calor por ebulição tem sido foco de estudos devido à sua elevada eficiência. Por este motivo, vários estudos experimentais relacionados à formação de bolhas em superfícies aquecidas foram realizados, destacando-se o trabalho de [Nukiyama \(1934\)](#). Neste trabalho, o autor conclui que a relação entre o fluxo de calor e o superaquecimento para ebulição em piscina, denominada curva de ebulição, não é monotônica (Figura 1). Além disso, o autor obteve o comportamento na região de transição, estabelecendo a histerese entre a ebulição nucleada e a ebulição em filme. A partir desta importante publicação, diversos trabalhos foram realizados acerca da transferência de calor por ebulição, principalmente por meio da realização de ensaios experimentais.

Em relação à ebulição nucleada, os mecanismos de transferência de calor que resultam na elevada taxa de transferência de calor são ([RIBATSKI, 2002](#)):

- Agitação do líquido devido ao desprendimento, movimento e colapso das bolhas;
- Evaporação da microcamada junto à base da bolha, próxima à superfície de aquecimento;
- Termocapilaridade;
- Efeitos de micro-convecção;
- Evaporação na linha de contato triplo;

Figura 1 – Esboço da curva de ebulição

Fonte: Próprio autor

Como alternativa à realização de ensaios experimentais, a utilização de técnicas da Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC) para simulação de problemas na área de Térmica e Fluidos tem sido intensificada principalmente pelo surgimento de novas ferramentas de simulação, tanto comerciais quanto livres. Especificamente para simulação de escoamentos multifásicos, podem ser citados os modelos *Volume of Fluid* e *Level Set*. Estes modelos baseiam-se na hipótese do contínuo e empregam as equações de conservação de massa, energia e quantidade de movimento para descrever o comportamento do escoamento. Adicionalmente faz-se necessária a solução de uma equação adicional para captura da dinâmica da interface. Por outro lado, modelos em escala microscópica podem ser utilizados. Estes baseiam-se na solução da 2ª Lei de Newton para cada partícula que compõem a matéria. Obviamente, apresentam um custo computacional extremamente elevado, mesmo com o advento de computadores cada vez mais potentes em termos processamento.

Nos últimos anos, o Método de *Lattice Boltzmann* dos pseudopotenciais tem sido empregado como uma alternativa aos métodos tradicionais de Dinâmica dos Fluidos Computacional para simulação de problemas complexos em termofluidinâmica com presença de interfaces. Por basear-se em conceitos da Teoria Cinética dos Gases e a possibilidade de captura de interfaces de forma natural e explícita, o método tem sido empregado com frequência para simulação de problemas que envolvem mudança de fase. Além disso, nesse método, a pressão é calculada explicitamente por meio de uma equação de estado, eliminando a necessidade da solução da equação de Poisson e, consequentemente,

reduzindo o custo computacional. Adicionalmente, o método é apropriado para realização de paralelização, uma vez que a simulação é composta por operações locais. O método possui algumas desvantagens, dentre elas, trata-se de um método explícito no tempo (limitando a utilização de incrementos elevados) e, geralmente, requer maior custo computacional em relação aos métodos tradicionais.

Particularmente para o estudo numérico da formação de bolhas em superfícies aquecidas, vários trabalhos foram publicados na literatura utilizando o referido método. Entretanto, os trabalhos publicados exploraram condições de simulação semelhantes e não procuraram obter os parâmetros de simulação baseados em condições reais, associadas a experimentos com fluidos específicos. Neste sentido, a principal motivação do trabalho é o preenchimento de lacunas na aplicação do método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais para o estudo numérico da formação de bolhas em superfícies aquecidas. Este método numérico foi escolhido principalmente pela simplicidade de sua formulação, vantagem esta em relação aos métodos baseados em técnicas DFC tradicionais.

1.2 Objetivos e escopo da tese

Esta tese tem como objetivo geral a realização de simulações numéricas bidimensionais da formação de bolhas em superfícies aquecidas empregando-se o Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais. Inicialmente são empregados parâmetros da literatura para as simulações, considerando variadas condições. Posteriormente, simulações são realizadas em condições distintas das normalmente utilizadas na literatura, principalmente para temperaturas reduzidas inferiores a 0,86.

Os objetivos específicos, que conferem um certo grau de ineditismo ao presente trabalho, são:

- Análise da influência de propriedades termofísicas do fluido sobre o ciclo de uma bolha utilizando dados da literatura.
- Análise da influência de parâmetros e propriedades termofísicas do fluido sobre a curva de ebulição utilizando dados da literatura.
- Realização de simulações em temperaturas reduzidas inferiores às reportadas na literatura aberta ($T_r < 0,8$)
- Proposição de um modelo para obtenção dos parâmetros de simulação em unidades de *lattice* basendo-se em parâmetros do sistema internacional;
- Aplicação do modelo de obtenção dos parâmetros de simulação em unidades de *lattice* para o fluido HFE-7100.

Por meio destas contribuições, espera-se complementar a área experimental de estudos de escoamentos bifásicos com mudança de fase já consolidada no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da EESC/USP.

A distribuição dos capítulos desta tese é realizada da seguinte forma:

- No capítulo 2 é apresentada uma revisão bibliográfica focada na aplicação do Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais.
- No capítulo 3 é apresentado o modelo numérico do Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais a ser utilizado nesta tese, bem como o modelo de definição de parâmetros em unidades de *lattice*.
- No capítulo 4 são apresentados resultados do ciclo de uma bolha e da obtenção de curvas de ebulição utilizando dados da literatura. Posteriormente, emprega-se o modelo de definição de parâmetros para o fluido HFE-7100 em duas temperaturas reduzidas.
- No capítulo 5 são apresentadas as conclusões obtidas com base no estudo realizado nesta tese, bem como sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo será apresentada a revisão bibliográfica sobre o método de *Lattice* Boltzmann e temas correlatos.

2.1 Descrição de um fluido em diferentes escalas

Um fluido, fisicamente, é composto por um grande conjunto de átomos ou moléculas que colidem umas com as outras, movendo-se de maneira randômica. A dinâmica microscópica das moléculas que compõem o fluido é complexa, principalmente pela natureza das descontinuidades existentes (GUO; SHU, 2013). Por outro lado, a descrição macroscópica de um fluido é relativamente mais simples, uma vez que o fluido é tratado como um meio contínuo. Outra alternativa é a descrição baseada na escala mesoscópica, cuja dinâmica de uma coleção de partículas é analisada. O Método de *Lattice* Boltzmann baseia-se na descrição mesoscópica por meio da Teoria Cinética do gases. A fundamentação teórica das possíveis formas de descrições de um fluido será apresentada a seguir.

2.1.1 Descrição microscópica: dinâmica molecular

Na descrição microscópica, o movimento de cada molécula é obtido por meio da 2ª Lei de Newton (GUO; SHU, 2013):

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{j=1, j \neq i}^N (\mathbf{f}_{ij}) + \mathbf{G}_i \quad (2.1)$$

Na Equação 2.1, m é a massa da molécula, $\mathbf{r}_i$ é o vetor posição, t é o tempo, N é o número de moléculas, $\mathbf{f}_{ij}$ corresponde à força exercida pela molécula j sobre a molécula i e $\mathbf{G}_i$ corresponde às forças externas. As forças intermoleculares podem ser calculadas por meio do gradiente de uma função potencial $\Theta(|\mathbf{r}_i|)$ (RAPAPORT, 2004):

$$\mathbf{f}_{ij} = -\nabla \Theta(|\mathbf{r}_i|) \quad (2.2)$$

Pode-se, por exemplo, empregar o Potencial 12-6 de Lennard-Jones (RAPAPORT, 2004), considerando $|\mathbf{r}_i| = r$:

$$\Theta(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\varrho}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\varrho}{r} \right)^6 \right] \quad (2.3)$$

Na Equação 2.3, ε corresponde profundidade do poço de potencial e ϱ corresponde à distância finita na qual o potencial interpartícula é zero. A solução da Equação 2.1 fornece a posição e velocidade de cada molécula em todo instante de tempo. Por meio

destas grandezas, as variáveis macroscópicas (densidade, velocidade e temperatura) podem ser obtidas diretamente por meio de uma média de conjunto das variáveis microscópicas (GUO; SHU, 2013; RAPAPORT, 2004).

A grande desvantagem na aplicação prática da simulação em escala microscópica, também conhecida por dinâmica molecular, está associada ao elevado número de variáveis a serem resolvidas. Mesmo para um pequeno volume de fluido, a simulação torna-se proibitiva em termos de custo computacional.

2.1.2 Descrição macroscópica

A descrição macroscópica assume que o fluido é um meio contínuo, de modo que as propriedades moleculares são traduzidas por meio de coeficientes de transporte. Nesta descrição, o movimento do fluido é descrito por meio de um conjunto de equações diferenciais em derivadas parciais, denominadas equações de conservação do fluido (BATCHELOR, 2000):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} e) = -\nabla \cdot \mathbf{q}'' - p \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{\Gamma} : \nabla \mathbf{v} \quad (2.6)$$

Na Equação 2.5, p é a pressão, $\mathbf{\Gamma}$ é o tensor da tensão viscosa e na Equação 2.6, e é a energia interna específica e $\mathbf{q}''$ é o fluxo de calor. Este sistema de equações não é completamente determinado, pois expressões para a pressão e o fluxo de calor são desconhecidas. A pressão poderia, em princípio, ser calculada por meio de uma equação de estado enquanto o tensor da tensão viscosa pode ser modelado por meio de uma equação constitutiva, que relaciona a tensão viscosa e a taxa de deformação do fluido:

$$\mathbf{\Gamma} = 2\mu \mathbf{S} + \left[\left(\mu' - \frac{2}{3}\mu \right) \nabla \cdot \mathbf{v} \right] \mathbf{I} \quad (2.7)$$

Na Equação 2.7, μ é a viscosidade dinâmica, μ' é a viscosidade volumétrica, $\mathbf{I}$ é o tensor unitário de segunda ordem e $\mathbf{S}$ é o tensor deformação, definido por $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T)$. Por fim, o fluxo de calor pode ser calculado por meio da Lei de Fourier:

$$\mathbf{q}'' = -k \nabla T \quad (2.8)$$

Na Equação 2.8, k é a condutividade térmica do fluido e T é o campo de temperaturas.

2.1.3 Descrição mesoscópica baseada na teoria cinética: equação de Boltzmann

A abordagem mesoscópica baseada na teoria cinética descreve o comportamento de um fluido por meio da função distribuição probabilística no espaço de fases, f_N , que determina a probabilidade de um conjunto de partículas possuam velocidade e posição em respectivos intervalos infinitesimais, no espaço de fases com dimensão $6N$. A partir da função distribuição são obtidas as propriedades estatísticas do conjunto de partículas e, posteriormente, as grandezas macroscópicas associadas. De modo geral, a evolução desta função distribuição é dada pela Equação de Liouville (GUO; SHU, 2013):

$$\frac{\partial f_N(\mathbf{z}_{1j}, t, \mathbf{z}_{2j})}{\partial t} + \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{z}_{1j}} \frac{d\mathbf{z}_{1j}}{dt} + \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{z}_{2j}} \frac{d\mathbf{z}_{2j}}{dt} \right] = 0 \quad (2.9)$$

Na Equação 2.9, $\mathbf{z}_{1j}$ e $\mathbf{z}_{2j}$ correspondem à coordenada generalizada e ao momentum generalizado, respectivamente, tradicionalmente empregadas na Dinâmica de Lagrange. A partir da Equação de Liouville (Equação 2.9), por meio da redefinição da função distribuição $f_N(\mathbf{z}_{1j}, t, \mathbf{z}_{2j})$, considerando a hierarquia BBGKY (Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon), pode-se obter uma forma reduzida da função distribuição, denominada $F_s(\mathbf{z}_{1j}, t, \mathbf{z}_{2j})$ (GUO; SHU, 2013):

$$F_s(\mathbf{z}_{1j}, t, \mathbf{z}_{2j}) = \int f_N(\mathbf{z}_{1j}, t, \mathbf{z}_{2j}) d\mathbf{z}_{1j} d\mathbf{z}_{2j} \quad (2.10)$$

Assim como a Equação de Liouville, a forma reduzida da função distribuição, F_s , resulta um sistema de equações de elevada complexidade, de modo que o sistema deve ser simplificado para que seja possível obter soluções de interesse prático. Particularmente, uma aproximação de primeira ordem da Equação 2.10 resulta na função distribuição $f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$, denominada função distribuição de Boltzmann (GUO; SHU, 2013):

$$f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) = mN F_s(\mathbf{z}_{11}, t, \mathbf{z}_{21}) \quad (2.11)$$

Na Equação 2.11, as coordenadas são transformadas do espaço de momentos para o espaço de velocidade, $\boldsymbol{\xi}$.

De acordo com Wolf-Gladrow (2000), a relação entre a equação de Boltzmann e as equações de Navier-Stokes tornou-se um tema de pesquisa que vem recebendo muita atenção na comunidade acadêmica. A equação de Boltzmann possui um papel fundamental na teoria cinética dos gases e relaciona a evolução temporal e espacial de um conjunto de partículas com um determinado operador de colisão. Este último descreve a evolução das interações entre partículas que ocorrem por meio de colisões binárias (GOMBOSI, 1994). Do ponto de vista matemático, as partículas são modeladas utilizando uma função de distribuição, $f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$, que descreve as partículas na posição $\mathbf{x} = [x_1, x_2, x_3]$, em um

determinado tempo t e com velocidade $\boldsymbol{\xi} = [\xi_1, \xi_2, \xi_3]$. A equação de Boltzmann é expressa por:

$$\frac{\partial f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \frac{\partial f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \Omega[f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})] \quad (2.12)$$

A equação de Boltzmann pode ser interpretada como uma equação de advecção da função distribuição $f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$, a partir dos dois primeiros termos do lado esquerdo. O terceiro termo, $\frac{\mathbf{F}}{m}$, representa o efeito de uma força externa por unidade de massa que atua nas partículas, alterando sua velocidade. O termo presente do lado direito, denominado operador colisão, representa a redistribuição de $f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$ devido às colisões e pode ser visto como um termo fonte.

O operador colisão, $\Omega[f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})]$, pode ser expresso de forma generalizada pela Equação 2.13, conforme Cercignani (1988):

$$\Omega[f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})] = \int_{R^3} \int_{S^2} B(\mathbf{V}, \mathbf{w}, \mathbf{e}) [f(\mathbf{V}') f(\mathbf{w}') - f(\mathbf{V}) f(\mathbf{w})] d\mathbf{e} d\mathbf{w} \quad (2.13)$$

Na Equação 2.13, o domínio de integração corresponde ao espaço de velocidades R^3 e na esfera unitária S^2 , $\mathbf{V}$ e $\mathbf{w}$ correspondem às velocidades antes da colisão e $\mathbf{V}'$ e $\mathbf{w}'$ correspondem às velocidades das partículas após a colisão. O termo $B(\mathbf{V}, \mathbf{w}, \mathbf{e})$ corresponde ao kernel de colisão. Essa função descreve a probabilidade que uma partícula que se move com velocidade $\mathbf{V}$ e colide com uma partícula com velocidade $\mathbf{w}$ seja refletida na direção $\mathbf{e} = \frac{\mathbf{V} - \mathbf{V}'}{|\mathbf{V} - \mathbf{V}'|}$. As velocidades após as colisões são expressas pelas relações a seguir (CERCIGNANI, 1988):

$$\mathbf{V}' = \mathbf{V} + \mathbf{e}[\mathbf{e} \cdot (\mathbf{w} - \mathbf{V})] \quad (2.14)$$

$$\mathbf{w}' = \mathbf{w} - \mathbf{e}[\mathbf{e} \cdot (\mathbf{w} - \mathbf{V})] \quad (2.15)$$

As colisões entre partículas conservam massa, momentum e energia. As relações que simbolizam essas equações de conservação são denominadas invariantes de colisão (GUO; SHU, 2013). Matematicamente, estas relações são expressas por:

$$\int_{R^3} \Omega[f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})] d^3 \boldsymbol{\xi} = 0 \quad (2.16)$$

$$\int_{R^3} \boldsymbol{\xi} \Omega[f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})] d^3 \boldsymbol{\xi} = 0 \quad (2.17)$$

$$\int_{R^3} |\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}|^2 \Omega[f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})] d^3 \boldsymbol{\xi} = 0 \quad (2.18)$$

As grandezas macroscópicas são obtidas por meio de procedimentos de média da função de distribuição, $f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$ (CERCIGNANI, 1988). O campo de densidades $\rho(\mathbf{x}, t)$ é definido por:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{R^3} f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) d^3 \boldsymbol{\xi} \quad (2.19)$$

A velocidade do fluido, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, é obtida por:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \int_{R^3} \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) d^3 \boldsymbol{\xi} \quad (2.20)$$

O campo de temperaturas local, $T(\mathbf{x}, t)$, é obtido por:

$$T(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \int_{R^3} |\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}|^2 f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) d^3 \boldsymbol{\xi} \quad (2.21)$$

O tensor pressão e o fluxo de calor também podem ser obtidos por meio da função distribuição, conforme Equações 2.22 e 2.23, respectivamente:

$$\mathbf{P} = \int_{R^3} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) d^3 \boldsymbol{\xi} \quad (2.22)$$

$$\mathbf{q}'' = \int_{R^3} \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}|^2}{2} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) d^3 \boldsymbol{\xi} \quad (2.23)$$

A função de distribuição que satisfaz a relação $\Omega[f(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})] = 0$ é denominada função de distribuição de Maxwell-Boltzmann, simbolicamente dada por $f^{eq}(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi})$. Esta descreve a condição de equilíbrio do gás e é expressa pela relação a seguir (GUO; SHU, 2013):

$$f^{eq}(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{[2\pi RT(\mathbf{x}, t)]^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{-|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}|^2}{2RT(\mathbf{x}, t)}} \quad (2.24)$$

Pela sua natureza cinética, a equação de Boltzmann fornece uma representação mais realista e geral para escoamentos em comparação com as equações de Navier-Stokes, uma vez que a primeira não se baseia na hipótese do contínuo. Assim, sua aplicação numérica pode ser realizada para condições em que as equações macroscópicas não são válidas, como para um maior do número de Knudsen. O número de Knudsen, Kn , é um

parâmetro adimensional dado pela razão entre o caminho livre médio das moléculas e a escala de comprimento associada ao escoamento. Apesar desta vantagem em termos de simulação numérica, os métodos de DFC tradicionais (diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos e outros) são mais empregados que o Método de *Lattice* Boltzmann. Isso ocorre principalmente porque a solução da equação de Boltzmann é complicada, sobretudo devido à complexidade do operador de colisão.

2.2 Discretização da equação de Boltzmann

A equação de Boltzmann, dada pela Equação 2.12, é uma equação integro-diferencial de 7 dimensões e complicada de ser resolvida. A discretização da equação de Boltzmann, que resultará no modelo numérico de *Lattice* Boltzmann, é realizada em três frentes distintas. Primeiramente, a função distribuição de equilíbrio (Equação 2.24) é discretizada. Posteriormente, o espaço de velocidades é discretizado, pela introdução dos esquemas de velocidade discreta. Por fim, as discretizações espacial e temporal são realizadas. Por simplicidade, o termo de força externa, $\mathbf{F}_i$, será desconsiderado. Posteriormente serão apresentados esquemas para inclusão do efeito de forças externas no método numérico empregado nesta tese.

A discretização baseia-se, inicialmente, na expansão em série de Taylor da função distribuição de equilíbrio em termos da velocidade do fluido (GUO; SHU, 2013):

$$f^{eq}(\mathbf{x}, t, \boldsymbol{\xi}) = \frac{\rho(\mathbf{x}, t)}{[2\pi RT(\mathbf{x}, t)]^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{-|\boldsymbol{\xi}|^2}{2RT(\mathbf{x}, t)}} \left[1 + \frac{\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{v}}{RT(\mathbf{x}, t)} + \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{v})^2}{2RT(\mathbf{x}, t)} + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2RT(\mathbf{x}, t)} \right] \quad (2.25)$$

Na Equação 2.25, a aproximação realizada é válida para números de Mach reduzidos, ou seja, $Ma = \frac{|\mathbf{v}|}{c_s} = \frac{|\mathbf{v}|}{\sqrt{RT}} \ll 1$, sendo c_s a velocidade do som para a condição de escoamento isotérmico.

A discretização da equação de Boltzmann no espaço de velocidades é realizada conforme os trabalhos de Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986), Qian, D’humieres e Lalleman (1992), Qian e Orszag (1993). Esta discretização baseia-se na aproximação do espaço de velocidades, $\boldsymbol{\xi}$, por um conjunto de velocidades discretas $\mathbf{c}_i$ que devem respeitar as equações de conservação, sendo i a numeração da direção da velocidade discreta (a ser apresentada). O algoritmo é desenvolvido assumindo que as partículas se movem de um sítio para outro, e após um intervalo de tempo Δt , elas se encontram no sítio vizinho. Isso é garantido se o espaçamento entre os sítios, com distância Δx , for uniforme e se as velocidades discretas forem múltiplas de $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ (KRÜGER et al., 2017).

Para a recuperação das equações de Navier-Stokes faz-se necessário que as velocidades discretas sejam escolhidas de forma que coincidam com as seguintes quadraturas de

Hermite ($0 \leq k \leq 3$) (GUO; SHU, 2013):

$$\int \xi^k f^{eq}(\mathbf{x}, t, \xi) d\xi = \sum_i w_i \mathbf{c}_i^k f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) \quad (2.26)$$

Na Equação 2.26, w_i são fatores de ponderação e $\mathbf{c}_i = \frac{\xi_i}{\sqrt{3}}$ representa a redefinição da velocidade discreta da partícula (KRÜGER et al., 2017). Dessa forma, obtém-se a forma discretizada da função distribuição de equilíbrio (HE; SHAN; DOOLEN, 1998):

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{v}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{v})^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{v}|^2}{2c_s^2} \right] \quad (2.27)$$

A partir da discretização no espaço de velocidades, tem-se que $f_i(\mathbf{x}, t) = w_i f(\mathbf{x}, t, \xi)$ e a equação de Boltzmann pode ser reescrita considerando que a população de partículas nos sítios é $f_i(\mathbf{x}, t)$ com velocidade discreta $\mathbf{c}_i$:

$$\frac{\partial f_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \frac{\partial f_i(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} = \Omega[f_i(\mathbf{x}, t)] \quad (2.28)$$

A partir da solução da equação discretizada é possível a obtenção dos campos de densidade e velocidade, na forma discreta, que são dados pela Equações 2.29 e 2.30, respectivamente:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.29)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_i \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t)}{\rho(\mathbf{x}, t)} \quad (2.30)$$

A determinação da temperatura poderia, a princípio, ser obtida por meio da Equação 2.21. Porém, conforme será apresentado posteriormente, para solução de problemas que envolvem transferência de calor, pode-se empregar outra função distribuição, $g_i(\mathbf{x}, t)$, para resolver a equação de conservação da energia ou ainda aplicar outro método numérico.

A denominação dos modelos de velocidade discreta (esquemas de velocidade) é feita utilizando a notação $DdQq$, conforme Qian, D’humieres e Lalleman (1992), em que d corresponde a dimensão do esquema e Q corresponde ao número de velocidades discretas. Para simulações unidimensionais pode ser citado o modelo $D1Q3$, apresentado na Figura 2.

Para simulações bidimensionais podem ser citados os modelos $D2Q4$ e $D2Q9$. O primeiro possui 4 velocidades discretas e o segundo possui 9. A Figura 3 apresenta o modelo $D2Q9$. Para simulações tridimensionais podem ser citados os modelos $D3Q15$,

Figura 2 – Esquema de discretização D1Q3

D1Q3

Fonte: Adaptado de (KRÜGER et al., 2017)

Figura 3 – Esquema de discretização D2Q9

D2Q9

Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017)

$D3Q19$ e $D3Q27$. O primeiro possui 15 velocidades, 19 e o último possui 27. Estes são apresentados na Figura 4.

A definição dos modelos discretos baseia-se na obtenção dos fatores de ponderação, w_i , e da velocidade do som, c_s , para cada esquema. Baseando-se na metodologia introduzida por Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986), os esquemas devem garantir a conservação da massa, quantidade de movimento e a isotropia. Isto requer que algumas relações sejam ser cumpridas. Por simplicidade, emprega-se a notação de Newton (notação indicial) para a representação destas relações, conforme Rutherford (1962):

$$\sum_i w_i = 1 \quad (2.31)$$

Figura 4 – Esquema de discretização D3Q15, D3Q19 e D3Q27

Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017)

$$\sum_i w_i c_{i\alpha} = 0 \quad (2.32)$$

$$\sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} = c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (2.33)$$

$$\sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} = 0 \quad (2.34)$$

$$\sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\lambda} = c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\lambda} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\lambda} + \delta_{\alpha\lambda} \delta_{\beta\gamma}) \quad (2.35)$$

$$\sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\lambda} c_{i\zeta} = 0 \quad (2.36)$$

De acordo com Qian, D’humieres e Lalleman (1992), os fatores de ponderação, w_i , devem ser positivos pois, do contrário, não é garantida a conservação da quantidade de movimento. A Tabela 1 apresenta os fatores de ponderação, os vetores velocidade discretos e demais características para os esquemas anteriores. Para todos os esquemas apresentados têm-se $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

Tabela 1 – Grandezas dos esquemas de velocidade

Modelo	Vetor velocidade discreta $\mathbf{c}_i$	Número	Módulo $ \mathbf{c}_i $	Fator de ponderação w_i
D1Q3	(0)	1	0	2/3
	(± 1)	2	1	1/6
D2Q9	(0,0)	1	0	4/9
	($\pm 1, 0$), ($0, \pm 1$)	4	1	1/9
	($\pm 1, \pm 1$)	4	2	1/36
D3Q15	(0,0,0)	1	0	2/9
	($\pm 1, 0, 0$), ($0, \pm 1, 0$), ($0, 0, \pm 1$)	6	1	1/9
	($\pm 1, \pm 1, \pm 1$)	8	3	1/72
D3Q19	(0,0,0)	1	0	1/3
	($\pm 1, 0, 0$), ($0, \pm 1, 0$), ($0, 0, \pm 1$)	6	1	1/18
	($\pm 1, \pm 1, 0$), ($\pm 1, 0, \pm 1$), ($0, \pm 1, \pm 1$)	12	2	1/36
D3Q27	(0,0,0)	1	0	8/27
	($\pm 1, 0, 0$), ($0, \pm 1, 0$), ($0, 0, \pm 1$)	6	1	2/27
	($\pm 1, \pm 1, 0$), ($\pm 1, 0, \pm 1$), ($0, \pm 1, \pm 1$)	12	2	1/54
	($\pm 1, \pm 1, \pm 1$)	8	3	1/216

Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017)

A integração da Equação 2.28, por meio do método das características (POLYANIN, 2002), resulta na equação de *Lattice Boltzmann* discretizada no espaço e no tempo, dada pela Equação 2.37 (KRÜGER et al., 2017):

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \int_0^{\Delta t} \Omega[f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Psi, t + \Psi)] d\Psi \quad (2.37)$$

Procede-se para uma aproximação da integral da Equação 2.37, ou seja, do termo de colisão. De acordo com Krüger et al. (2017), as discretizações de 1^a e 2^a ordens para este termo resultam na mesma equação evolutiva para a função distribuição:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t \Omega_i[f_i(\mathbf{x}, t)] \quad (2.38)$$

A Equação 2.38 é denominada Equação de *Lattice Boltzmann*. O operador de colisão mais simples é denominado BGK e foi proposto por Bhatnagar, Gross e Krook (1954). A formulação baseia-se em considerar somente uma relaxação temporal entre a função distribuição e a função de equilíbrio. Outras formulações para o operador colisão podem ser utilizadas, por exemplo, o operador TRT (*Two relaxation times*) utiliza duas relaxações temporais, enquanto o operador MRT (*Multiple Relaxation Times*) emprega distintas relaxações temporais. Por simplicidade, o operador BGK será considerado para apresentação da formulação do Método de *Lattice Boltzmann* e posteriormente o operador MRT será apresentado.

Considerando o operador BGK, a Equação de *Lattice Boltzmann* pode ser expressa pela Equação 2.39:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\omega_{BGK} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \Delta t \quad (2.39)$$

Na Equação 2.39, τ é o tempo de relaxação temporal e $\omega_{BGK} = \frac{1}{\tau}$ é a frequência de relaxação temporal. O lado direito da Equação 2.39 representa a tendência da função distribuição $f_i(\mathbf{x}, t)$ de aproximar-se da função distribuição na condição de equilíbrio, ou seja, $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$. Nota-se também que todas as populações são relaxadas considerando um mesmo tempo de relaxação.

O operador MRT (*Multiple Relaxation Time*) consiste em realizar a operação de colisão no espaço de momentos, por meio uma transformação linear: $\mathbf{m} = \mathbf{M} \mathbf{f}$, sendo $\mathbf{M}$ uma matriz de transformação linear. A vantagem de realizar a operação de colisão no espaço de momentos é a possibilidade de realizar a relaxação temporal considerando diferentes parâmetros: $\bar{\omega} = (\bar{\omega}_0, \dots, \bar{\omega}_{q-1})^T$, em que q é o número de velocidades discretas do esquema utilizado. Desta forma, diferentemente do operador BGK, as populações podem ser relaxadas com diferentes tempos de relaxação. As frequências de relaxação podem ser expressas na forma matricial, conforme a Equação 2.40:

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \bar{\omega}_0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \bar{\omega}_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \bar{\omega}_{q-1} \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

Após a operação de colisão, os momentos são transformados para o espaço de velocidades por meio de uma transformação inversa. Desta forma, a Equação de *Lattice Boltzmann* com operador MRT pode ser representada pela Equação 2.41:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda} [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)] \Delta t \quad (2.41)$$

Na Equação 2.41, $\mathbf{f}$ é a forma vetorial da função distribuição e $\mathbf{m}^{eq} = \mathbf{M} \mathbf{f}^{eq}$ é o respectivo momento na condição de equilíbrio. A matriz de transformação, $\mathbf{M}$, depende do esquema de velocidades e do procedimento escolhido. Na literatura, dois procedimentos podem ser utilizados para obtenção da matriz: polinômios de Hermite e procedimento de Gram-Schmidt (KRÜGER et al., 2017).

Somente o procedimento de Gram-Schmidt será apresentado, por ser o mais utilizado na literatura. A idéia do procedimento é a construção de um conjunto de vetores ortogonais para compôr a matriz $\mathbf{M}$. Para o esquema de velocidades D2Q9, o conjunto de vetores

ortogonais são dados em termos da notação $\mathbf{M}_i^A$, com $i = \{1, \dots, 9\}$ e o sobrescrito A corresponde à identificação da grandeza associada (KRÜGER et al., 2017):

$$\mathbf{M}_i^p = 1 \quad (2.42)$$

$$\mathbf{M}_i^e = -4 + 3 \left(c_{ix}^2 + c_{iy}^2 \right) \quad (2.43)$$

$$\mathbf{M}_i^{e'} = 4 - \frac{21}{2} \left(c_{ix}^2 + c_{iy}^2 \right) + \frac{9}{2} \left(c_{ix}^2 + c_{iy}^2 \right)^2 \quad (2.44)$$

$$\mathbf{M}_i^{j_x} = c_{ix} \quad (2.45)$$

$$\mathbf{M}_i^{q_x} = \left[-5 + 3 \left(c_{ix}^2 + c_{iy}^2 \right) \right] c_{ix} \quad (2.46)$$

$$\mathbf{M}_i^{j_y} = c_{iy} \quad (2.47)$$

$$\mathbf{M}_i^{q_y} = \left[-5 + 3 \left(c_{ix}^2 + c_{iy}^2 \right) \right] c_{iy} \quad (2.48)$$

$$\mathbf{M}_i^{P_{xx}} = c_{ix}^2 - c_{iy}^2 \quad (2.49)$$

$$\mathbf{M}_i^{P_{xy}} = c_{ix} c_{iy} \quad (2.50)$$

Nas equações anteriores, j_x e j_y são as componentes do fluxo de momentum, q_x e q_y são fluxos de energia, e e e' correspondem à energia e ao quadrado da energia (*energy squared*), respectivamente, e P_{xx} e P_{xy} são as componentes do tensor pressão. A matriz

de transformação $\mathbf{M}$ para o referido esquema de velocidades é dada pela Equação 2.51 (KRüGER et al., 2017):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}^\rho \\ \mathbf{M}^e \\ \mathbf{M}^{e'} \\ \mathbf{M}^{j_x} \\ \mathbf{M}^{q_x} \\ \mathbf{M}^{j_y} \\ \mathbf{M}^{q_y} \\ \mathbf{M}^{p_{xx}} \\ \mathbf{M}^{p_{xy}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.51)$$

2.3 Solução da Equação de *Lattice Boltzmann*

Uma análise das Equações 2.39 e 2.41 permite separar a solução da equação de *Lattice Boltzmann* em duas etapas: o operação de colisão (*collision*) das partículas simuladas e operação de transmissão (*streaming*). Considerando o operador BGK, estas operações são representadas pelas Equações 2.52 e 2.53:

$$f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (2.52)$$

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}, t) \quad (2.53)$$

Na equação 2.52, o termo $f_i^*(\mathbf{x}, t)$ representa a função distribuição das partículas simuladas após a operação de colisão. A representação esquemática das operações mencionadas anteriormente (colisão e transmissão), em termos das partículas simuladas, é mostrada na Figura 5. Cabe ressaltar que a operação de transmissão caracteriza o avanço temporal, em que $t \rightarrow t + \Delta t$.

Considerando o operador MRT, as operações de colisão e transmissão são representadas pelas Equações 2.54 e 2.55:

$$\mathbf{m}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{\Lambda} [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)] \Delta t \quad (2.54)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{m}^*(\mathbf{x}, t) \quad (2.55)$$

A Figura 6 apresenta as operações relacionadas à solução da Equação de *Lattice Boltzmann* com o operador MRT.

Figura 5 – Representação esquemática dos processos de colisão (à esquerda) e transmissão (à direita) para o operador BGK

Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017)

Figura 6 – Representação esquemática dos processos de colisão e transmissão para o operador MRT

Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017)

2.4 Expansão de Chapman-Enskog

A expansão de Chapman-Enskog (CHAPMAN; COWLING, 1970) corresponde a um método para obtenção das equações de conservação em escala macroscópica a partir da Equação de Boltzmann e foi obtida independentemente por Sydney Chapman (1888-1970) e David Enskog (1884-1947). Desta forma, demonstra-se a aplicabilidade da Equação de *Lattice* Boltzmann para simulação do comportamento de fluidos. Por simplicidade, a formulação com operador BGK será considerada nesta seção. Posteriormente, os resultados obtidos para o expansão com o operador MRT serão apresentados.

2.4.1 Obtenção das Equações de Navier-Stokes

Matematicamente, a expansão de Chapman-Enskog permite relacionar a função de distribuição, $f_i(\mathbf{x}, t)$, em torno da função de distribuição de equilíbrio, $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$, a partir do número de Knudsen, Kn , (KRÜGER et al., 2017):

$$f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + Kn f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + Kn^2 f_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) + \dots \quad (2.56)$$

Pela Equação 2.56 nota-se que, para baixos números de Knudsen ($Kn \ll 1$), a função de distribuição $f_i(\mathbf{x}, t)$ pode ser aproximada pela função de distribuição de equilíbrio $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$. Além disso, de acordo com Guo e Shu (2013), cada ordem de aproximação em termos de Kn possibilita a obtenção de uma equação de conservação independente. De acordo com Krüger et al. (2017), para a simulação das equações de Navier-Stokes, faz-se necessária a utilização dos dois primeiros termos da Equação 2.56, de modo que basta analisar as componentes de $f_i(\mathbf{x}, t)$ da ordem de $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ e $f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t)$.

O operador colisão deve satisfazer as equações de conservação da massa e quantidade de movimento (CERCIGNANI, 1988). Matematicamente, isso é traduzido por meio das Equações 2.57 e 2.58, respectivamente:

$$\sum_i [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] = 0 \quad (2.57)$$

$$\sum_i \mathbf{c}_i [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] = 0 \quad (2.58)$$

Adicionalmente, as seguintes relações devem ser respeitadas para os distintos termos da expansão, $n \geq 1$, (GUO; SHU, 2013):

$$\sum_i f_i^{(n)}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.59)$$

$$\sum_i \mathbf{c}_i f_i^{(n)}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (2.60)$$

A expansão em série de Taylor de $f_i(\mathbf{x}, t)$ aplicada à Equação 2.52 e considerando a expansão de Chapman-Enskog (Equação 2.56) tem-se:

$$\Delta t(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)^2 f_i(\mathbf{x}, t) + O(\Delta t^3) = -\frac{\Delta t}{\tau}[Kn f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + Kn^2 f_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) + \dots] \quad (2.61)$$

A Equação 2.61 pode ser simplificada aplicando-se o operador $\frac{\Delta t}{2}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)$ à Equação 2.61 e subtraindo-se a mesma da equação obtida, de modo a eliminar a segunda derivada. Neste caso, obtém-se a seguinte expressão:

$$\Delta t(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau}[Kn f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + Kn^2 f_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) + \dots] + \frac{\Delta t^2}{2\tau}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)[Kn f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) + \dots] \quad (2.62)$$

Consideram-se as expansões das derivadas temporal e espacial em termos do número de Knudsen, Kn , dadas pelas Equações 2.63 e 2.64, respectivamente:

$$\Delta t \partial_t f_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t(Kn \partial_t^{(1)} f_i(\mathbf{x}, t) + Kn^2 \partial_t^{(2)} f_i(\mathbf{x}, t) + \dots) \quad (2.63)$$

$$\Delta t c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t[Kn c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)} f_i(\mathbf{x}, t)] \quad (2.64)$$

Por fim, estas relações anteriores são aplicadas à Equação 2.62, possibilitando a obtenção de duas equações em termos das grandezas associadas às diferentes ordens do número de Knudsen, Kn :

$$O(Kn) : [\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}] f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) \quad (2.65)$$

$$O(Kn^2) : \partial_t^{(2)} f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) [\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}] f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) \quad (2.66)$$

A partir deste ponto, os campos macroscópicos $\rho(\mathbf{x}, t)$ e $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = [v_x, v_y, v_z]$ serão representados de forma simplificada por ρ e $\mathbf{v}$, respectivamente.

Os momentos de ordem zero, um e dois são definidos pelas expressões obtidas pela multiplicação de 1, $c_{i\alpha}$, $c_{i\alpha\beta}$ nas Equações 2.65 e 2.66, seguida da operação de somatório

em i em ambos os lados da equações. Para a Equação 2.65, que corresponde aos termos da ordem de Kn , obtém-se:

$$\partial_t^{(1)} \rho + \partial_\gamma^{(1)} (\rho v_\gamma) = 0 \quad (2.67)$$

$$\partial_t^{(1)} (\rho v_\alpha) + \partial_\beta^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{eq} = 0 \quad (2.68)$$

$$\partial_t^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{eq} + \partial_\gamma^{(1)} \Pi_{\alpha\beta\gamma}^{eq} = -\frac{1}{\tau} \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \quad (2.69)$$

Os respectivos momentos são dados pelas Equações 2.70, 2.71 e 2.72 (KRÜGER et al., 2017):

$$\Pi_{\alpha\beta}^{eq} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho v_\alpha v_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \quad (2.70)$$

$$\Pi_{\alpha\beta\gamma}^{eq} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \rho c_s^2 (v_\alpha \delta_{\beta\gamma} + v_\beta \delta_{\alpha\gamma} + v_\gamma \delta_{\alpha\beta}) \quad (2.71)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) \quad (2.72)$$

Um procedimento análogo ao aplicado para a Equação 2.66 é realizado de modo a obter-se os momentos de $O(Kn^2)$:

$$\partial_t^{(2)} \rho = 0 \quad (2.73)$$

$$\partial_t^{(2)} (\rho v_\alpha) + \partial_\beta^{(1)} \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = 0 \quad (2.74)$$

As Equações 2.67 e 2.73 e as Equações 2.68 e 2.74 podem ser re combinadas:

$$\left[Kn \partial_t^{(1)} + Kn^2 \partial_t^{(2)} \right] \rho + Kn \partial_\gamma^{(1)} (\rho v_\gamma) = 0 \quad (2.75)$$

$$\left[Kn \partial_t^{(1)} + Kn^2 \partial_t^{(2)} \right] (\rho v_\alpha) + Kn \partial_\beta^{(1)} \Pi_{\alpha\beta}^{eq} = -Kn^2 \partial_\beta^{(1)} \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \quad (2.76)$$

Nota-se que a Equação 2.75 corresponde à equação da continuidade e a Equação 2.76 corresponde, por semelhança, à equação de conservação da quantidade de movimento linear. Nesta condição, o tensor da tensão viscosa é dado pela Equação 2.77:

$$\Gamma_{\alpha\beta} = - \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) \Pi_{\alpha\beta}^{(1)} \quad (2.77)$$

Considerando a expansão da função distribuição de equilíbrio, $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$, para os termos de ordem de Kn^2 , o termo $\Pi_{\alpha\beta}^{(1)}$ pode ser expresso por (KRÜGER et al., 2017):

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = -\rho c_s^2 \tau \left[\partial_\beta^{(1)} v_\alpha + \partial_\gamma^{(1)} v_\beta \right] + \tau \partial_\gamma^{(1)} (\rho v_\alpha v_\beta v_\gamma) \quad (2.78)$$

Uma análise da Equação 2.78 revela que este tensor assemelha-se ao tensor da tensão viscosa da equação quantidade de movimento linear macroscópica, uma vez que os primeiros dois termos correspondem ao termo de taxa de deformação do fluido. O terceiro termo corresponde a um termo da $O(|\mathbf{v}|^3)$, que surge em virtude da aproximação realizada para a função distribuição de equilíbrio, $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$. Este termo torna-se desprezível para escoamentos em baixas velocidades, caracterizados por $Ma \ll 1$. Assim, o Método de *Lattice Boltzmann*, conforme apresentado, pode ser visto como um esquema para simulação de escoamentos em que os efeitos de compressibilidade possam ser desprezados, conforme Geller et al. (2006).

Por fim, conforme Krüger et al. (2017), inserindo a Equação 2.78 na Equação 2.76 e revertendo as expansões dadas pela Equações 2.63 e 2.64, demonstra-se que a solução da equação do Método de *Lattice Boltzmann* corresponde à solução das equações de Navier-Stokes:

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho v_\gamma) = 0 \quad (2.79)$$

$$\partial_t (\rho v_\alpha) + \partial_\beta (\rho v_\alpha v_\beta) = -\partial_\alpha (\rho c_s^2) + \partial_\beta [\mu (\partial_\beta v_\alpha + \partial_\alpha v_\beta)] \quad (2.80)$$

A partir da Equação 2.80, definem-se a pressão, p , a viscosidade dinâmica, μ , e a viscosidade volumétrica, μ' , dadas, respectivamente, pelas equações a seguir:

$$p = \rho c_s^2 \quad (2.81)$$

$$\mu = \rho c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (2.82)$$

$$\mu' = \frac{2}{3} \mu \quad (2.83)$$

Cabe notar que a relação da viscosidade volumétrica não aparece de forma explícita na Equação 2.80. Porém, a Equação 2.83 pode ser obtida por comparação com a equação da tensão viscosa macroscópica, dada pela Equação 2.7 (KRÜGER et al., 2017).

Em relação à Equação 2.81, nota-se que o Método de *Lattice* Boltzmann emprega uma equação de estado para relacionar a pressão e a massa específica. Particularmente, a equação apresentada caracteriza comportamento de gás ideal. Outra característica do Método de *Lattice* Boltzmann com operador BGK é que as viscosidades dinâmica e volumétrica não podem ser ajustadas pelos parâmetros do modelo de forma independente, conforme Equações 2.82 e 2.83. Trata-se de uma limitação do modelo com o operador BGK, que pode ser remediada com a utilização do operador MRT.

O procedimento da expansão de Chapman-Enskog aplicada para a equação de *Lattice* Boltzmann com o operador MRT é semelhante ao realizado para o operador BGK. Desta forma, apresenta-se somente a expressão final do tensor de tensão viscosa, de modo a evidenciar a diferença do operador MRT em relação ao operador BGK, desprezando-se os termos de $O(|\mathbf{v}|^3)$:

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \mu \left(\partial_\alpha v_\beta + \partial_\beta v_\alpha - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma v_\gamma \right) + \mu' \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma v_\gamma \quad (2.84)$$

Na Equação 2.84, as viscosidades dinâmica e volumétrica estão relacionadas às taxas de relaxação, respectivamente, por meio das equações a seguir (considerando o esquema de velocidades *D2Q9*):

$$\mu = \rho c_s^2 \left(\frac{1}{\bar{\omega}_7} - \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (2.85)$$

$$\mu' = \rho c_s^2 \left(\frac{1}{\bar{\omega}_1} - \frac{\Delta t}{2} \right) - \frac{\mu}{3} \quad (2.86)$$

Nota-se que o modelo com o operador MRT permite o ajuste das viscosidades dinâmica e volumétrica de forma independente, por meio dos parâmetros $\bar{\omega}_7$ e $\bar{\omega}_1$, respectivamente. Além desta vantagem, o modelo com o operador MRT é mais estável do ponto de vista numérico em relação ao modelo com o operador BGK (KRÜGER et al., 2017).

2.4.2 Obtenção da Equação de Conservação da Energia

Para a solução numérica da equação de conservação da energia, pode-se utilizar como estratégia uma segunda função distribuição, $g_i(\mathbf{x}, t)$. Similarmente ao apresentado para a função distribuição $f_i(\mathbf{x}, t)$, a equação evolutiva com o operador BGK é dada por:

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau_T} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (2.87)$$

Na Equação 2.87, τ_T é o tempo de relaxação temporal para a $g_i(\mathbf{x}, t)$.

Considerando que o campo de velocidades não é influenciado pelo campo de temperaturas, a equação de conservação da energia é linear em relação à velocidade. Desta forma, pode-se empregar uma formulação linear para a velocidade na função distribuição de equilíbrio $g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$, utilizando por simplicidade a notação $T(\mathbf{x}, t) \equiv T$:

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \omega_i T \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{v}}{c_s^2} \right] \quad (2.88)$$

Os momentos de equilíbrio de ordem zero, um e dois, neste caso, são respectivamente dados por Krüger et al. (2017):

$$\sum_i g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = T \quad (2.89)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = v_\alpha T \quad (2.90)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = c_s^2 T \delta_{\alpha\beta} \quad (2.91)$$

Analogamente ao apresentado anteriormente, tem-se $\sum_i g_i^{(n)} = 0$ para $n \geq 1$, embora $\sum_i c_{i\alpha} g_i^{(n)} \neq 0$, uma vez que $\sum_i c_{i\alpha} g_i$ não se conserva nas colisões (KRÜGER et al., 2017).

Aplicando-se a expansão em série de Taylor e expansão de Chapman-Enskog na Equação 2.87, podem ser separados os termos de ordem de Kn e Kn^2 , respectivamente:

$$O(Kn) : (\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}) g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_T} g_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) \quad (2.92)$$

$$O(Kn^2) : \partial_t^{(2)} g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + (\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}) \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_T} \right) g_i^{(1)}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_T} g_i^{(2)}(\mathbf{x}, t) \quad (2.93)$$

Os momentos de ordem zero e de primeira ordem da Equação 2.92 são dados por:

$$\partial_t^{(1)} T + \partial_\gamma^{(1)} (v_\gamma T) = 0 \quad (2.94)$$

$$\partial_\alpha^{(1)} (v_\alpha T) + c_s^2 \partial_\alpha T = -\frac{1}{\tau_T} \sum_i c_{i\alpha} g_i^{(1)} \quad (2.95)$$

A partir da Equação 2.95 pode-se obter $\sum_i c_{i\alpha} g_i^{(1)}$ explicitamente:

$$\sum_i c_{i\alpha} g_i^{(1)} = -\tau_T [\partial_t^{(1)}(v_\alpha T) + c_s^2 \partial_\alpha T] \quad (2.96)$$

O momento de ordem zero da Equação 2.93 pode ser expresso por:

$$\partial_t^{(2)} T + \partial_\gamma^{(1)} \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau_T} \right) \sum_i c_{i\alpha} g_i^{(1)} = 0 \quad (2.97)$$

Por fim, analogamente ao realizado na obtenção das Equações de Navier-Stokes, combinando a Equação 2.97 com a Equação 2.94, aplicando-se a Equação 2.96 e revertendo a expansão, obtém-se uma equação de conservação para o campo de temperaturas:

$$\partial_t T + \partial_\gamma (v_\gamma T) = \partial_\gamma (D \partial_\gamma T) + \partial_\alpha \left(\tau_T - \frac{\Delta t}{2} \right) \partial_t (v_\alpha T) \quad (2.98)$$

Na Equação 2.98, $D = c_s^2 \left(\tau_T - \frac{\Delta t}{2} \right)$ representa o coeficiente de difusão. O último termo da Equação 2.98 é um termo de erro associado às expansões realizadas. Assim como obtido na expansão de Chapman-Enskog para a função distribuição $f_i(\mathbf{x}, t)$, este termo torna-se desprezível para baixas velocidades, conforme demonstrado por [Chopard, Falcone e Latt \(2009\)](#). Neste estudo, os autores mostraram que o último termo da Equação 2.98 pode ser reescrito de acordo com a Equação 2.99, considerando a formulação para a função distribuição de equilíbrio é dada pela Equação 2.88.

$$\partial_\alpha \left(\tau_T - \frac{\Delta t}{2} \right) \partial_t (v_\alpha T) = -\frac{D}{c_s^2} |\mathbf{v}|^2 \nabla^2 T \quad (2.99)$$

Por fim, cabe ressaltar que o operador colisão MRT pode ser utilizado para resolver a equação evolutiva para a função distribuição $g_i(\mathbf{x}, t)$ ([LI; ZHOU; YAN, 2017](#)).

2.5 Esquemas para inclusão de forças externas

O Método de *Lattice Boltzmann* simula as equações de Navier-Stokes utilizando um esquema para escoamentos em que os efeitos de compressibilidade são desprezíveis. A inclusão de forças externas, $\mathbf{F}$, é realizada por meio da determinação de um termo fonte, $S_i(\mathbf{x}, t)$, a ser adicionado à operação de colisão. Considerando o operador BGK, a equação de *Lattice Boltzmann* com o termo fonte é dada por:

$$f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + S_i(\mathbf{x}, t) \Delta t \quad (2.100)$$

Na literatura podem ser citados os esquemas de [Luo \(1998\)](#), [He, Shan e Doolen \(1998\)](#), [Ladd e Verberg \(2001\)](#), [Guo, Zheng e Shi \(2002\)](#), [Kupershtokh, Medvedev e Karpov](#)

(2009). Estes esquemas serão apresentados a seguir. Por simplicidade, a seguinte notação será utilizada para o termo fonte: $S_i(\mathbf{x}, t) = S_i$.

O esquema proposto por Luo (1998) baseia-se na aplicação da expansão de Chapman-Enskog à equação de Boltzmann, sendo dado pela Equação 2.101:

$$S_i = w_i \left[\frac{1}{c_s^2} (c_{i\beta} - v_\beta) + \frac{1}{c_s^4} (c_{i\alpha} \cdot v_\alpha) c_{i\beta} \right] F_\beta \quad (2.101)$$

O esquema proposto por He, Shan e Doolen (1998) baseia-se na aproximação direta do termo associado à força externa por meio da função distribuição de equilíbrio $\mathbf{F} \cdot \nabla_\xi f \approx \mathbf{F} \cdot \nabla_\xi f^{eq} = -\mathbf{F} \cdot \left(\frac{\xi - \mathbf{v}}{c_s^2} \right) f^{eq}$. Desta forma, o esquema é dado pela Equação 2.102:

$$S_i = \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \frac{1}{\rho c_s^2} F_\beta (c_{i\beta} - v_\beta) f_i^{eq} \quad (2.102)$$

Na Equação 2.102, a velocidade deve ser corrigida considerando o efeito das forças externas:

$$v_\alpha = \sum_i f_i c_{i\alpha} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho} \quad (2.103)$$

Ladd e Verberg (2001) propuseram um esquema para inclusão de forças externas pela expansão em séries de potência da velocidade da partícula:

$$S_i = w_i \left[A + B_\beta \frac{1}{c_s^2} c_{i\beta} + C_{\alpha\beta} \frac{1}{2c_s^4} (c_{i\alpha} c_{i\beta}) - c_s^2 \delta_{\alpha\beta} \right] \quad (2.104)$$

Neste esquema, a velocidade também deve ser corrigida pela Equação 2.103. De acordo com os autores, os parâmetros A , B_β e $C_{\alpha\beta}$ são determinados por meio da Expansão de Chapman-Enskog.

Guo, Zheng e Shi (2002) propuseram uma modificação no esquema de Ladd e Verberg (2001), por meio da derivação das Equações de Navier-Stokes partindo da Equação de Boltzmann. De acordo com os autores, o esquema é dado pela Equação 2.105:

$$S_i = w_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{(c_{i\beta} - v_\beta)}{c_s^2} + \frac{c_{i\alpha} v_\alpha c_{i\beta}}{c_s^4} \right] F_\beta \quad (2.105)$$

Considerando o esquema dado pela Equação 2.105, a velocidade também deve ser corrigida pela Equação 2.103.

Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) desenvolveram um esquema denominado Método das Diferenças Exatas (*Exact Difference Method*), em que o termo a ser adicionado

na Equação do Método de *Lattice Boltzmann* é calculado com base em uma perturbação na função distribuição de equilíbrio:

$$S_i = f_i^{eq}(\rho, \mathbf{v}^{eq} + \Delta \mathbf{v}) - f_i^{eq}(\rho, \mathbf{v}^{eq}) \quad (2.106)$$

Na Equação 2.106, $\Delta \mathbf{v} = \frac{\mathbf{F}\Delta t}{\rho}$ e $\mathbf{v}^{eq} = \sum_i f_i c_{i\alpha}$ é denominada velocidade de equilíbrio. Neste esquema, a velocidade real do fluido deve ser corrigida por meio da Equação 2.107:

$$v_\alpha = v_\alpha^{eq} + \frac{F_\alpha \Delta t}{2\rho} \quad (2.107)$$

2.6 Método de *Lattice Boltzmann* dos pseudopotenciais

Nos últimos anos, o Método de *Lattice Boltzmann* tem sido empregado para modelagem e simulação de problemas em distintas áreas. Por exemplo, este método foi empregado por Pattison et al. (2008) para realizar simulações em magnetohidrodinâmica, especificamente para aplicações de escoamentos em regime permanente com baixo número de Prandtl magnético. Problemas de transferência de calor conjugada, ou seja, problemas em que a condução de calor no sólido e a convecção no fluido são estudadas de forma acoplada em um único domínio tem sido amplamente estudados utilizando o Método de *Lattice Boltzmann*. Por exemplo, Tarokh, Mohamad e Jiang (2013) realizaram um estudo da transferência de calor conjugada em um trocador de calor contra-corrente. A contribuição do artigo foi demonstrar que o problema pode ser simulado utilizando somente uma função de distribuição para a equação da energia para ambos domínios. Segundo os autores, dessa forma, a continuidade do fluxo de calor na interface é garantida automaticamente. Wang, Wang e Li (2007) realizaram um estudo semelhante, porém propuseram uma implementação generalizada do termo de geração de energia por unidade de volume no interior do sólido. Os resultados do modelo desenvolvido foram comparados com resultados de modelos disponíveis na literatura e a acurácia e a eficiência do modelo dos autores foram confirmadas.

Em relação à simulação de problemas multifásicos, os modelos numéricos podem ser divididos em relação à metodologia empregada para captura da interface, em modelos de interface discreta e modelos de interface difusa (KRÜGER et al., 2017). Para o primeiro, a interface é representada por meio de uma malha computacional e seu movimento é capturado de forma explícita, de modo que emprega-se a solução das equações governantes do escoamento em ambas fases (ou fluidos) separados pela interface. Estes modelos empregam as técnicas de DFC tradicionais, como o métodos *Volume of Fluid* e *Level Set*. Por outro lado, nos modelos de interface difusa, a interface é capturada diretamente por meio da inclusão de termos característicos nas equações governantes. Dessa forma, através da interface, tem-se uma variação suave das grandezas. Os modelos baseados no Método

de *Lattice Boltzmann* para solução de problemas multifásicos mais utilizados na literatura são de interface difusa.

De acordo com Krüger et al. (2017), nos modelos de interface discreta, os efeitos da tensão superficial são considerados por meio da implementação de uma força superficial, cuja formulação é dada por (ANDERSON; MCFADDEN; WHEELER, 1998):

$$\mathbf{F}_\gamma = \gamma \rho \nabla \nabla^2 \rho \quad (2.108)$$

Na Equação 2.108, γ representa a tensão superficial.

Na literatura estão reportados vários trabalhos envolvendo simulações com o Método de *Lattice Boltzmann* aplicado a escoamentos multifásicos. Esses modelos de simulação de escoamentos podem ser divididos em: modelo de gradiente de cores (*color-gradient model*) proposto por Gunstensen et al. (1991), modelo de captura de interface (*interface tracking model*) proposto por He, Chen e Zhang (1999), modelo de energia livre (*free-energy model*), proposto por Swift, Osborn e Yeomans (1995) e o modelo de Shan-Chen ou modelo dos pseudopotenciais proposto por Shan e Chen (1993). Por ser o modelo adotado nesta tese, o último será apresentado em detalhes nesta seção.

O modelo dos pseudopotenciais, conhecido como modelo de Shan-Chen (SHAN; CHEN, 1993; SHAN; CHEN, 1994), baseia-se na incorporação de uma força que introduz uma interação local entre as partículas, que possibilita a separação de fases. A força intermolecular total é dada pela soma das contribuições das forças locais, entre uma partícula na posição $\mathbf{x}$ e outra na posição adjacente $\bar{\mathbf{x}}$ em um dado esquema de velocidades, conforme Equação 2.109:

$$\mathbf{F}_{int} = - \int (\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\bar{\mathbf{x}}) d^3(\bar{\mathbf{x}}) \quad (2.109)$$

Na Equação 2.109, $G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}})$ é a forma funcional da dependência espacial da força intermolecular e $\psi(\mathbf{x})$ corresponde à função potencial, também conhecida na literatura como pseudopotencial. Esta denominação é justificada pelo motivo de $\psi(\mathbf{x})$ apresentar, na realidade, uma dependência direta com a densidade local, motivo pelo qual é denominado pseudopotencial.

No trabalho original de Shan e Chen (1993), o pseudopotencial assume a relação dada pela Equação 2.110:

$$\psi(\mathbf{x}) = \rho_0 \left(1 - e^{-\frac{\rho}{\rho_0}} \right) \quad (2.110)$$

Na Equação 2.110, ρ_0 é uma densidade de referência, geralmente assumida como unitária (KRÜGER et al., 2017).

Em um trabalho subsequente, [Shan e Chen \(1994\)](#) utilizou uma definição distinta, dada pela Equação 2.111:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0 e^{-\frac{\rho_0}{\rho}} \quad (2.111)$$

Na Equação 2.111, ψ_0 e ρ_0 são constantes.

A função $G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}})$ pode assumir distintas formulações, porém, a mais comum na literatura é apresentada em [Krüger et al. \(2017\)](#). Neste caso, a interação é dependente das partículas imediatamente adjacentes, para um determinado esquema de velocidades discretas:

$$G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} w_i G, & \bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t \\ 0, & \text{nos outros casos} \end{cases} \quad (2.112)$$

Na Equação 2.112, G é um escalar que controla a intensidade da interação intermolecular. A formulação discreta mais simples para a força intermolecular é dada em termos da soma das interações com os nós vizinhos, conforme [Shan e Chen \(1993\)](#) e [Shan \(2008b\)](#):

$$\mathbf{F}_{int} = -\psi(\mathbf{x}) G \sum_i w'_i (|\mathbf{c}_i|^2) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \mathbf{c}_i \Delta t \quad (2.113)$$

Na Equação 2.113, w'_i são os fatores de ponderação normalizados, seguindo a formulação de [Shan \(2008b\)](#). Para o esquema D2Q9, tem-se $w'_i(1) = \frac{1}{3}$ e $w'_i(2) = \frac{1}{12}$.

Pela expansão de Taylor e adotando uma notação simplificada dada por $\psi \equiv \psi(\mathbf{x})$ e $c = \frac{\Delta x}{\Delta t} = 1$ sendo a constante do sítio, a força de interação intermolecular pode ser expressa como:

$$\mathbf{F}_{int} = -Gc^2 \left[\psi \nabla \psi + \frac{c^2 \psi \nabla (\nabla^2 \psi)}{6} + \dots \right] \quad (2.114)$$

De acordo com [Li, Luo e Li \(2013\)](#), a força de interação dada pela Equação 2.114 pode ser manipulada matematicamente e ser reescrita como:

$$\mathbf{F}_{int} = -\frac{Gc^2}{2} \nabla \psi^2 - \frac{Gc^4}{6} \nabla (\psi \nabla^2 \psi) + \frac{Gc^4}{6} \left[\nabla \cdot (\nabla \psi \nabla \psi) - \frac{1}{2} \nabla |\nabla \psi|^2 \right] + \dots \quad (2.115)$$

O tensor pressão para o método dos pseudopotenciais é modificado pelo efeito da força de interação intermolecular, podendo ser definido por meio da seguinte relação:

$$\nabla \cdot \mathbf{P}_{SC} = \nabla \cdot (\rho c_s^2 \mathbf{I}) - \mathbf{F}_{int} \quad (2.116)$$

Na Equação 2.116, o primeiro termo do lado direito corresponde ao gradiente da equação de estado do Método de *Lattice* Boltzmann para escoamento monofásico, $p = \rho c_s^2$.

Considerando o tensor pressão dado pela Equação 2.116 e observando que o primeiro termo da Equação 2.115 tem a forma de um gradiente, pode-se adicioná-lo à equação de estado do Método de *Lattice* Boltzmann:

$$p_{EE} = \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 \quad (2.117)$$

Na Equação 2.117, o segundo termo corresponde ao termo não-ideal da equação de estado do método dos pseudopotenciais.

Outra importante consequência da formulação do tensor pressão dada pela Equação 2.116 é que sua forma contínua, considerando uma aproximação de 3ª ordem, pode ser expressa de acordo com Li, Luo e Li (2013):

$$\mathbf{P}_{C,SC} = \left(\rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + \frac{Gc^4}{12}|\nabla\psi|^2 + \frac{Gc^4}{12}\psi\nabla^2\psi \right) \mathbf{I} - \frac{Gc^4}{6}\nabla\psi\nabla\psi \quad (2.118)$$

Entretanto, Shan (2008b) demonstrou que para garantir a condição de equilíbrio mecânico de forma exata, a formulação discreta do tensor pressão deve ser utilizada no método dos pseudopotenciais. Neste caso, o balanço de forças é dada por:

$$\sum \mathbf{P}_{SC} \cdot \mathbf{A} = \sum \rho c_s^2 \mathbf{I} \cdot \mathbf{A} - \sum \mathbf{F}_{int} \quad (2.119)$$

Por meio da Equação 2.119, a forma discreta do tensor pressão pode ser obtida:

$$\mathbf{P}_{SC} = \rho c_s^2 \mathbf{I} + \frac{G}{2}\psi(\mathbf{x}) \sum_i w'_i(|\mathbf{c}_i|^2)\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\Delta t)\mathbf{c}_i\Delta t\mathbf{c}_i\Delta t \quad (2.120)$$

Considerando que a força de interação intermolecular é calculada somente por interações com os nós vizinhos, pela expansão em série de Taylor da Equação 2.120, a forma discreta do tensor pressão pode ser reescrita de acordo com Li, Luo e Li (2013):

$$\mathbf{P}_{SC} = \left(\rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + \frac{Gc^4}{12}\psi\nabla^2\psi \right) \mathbf{I} + \frac{Gc^4}{6}\psi\nabla\nabla\psi \quad (2.121)$$

Na Equação 2.121, o último termo do lado direito está relacionado à tensão superficial (LI et al., 2015). É possível também notar que fica explícita uma forte limitação do modelo de Shan-Chen: a tensão superficial não pode ser ajustada de forma independente da razão de densidades (CZELUSNIAK et al., 2020).

2.6.1 Equações de estado não-ideais

As formulações originais para o pseudopotencial somente permitem simulações para baixas razões de densidade. Considerando a equação de estado do método dos pseudopotenciais, dada pela Equação 2.117, pode-se explicitar o pseudopotencial e utilizar outra equação de estado não-ideal, o que possibilita simulações com razões de densidade maiores (YUAN; SCHAEFER, 2006):

$$\psi = \sqrt{\frac{2(p_{EE} - \rho c_s^2)}{Gc^2}} \quad (2.122)$$

Quando o pseudopotencial é calculado pela Equação 2.122, verifica-se que a força de interação intermolecular passa a ser independente do parâmetro G . Neste caso, G é utilizado apenas para garantir que a raiz quadrada da seja sempre positiva.

As equações de estado para fluidos não-ideais comumente empregadas no Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais, segundo Yuan e Schaefer (2006), são: van der Waals, Redlich–Kwong, Redlich–Kwong Soave, Peng–Robinson e Carnahan–Starling. Estas equações de estado serão apresentadas a seguir.

A equação de van der Waals foi proposta em 1873 e baseia-se na modificação da equação de gás ideal, levando em consideração o tamanho finito das moléculas do gás e a atuação de forças intermoleculares.

$$p_{EE} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (2.123)$$

Na Equação 2.123, $a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$ corresponde a um parâmetro de atração entre as moléculas e $b = \frac{R T_c}{8 p_c}$ corresponde a um parâmetro de dimensão das moléculas, sendo T_c a temperatura crítica e p_c a pressão crítica.

A equação de Redlich–Kwong foi proposta em 1949 e é dada por:

$$p_{EE} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2}{\sqrt{T}(1 + b\rho)} \quad (2.124)$$

Em relação à equação de van der Waals, foi realizada uma modificação no termo que leva em consideração as forças intermoleculares. Os parâmetros são iguais a $a = 0,42748 \frac{R^2 T_c^{2,5}}{p_c}$ e $b = 0,08664 \frac{R T_c}{p_c}$, sendo T_c e p_c a temperatura e pressão críticas, respectivamente.

A equação de Redlich–Kwong Soave alterou o termo associado às forças intermoleculares na equação de Redlich–Kwong, sendo dada por:

$$p_{EE} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{\sqrt{T}(1 + b\rho)} \quad (2.125)$$

Na Equação 2.125, $a = 0,42748 \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$ e $b = 0,08664 \frac{RT_c}{p_c}$, $\alpha(T)$ é uma função da temperatura do fluido, T , e do fator acêntrico, ω_{EE} , dada pela Equação 2.126:

$$\alpha(T) = \left[1 + (0,480 + 1,574\omega_{EE} - 0,176\omega_{EE}^2) \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (2.126)$$

A equação de Peng-Robinson foi proposta em 1976 e modificou o termo de forças intermoleculares de modo a tornar mais precisa a representação da fase líquida. Esta equação é dada por:

$$p_{EE} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2} \quad (2.127)$$

Na Equação 2.127, $a = 0,45724 \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$ e $b = 0,0778 \frac{RT_c}{p_c}$ e $\alpha(T)$ é uma função da temperatura, T , e do fator acêntrico, ω_{EE} , dada pela Equação 2.128:

$$\alpha(T) = \left[1 + (0,37464 + 1,54226\omega_{EE} - 0,26992\omega_{EE}^2) \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}} \right) \right]^2 \quad (2.128)$$

A equação de Carnahan-Starling (CARNAHAN; STARLING, 1969) baseia-se no modelo de esferas rígidas tridimensionais para simular a fase líquida, sendo dada por:

$$p_{EE} = \rho RT \frac{1 + 0,25b\rho + (0,25b\rho)^2 - (0,25b\rho)^3}{(1 - 0,25b\rho)^3} - a\rho^2 \quad (2.129)$$

Na Equação 2.129, $a = 0,4963 \frac{R^2 T_c^2}{p_c}$ e $b = 0,18727 \frac{RT_c}{p_c}$.

2.6.2 Consistência termodinâmica e ajuste da tensão superficial no Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais

Ao empregar o Método de *Lattice* Boltzmann para simulação de problemas multifásicos, particularmente problemas que envolvem as fases líquida e vapor da mesma substância, é necessário estabelecer a condição na qual tem-se equilíbrio de ambas as fases. A condição de coexistência das fases líquida e vapor impõe uma restrição na equação de estado não-ideal, de forma que define-se unicamente uma relação entre pressão, densidades das fases e a temperatura. Esta coexistência é estabelecida em um diagrama pressão-volume por meio da Regra de Construção de Maxwell (BLUNDELL; BLUNDELL, 2006). Esta estabelece que, neste diagrama, a coexistência das fases líquido-vapor ocorre para valores das áreas delimitadas pela reta horizontal e pela curva espinodal, indicada pela Figura 7, que correspondem aos pontos limites B_1 e B_2 indicados. Os estados correspondentes estão associados aos pontos de mínimo e máximo da Figura correspondem à estados denominados metaestáveis (SKRIPOV, 1974), de líquido superaquecido e vapor subresfriado, respectivamente.

Figura 7 – Esquema para representação da Regra de Construção de Maxwell

Fonte: Adaptado de [Blundell e Blundell \(2006\)](#)

Matematicamente, a Regra de Construção de Maxwell é expressa pela Equação 2.130, considerando a Figura 7:

$$\int_{v_v}^{v_l} [p_o - p_{EE}(v', T)] dv' = 0 \quad (2.130)$$

Na Equação 2.130, tem-se que $p_o = p_{EE}(v_v, T) = p_{EE}(v_l, T)$, em que p_{EE} refere-se à pressão calculada por meio da equação de estado do modelo de Shan-Chen (Equação 2.117), v_v e v_l correspondem aos volumes específicos das fases. A relação pode também ser expressa por meio da densidade e considerando a Equação 2.117, resultando em:

$$\int_{\rho_l}^{\rho_v} \left(p_o - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2} \psi^2 \right) \frac{d\rho}{\rho^2} = 0 \quad (2.131)$$

Os modelos cujas densidades de equilíbrio satisfazem a Regra de Construção de Maxwell são denominados termodinamicamente consistentes. Em relação aos modelos de *Lattice Boltzmann* para simulação de problemas multifásicos, o modelo original de Shan-Chen, com o pseudopotencial definido pelas Equações 2.110 e 2.111, é termodinamicamente consistente. Entretanto, o modelo original de Shan-Chen é limitado a simulações para baixas razões de densidades. A proposição do cálculo do pseudopotencial introduzido por [He e Doolen \(2002\)](#) e [Yuan e Schaefer \(2006\)](#), embora possibilite a simulação em condições de maiores razões de densidade, torna o modelo inconsistente do ponto de vista termodinâmico. Isso pode ser demonstrado, por exemplo, pelo estudo do problema da interface plana entre duas fases em condição de equilíbrio mecânico, conforme [Shan](#)

(2008b). Para este problema, a componente do tensor pressão normal à interface pode ser expressa por:

$$P_n = \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \left[\alpha' \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \beta\psi \frac{d^2\psi}{dx^2} \right] \quad (2.132)$$

Na Equação 2.132 $\alpha' = 1 - 3C_1$, $\beta = 1 + 6C_1$ são constantes que dependem do esquema de velocidades escolhido e do tipo de formulação utilizada para calcular a força de interação intermolecular. Considerando o esquema de velocidades D2Q9 e a formulação da força de interação intermolecular dada pela Equação 2.113, tem-se $C_1 = \frac{1}{3}$ e $C_2 = C_3 = \frac{1}{12}$ (SHAN, 2008b). A condição de equilíbrio mecânico define que a componente do tensor P_n deve ser igual à pressão suficiente longe da interface (*bulk pressure*), p_o , resultando na seguinte relação:

$$p_o = \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \left[\alpha' \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \beta\psi \frac{d^2\psi}{dx^2} \right] \quad (2.133)$$

A relação pode ser integrada, considerando a identidade $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{1}{2} \frac{d}{d\psi} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2$, resultando em:

$$\left(c \frac{d\rho}{dx} \right)^2 = \frac{8(1-\epsilon)\psi^\epsilon}{Gc^2} \frac{d\psi}{d\rho} \int_{\rho_v}^{\rho_l} \left(p_o - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2}\psi^2 \right) \frac{\frac{d\psi}{d\rho}}{\psi^{1+\epsilon}} d\rho \quad (2.134)$$

Na Equação 2.134, tem-se que $\epsilon = \frac{-2\alpha'}{\beta}$. A taxa de variação da densidade, $\frac{d\rho}{dx}$, deve ser nula suficientemente longe da interface, de modo que a integral da Equação 2.134 deve ser identicamente nula (SHAN, 2008b):

$$\int_{\rho_v}^{\rho_l} \left(p_o - \rho c_s^2 - \frac{Gc^2}{2}\psi^2 \right) \frac{\frac{d\psi}{d\rho}}{\psi^{1+\epsilon}} d\rho = 0 \quad (2.135)$$

A Equação 2.135 é denominada de condição de estabilidade mecânica (CHEN et al., 2014) e possibilita o cálculo das densidades de equilíbrio das fases, a uma dada pressão p_o . Analogamente, a Regra de Construção de Maxwell (Equação 2.131) permite a obtenção das mesmas grandezas. Assim, comparando-se as equações citadas, um modelo do pseudopotencial consistente do ponto de vista termodinâmico deve respeitar a seguinte relação:

$$\frac{\frac{d\psi}{d\rho}}{\psi^{1+\epsilon}} = \frac{d\rho}{\rho^2} \quad (2.136)$$

Nota-se que a consistência termodinâmica depende da escolha da equação de estado. Uma solução empregada na literatura para garantir a consistência termodinâmica está

relacionada ao ajuste do parâmetro ϵ , ou seja, ajustar a condição de estabilidade mecânica e garantir uma aproximação para a igualdade requerida pela Equação 2.136.

Li, Luo e Li (2012) propuseram o primeiro modelo termodinamicamente consistente do Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais que possibilita a inserção de uma equação de estado não-ideal. O operador colisão considerado foi o BGK. Os autores observaram que a formulação da componente P_n do tensor pressão dada pela Equação 2.132 somente é válida considerando-se que não haja inclusão de novos termos nas equações macroscópicas pelo esquema de forças. Mas, de acordo com os autores, ao empregar os esquemas de força de Shan e Chen (1993) e Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) para inclusão da força intermolecular, a componente P_n passa a ser dada por:

$$P_n = \rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2}\psi^2 + \frac{Gc^4}{12} \left[(\alpha' + 12G\gamma') \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \beta\psi \frac{d^2\psi}{dx^2} \right] \quad (2.137)$$

Neste caso, o parâmetro ϵ na Equação 2.135 passa a ser dado por $\epsilon = -2\frac{(\alpha'+12G\gamma')}{\beta}$. Posteriormente, os autores notaram que diferentes esquemas de forças resultam em distintos valores para ϵ , de modo que as soluções numéricas são diferentes. De modo a obter um esquema de forças que garanta a consistência termodinâmica, foi proposta uma modificação no esquema de Guo, Zheng e Shi (2002) pela modificação da velocidade macroscópica:

$$S_i = w_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{(c_{i\beta} - v'_\beta)}{c_s^2} + \frac{c_{i\alpha} v_\alpha c_{i\beta}}{c_s^4} \right] F_\beta \quad (2.138)$$

Na Equação 2.138, a velocidade modificada é dada por $\mathbf{v}' = \mathbf{v} + \frac{\sigma_{BGK}\mathbf{F}}{(\tau-0,5)\psi^2}$. O parâmetro ϵ passa a ser dado por $\epsilon = -2\frac{(\alpha'+24G\sigma_{BGK})}{\beta}$. O parâmetro σ_{BGK} é utilizado para ajustar a condição de estabilidade mecânica de modo a garantir a consistência termodinâmica. A Figura 8 demonstra que o modelo desenvolvido pelos autores é capaz de garantir a consistência termodinâmica, para distintos valores do parâmetro de relaxação temporal, τ , para $\sigma_{BGK} = 0, 105$. Por outro lado, se o esquema original de Guo, Zheng e Shi (2002) for utilizado (Equação 2.105 com $\sigma_{BGK} = 0$), a consistência termodinâmica não é garantida para $T_r \leq 0, 90$.

Em uma publicação subsequente, Li, Luo e Li (2013) propuseram um modelo do Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais com o operador MRT consistente do ponto de vista termodinâmico. Similarmente ao modelo de Li, Luo e Li (2012), os autores propuseram uma alteração do esquema de forças de modo a ajustar a condição de equilíbrio mecânico e garantir a consistência termodinâmica. Para o operador MRT, a equação de colisão com o termo de forças no espaço de momentos, $\bar{\mathbf{S}} = \mathbf{M}\mathbf{S}$, é dada por:

$$\mathbf{m}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \Lambda [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)] \Delta t + \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{x}, t) \Delta t \quad (2.139)$$

Figura 8 – Resultados do modelo de Li, Luo e Li (2012) para a curva de coexistência termodinâmica.

Fonte: Adaptado de Li, Luo e Li (2012)

No modelo de Li, Luo e Li (2013), o termo $\bar{\mathbf{S}}$ é dado por:

$$\bar{\mathbf{S}} = \left(\mathbf{I} - \frac{\Lambda}{2} \right) \begin{bmatrix} 0 \\ 6(v_x F_{total,x} + v_y F_{total,y}) + \frac{\sigma_{MRT} |\mathbf{F}_{int}|}{(\tau_1 - 0,5)\psi^2} \\ -6(v_x F_{total,x} + v_y F_{total,y}) - \frac{\sigma_{MRT} |\mathbf{F}_{int}|}{(\tau_2 - 0,5)\psi^2} \\ F_{total,x} \\ -F_{total,x} \\ F_{total,y} \\ -F_{total,y} \\ 2(v_x F_{total,x} - v_y F_{total,y}) \\ (v_x F_{total,x} + v_y F_{total,y}) \end{bmatrix} \quad (2.140)$$

Na Equação 2.140, $\mathbf{F}_{total} = (F_{total,x}, F_{total,y})$ é a força externa total. Para este esquema, a relação entre ϵ e σ_{MRT} é também dada pela relação $\epsilon = -2 \frac{(\alpha' + 24G\sigma_{MRT})}{\beta}$. Cabe notar que para $\sigma_{MRT} = 0$, o esquema de forças corresponde à versão do esquema de Guo, Zheng e Shi (2002) para o operador MRT (LI; LUO; LI, 2013).

Embora os esquemas de forças propostos por Li, Luo e Li (2012) e Li, Luo e Li (2013) pareçam ser os mesmos do ponto de vista de metodológico, com a ressalva dos diferentes operadores colisão, os tensores pressão resultantes são diferentes. Os tensores pressão resultantes dos modelos de Li, Luo e Li (2012) e Li, Luo e Li (2013) são dados, respectivamente, por:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{SC} + 2G^2 c^4 \sigma_{BGK} \nabla \psi \nabla \psi \quad (2.141)$$

Figura 9 – Resultados do modelo de Li, Luo e Li (2013) para a curva de coexistência termodinâmica.

Fonte: Adaptado de Li, Luo e Li (2013)

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}_{SC} + 2G^2c^4\sigma_{MRT}|\nabla\psi|^2\mathbf{I} \quad (2.142)$$

Nas Equações 2.141 e 2.142, $\mathbf{P}_{SC}$ é o tensor pressão original do modelo dos pseudopotenciais. Uma importante consequência dos diferentes tensores de pressão é que, para uma determinada simulação do mesmo problema com os mesmos parâmetros, a tensão superficial obtida por cada modelo será diferente (GUZELLA et al., 2020).

Uma outra análise importante no contexto do método dos pseudopotenciais foi realizada por Li, Luo e Li (2013) referente à influência do parâmetro a , da equação de estado não-ideal, sobre a espessura da interface que separa as fases. Os autores reportaram que a espessura da interface aumenta de acordo com $\frac{1}{\sqrt{a}}$. Assim, um aumento do parâmetro a resulta na redução das correntes espúrias próximas à interface, o que torna a simulação mais estável do ponto de vista numérico. Cabe ressaltar que a alteração do parâmetro a influencia as densidades de equilíbrio das fases, pois a condição de estabilidade mecânica depende do pseudopotencial.

Gong e Cheng (2012b) apresentaram um modelo para garantir a consistência termodinâmica no método dos pseudopotenciais, considerando uma discretização para a força de interação intermolecular distinta da apresentada anteriormente:

$$\mathbf{F}_{int} = -\beta'\psi(\mathbf{x}) \sum_{\bar{\mathbf{x}}} G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}})\psi(\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) - \frac{(1 - \beta')}{2} \sum_{\bar{\mathbf{x}}} G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}})\psi^2(\bar{\mathbf{x}})(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \quad (2.143)$$

Tabela 2 – Relação do parâmetro β' e as equações de estado para o modelo de [Gong e Cheng \(2012b\)](#)

Equação de estado	Carnahan-Starling	Van der Waals	Peng-Robinson
β'	0,886	0,55	1,16

Fonte: Adaptado de [Gong e Cheng \(2012b\)](#)

No modelo de [Gong e Cheng \(2012b\)](#), $G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}})$ é dado por:

$$G(\mathbf{x}, \bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} g_1, & |\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}| = 1 \\ g_2, & |\mathbf{x} - \bar{\mathbf{x}}| = \sqrt{2} \\ 0, & \text{nos outros casos} \end{cases} \quad (2.144)$$

Na Equação 2.144 tem-se que $g_1 = 2G$, $g_2 = \frac{G}{2}$ para o esquema D2Q9 e $g_1 = g_2 = \frac{G}{2}$ para o esquema D3Q19. A incorporação da força de interação intermolecular é realizada por meio do esquema de [Kupershtokh, Medvedev e Karpov \(2009\)](#). O parâmetro β' é utilizado para garantir a consistência termodinâmica e depende da equação de estado utilizada. Os respectivos valores são apresentados na Tabela 2.

No modelo de Lattice Boltzmann dos pseudopotenciais, não é possível ajustar a tensão superficial de forma independente da razão de densidades. Esta é outra limitação deste modelo. Neste sentido, [Li e Luo \(2013\)](#) desenvolveram um modelo do método dos pseudopotenciais com o operador MRT que permite este ajuste. Os autores propuseram a inclusão de um termo fonte, $\mathbf{C}$, na equação de colisão no espaço de momentos:

$$\mathbf{m}^*(\mathbf{x}, t) = \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{\Lambda} [\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{eq}(\mathbf{x}, t)] \Delta t + \bar{\mathbf{S}}(\mathbf{x}, t) \Delta t + \mathbf{C}(\mathbf{x}, t) \Delta t \quad (2.145)$$

No modelo proposto, o termo fonte $\mathbf{C}$ é expresso por:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1, 5 \frac{1}{\tau_2} (Q_{xx} + Q_{yy}) \\ -1, 5 \frac{1}{\tau_3} (Q_{xx} + Q_{yy}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\frac{1}{\tau_7} (Q_{xx} - Q_{yy}) \\ -\frac{1}{\tau_7} (Q_{xx} - Q_{yy}) \end{bmatrix} \quad (2.146)$$

De acordo com os autores, o tensor $\mathbf{Q}$ tem a seguinte formulação:

$$\mathbf{Q} = \kappa \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^9 w'_i(|\mathbf{c}_i|^2) [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) - \psi(\mathbf{x})] \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \quad (2.147)$$

Na Equação 2.147, κ é um parâmetro que permite o ajuste da tensão superficial. O tensor pressão resultante do modelo de Li e Luo (2013) é dado por:

$$\mathbf{P} = \left[\rho c_s^2 + \frac{Gc^2}{2} \psi^2 + \frac{Gc^4}{12} (1 + 2\kappa) \psi \nabla^2 \psi \right] \mathbf{I} + \frac{Gc^4}{6} (1 - \kappa) \psi \nabla \nabla \psi \quad (2.148)$$

Neste modelo, o termo adicional isotrópico é introduzido ao tensor pressão para garantir que a condição de estabilidade mecânica não seja modificada quando κ for alterado. Por outro lado, o termo anisotrópico garante a variação da tensão superficial. Cabe notar que para $\kappa = 0$, a Equação 2.148 reduz-se à Equação 2.121. Para valores de κ positivos, a tensão superficial é reduzida linearmente e assume o valor zero para $\kappa = 1$. Por outro lado, para valores de κ negativos, a tensão superficial aumenta.

Em um trabalho recente, Czelusniak et al. (2020) desenvolveram um modelo generalizado para garantir a consistência termodinâmica e o ajuste da tensão superficial para o Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais. Os autores seguiram uma abordagem em que, inicialmente, analisa-se a formulação do tensor pressão que garante a consistência termodinâmica e permite o ajuste da tensão superficial. Posteriormente utiliza-se o esquema de força de Guo, Zheng e Shi (2002) para replicar os efeitos do tensor pressão na equação de conservação da quantidade de movimento. O modelo desenvolvido, por ser genérico, pode ser utilizado com os operadores BGK e MRT. O termo de força resultante proposto pelos autores é dado por:

$$F_\alpha = F_{int,\alpha} - \frac{3}{4} \epsilon' c_s^2 G F_\alpha^{(1)} + (\sigma' - 1) c_s^2 G F_\alpha^{(2)} \quad (2.149)$$

No modelo proposto $F_{int,\alpha}$ é a força de interação intermolecular, ϵ' é o parâmetro de ajuste da condição de equilíbrio mecânico para garantir a consistência termodinâmica e σ' é o parâmetro de ajuste da tensão superficial.

No trabalho de Czelusniak et al. (2020), a força de interação intermolecular é calculada utilizando-se os fatores de ponderação da função distribuição de equilíbrio, w_i :

$$\mathbf{F}_{int} = -\psi(\mathbf{x}) \frac{2G}{c_s^2} \sum_i w_i \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \mathbf{c}_i \Delta t \quad (2.150)$$

Os termos $F_\alpha^{(1)}$ e $F_\alpha^{(2)}$ são calculados por meio dos momentos do pseudopotencial:

$$F_\alpha^{(1)} = -2 \frac{M_\beta^{(1)}}{c_s^2} \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}}{c_s^4} \quad (2.151)$$

$$F_\alpha^{(2)} = \frac{M_\alpha^{(1)}}{c_s^2} \frac{M_{\beta\beta}^{(2)}}{c_s^4} - \frac{M_\beta^{(1)}}{c_s^2} \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}}{c_s^4} \quad (2.152)$$

Os momentos do pseudopotencial são calculados por aproximações em diferenças finitas (CZELUSNIAK et al., 2020):

$$M_\alpha^{(1)} = \sum_i w_i c_{i\alpha} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \quad (2.153)$$

$$M_{\alpha\beta}^{(2)} = \sum_i w_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \quad (2.154)$$

A Figura 10 apresenta os resultados da curva de coexistência obtida por Czelusniak et al. (2020) utilizando a equação de estado de Carnahan-Starling, considerando diferentes valores do parâmetro ϵ' e do parâmetro da equação de estado, a . Nota-se que o modelo garante a consistência termodinâmica.

Figura 10 – Resultados do modelo de Czelusniak et al. (2020) para a curva de coexistência termodinâmica considerando a equação de Carnahan-Starling.

Fonte: Adaptado de Czelusniak et al. (2020)

2.6.3 Equação da conservação da energia para modelos de interface discreta

O modelo térmico baseia-se na equação da energia obtida considerando-se o modelo de interface discreta (ANDERSON; MCFADDEN; WHEELER, 1998). A equação evolutiva

para a temperatura pode ser obtida tanto pela primeira quanto pela segunda leis da Termodinâmica, para um sistema fechado.

Considerando a primeira lei da Termodinâmica para um sistema fechado, desprezando-se a dissipação viscosa, a equação resultante é:

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla e \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) - p \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.155)$$

Para uma substância pura, a energia interna específica pode ser relacionada à temperatura por meio de uma relação termodinâmica apropriada:

$$de = c_v dT + \frac{1}{\rho^2} \left[p - T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] d\rho \quad (2.156)$$

Na Equação 2.156, c_v é o calor específico a volume constante e p é a pressão calculada por meio de uma equação de estado não-ideal.

Substituindo a Equação 2.156 na Equação 2.155 e considerando a equação de conservação da massa na forma diferencial (Equação 2.4), obtém-se uma equação evolutiva para a temperatura:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.157)$$

Por outro lado, considerando o balanço local de entropia desprezando-se a dissipação viscosa, a equação resultante é:

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla s \right) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.158)$$

Na Equação 2.158, s é a entropia específica. A entropia específica pode ser relacionada com a temperatura por meio da seguinte relação termodinâmica:

$$ds = \frac{c_v}{T} dT - \frac{1}{\rho^2} \left[\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] d\rho \quad (2.159)$$

Por meio da equação de conservação da massa na forma diferencial (Equação 2.4) e substituindo a Equação 2.159 na Equação 2.158, obtém-se a mesma equação evolutiva para a temperatura:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.160)$$

Em comparação com a equação de advecção-difusão obtida pela expansão de Chapman-Enskog (Equação 2.98), a Equação 2.157 possui termos extras que devem ser incluídos de maneira adequada na equação de *Lattice Boltzmann* para $g_i(\mathbf{x}, t)$. Inicialmente, considerando a Equação 2.98, pode-se reescrever a Equação 2.157 como:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}T) = \nabla \cdot (D\nabla T) + \phi \quad (2.161)$$

O termo fonte, ϕ é expresso por:

$$\phi = T \left[1 - \frac{1}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \nabla \cdot \mathbf{v} - \nabla \cdot (D\nabla T) + \frac{\nabla \cdot (k\nabla T)}{\rho c_v} \quad (2.162)$$

Na Equação de *Lattice Boltzmann* para obtenção do campo de temperaturas (Equação 2.87), o termo-fonte ϕ é incluído de forma que a equação resultante passa a ser (KRÜGER et al., 2017):

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\tau_T} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + w_i \phi \quad (2.163)$$

Grande parte dos trabalhos publicados na literatura que utilizaram o Método de *Lattice Boltzmann* dos pseudopotenciais para investigação da formação de bolhas em superfícies aquecidas empregou o Método de *Lattice Boltzmann* para obtenção do campo de temperaturas. Outros trabalhos empregaram outro método numérico, mais comumente o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem em conjunto com uma discretização espacial por diferenças finitas.

2.6.4 Trabalhos da literatura baseados no método dos pseudopotenciais

O método dos pseudopotenciais tem sido aplicado para simulações de problemas bifásicos na literatura. De acordo com Huang, Krafczyk e Lu (2011), este método é eficiente para simulação de problemas envolvendo escoamentos multifásicos, embora possua algumas limitações e instabilidades para baixas condições. De modo a reduzir estas limitações e melhorar o método do ponto de vista da estabilidade, alguns trabalhos foram propostos. Shan (2008a) avaliou e propôs modificações no modelo original de Shan-Chen de modo a reduzir as correntes espúrias (gradientes de velocidade na interface). Em outra publicação, Shan (2008b) desenvolveu uma abordagem geral para cálculo do tensor pressão para o método dos pseudopotenciais de modo a incluir forças intermoleculares de outros nós adjacentes. O autor afirma que, por meio desta abordagem, é possível eliminar as correntes espúrias próximas a interface e simular problemas multifásicos em condições mais variadas que a versão original.

Nos últimos 15 anos, trabalhos foram desenvolvidos modelos empregando o método dos pseudopotenciais para simulação da nucleação de bolhas em superfícies aquecidas. Após uma extensa revisão bibliográfica, pode-se afirmar que o primeiro trabalho que utilizou o modelo dos pseudopotenciais para simular a ebulição foi publicado por [Zhang e Chen \(2003\)](#). Os autores não deixaram explícita a temperatura reduzida escolhida para realização da simulação. Neste trabalho, os autores empregaram a equação de Carnahan-Starling para acoplar os modelos hidrodinâmico e térmico. Enquanto a solução das equações de conservação da massa e quantidade de movimento foi realizada pelo método dos pseudopotenciais com o operador BGK, a equação da energia foi resolvida pelo esquema de Lax-Wendroff estendido. De modo a intensificar a formação de bolhas na superfície aquecida, os autores impuseram artificialmente flutuações de temperatura na equação de estado nos nós próximos à superfície de aquecimento. A equação de conservação da energia resolvida pelos autores é dada por:

$$\rho \left(\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla e \right) = -p \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (k \nabla T) + \Psi \quad (2.164)$$

Na Equação 2.164, Ψ corresponde às contribuições da dissipação viscosa e da tensão superficial. Esta equação é a mesma obtida anteriormente (Equação 2.157) se o termo Ψ for desprezado. Entretanto, os autores consideram uma relação termodinâmica simplificada para relacionar a energia interna com a temperatura: $e = c_v T$. Desta forma, a equação evolutiva para temperatura utilizada pelos autores é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla T - \frac{p \nabla \cdot \mathbf{v}}{\rho c_v} + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} + \frac{\Psi}{\rho c_v} \quad (2.165)$$

Nota-se que esta equação é significativamente diferente da Equação 2.157. A Figura 11 apresenta o campo de densidades para diferentes instantes de tempo obtido pelos autores, em que é possível notar a presença de dois sítios de nucleação.

[Hazi e Markus \(2009\)](#) desenvolveram um estudo numérico de ebulição heterogênea, para temperatura reduzida de $T_r = 0.8$, utilizando o Método de *Lattice Boltzmann* dos pseudopotenciais. Diferentemente do trabalho de [Zhang e Chen \(2003\)](#), os autores resolveram a equação de conservação da energia pelo Método de *Lattice Boltzmann*, empregando outra função distribuição para obter o campo de temperaturas. Os autores acoplaram os modelos hidrodinâmico e térmico utilizando uma equação de estado artificial. A equação de conservação da energia, em termos da temperatura, que os autores apresentaram no trabalho é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.166)$$

Figura 11 – Campos de densidades para simulação da ebulição obtidos por [Zhang e Chen \(2003\)](#) para distintos instantes de tempo.

Fonte: [Zhang e Chen \(2003\)](#)

Entretanto, os autores implementaram o termo-fonte ϕ por uma formulação distinta da Equação 2.162:

$$\phi = T \left[-\frac{1}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.167)$$

O resultado do campo de velocidades apresentou recirculações assimétricas, conforme apresentado na Figura 12. Estes resultados poderiam estar relacionados à formulação incorreta para o termo-fonte, ϕ . Os autores compararam os resultados numéricos de diâme-

tro e frequência de desprendimento de uma bolha variando-se a aceleração da gravidade, considerando as tendências dadas pelas correlações de Fritz (1935) e Zuber (1963), respectivamente. Os resultados numéricos apresentaram boa acordância com as tendências dadas pelas correlações citadas.

Figura 12 – Campo de velocidade obtido por Hazi e Markus (2009)

Fonte: Adaptado de Hazi e Markus (2009)

Gong e Cheng (2012a) utilizaram Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais para simulação bidimensional da formação de uma bolha em superfícies aquecidas à temperatura reduzida igual a $T_r = 0,82$. O método foi obtido pela modificação do método dos pseudopotenciais de Shan e Chen (1993). A equação da energia também foi resolvida pelo Método de *Lattice* Boltzmann. Uma nova formulação para o cálculo do termo fonte da equação da energia foi proposta, corrigindo a inconsistência do modelo de Hazi e Markus (2009), assim como um novo esquema para cálculo das forças intermoleculares. Os autores afirmaram que o custo computacional do método é inferior ao métodos CFD tradicionais Volume of Fluid e Level Set. O fator acêntrico utilizado foi o da água. O método proposto foi utilizado para obter o diâmetro de desprendimento da bolha em função da aceleração da gravidade. Estes resultados foram comparados com a tradicional correlação de Fritz (1935) e uma excelente acordância foi observada. Este resultado é apresentado na Figura 13. A Figura 14 apresenta resultados do campo de densidades e o campo de velocidades obtidos pelos autores. Nota-se que a bolha nucleia no centro do domínio computacional. Isso deve-se à maior temperatura considerada no centro do domínio, conforme implementado

pelos autores. Neste estudo o termo-fonte, ϕ , implementado foi também incorreto:

$$\phi = T \left[1 - \frac{1}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.168)$$

Uma análise do modelo revela que foi considerado que o coeficiente de difusão, D , é igual à difusividade térmica, $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$. Desta forma, a equação da energia resolvida desconsidera a variação da densidade ao longo da interface, uma vez que o termo $\frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v}$ foi substituído por $\nabla \cdot (D \nabla T) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho c_p} \nabla T \right)$.

Figura 13 – Comparação do diâmetro de desprendimento da bolha da superfície obtido pelas simulações e pela correlação de Fritz (1935)

Fonte: Adaptado de Gong e Cheng (2012a)

Gong e Cheng (2015a) empregaram o modelo de Gong e Cheng (2012a) para avaliar efeitos de molhabilidade na ebulição em piscina saturada em um substrato aquecido com superfície lisa, para temperatura $T_r = 0,90$. Os resultados numéricos mostraram que, para uma superfície hidrofílica, o diâmetro de desprendimento e a frequência da bolha aumentam com o aumento do ângulo de contato e superaquecimento. Uma micro-camada de líquido situa-se entre a bolha e a superfície hidrofílica, de modo que esta região é caracterizada por um elevado fluxo de calor durante o período de crescimento. Para esta superfície, após o desprendimento, uma bolha residual permanece sob a superfície, de modo que o período de espera não foi observado. Para a superfície hidrofóbica, a micro-camada não foi observada e a linha de contato tripla foi caracterizada pelo maior fluxo de calor e menor temperatura local. Adicionalmente, os autores afirmaram terem obtido curvas de ebulição para ambas superfícies, por meio de simulação numérica, pela

Figura 14 – Crescimento da bolha em uma superfície aquecida (à esquerda) e campo de velocidades (à direita)

Fonte: Adaptado de [Gong e Cheng \(2012a\)](#)

primeira vez na literatura. Nesta publicação, os autores apresentaram resultados das simulações dos diferentes regimes associados à curva de ebulição, conforme apresentado na Figura 15, para as superfícies hidrofílica (curva A'–B'–C'–D'–E'–G'–H') e hidrofóbica (curva A–B–C–D–E–G–H), respectivamente. Os autores publicaram um estudo semelhante em [Gong e Cheng \(2015b\)](#), a partir do mesmo modelo numérico, em que investigaram superfície com condições mistas de molhabilidade.

[Li et al. \(2015\)](#) empregaram o modelo termodinamicamente consistente desenvolvido por [Li, Luo e Li \(2013\)](#) para realizar simulações numéricas bidimensionais de três regimes da ebulição (nucleada, transição e filme) para distintas condições de molhabilidade da superfície, para $T_r = 0,86$. O Método de *Lattice Boltzmann*, com operador MRT foi empregado para solução das equações hidrodinâmicas e o método de Runge-Kutta de 4ª ordem foi empregado para resolver a equação de conservação da energia, dada pela Equação 2.157. O fator acêntrico utilizado foi o da água. Considerando distintas condições de molhabilidade nas simulações, os autores reportaram que o aumento no ângulo de contato do fluido promove o início da ebulição para um menor superaquecimento da superfície, reduz o fluxo crítico e o regime de ebulição em filme ocorre também para um menor superaquecimento.

[Gong, Cheng e Quan \(2016\)](#) empregaram o modelo de [Gong e Cheng \(2012a\)](#) para avaliar efeitos de molhabilidade na ebulição em piscina saturada em um substrato aquecido com superfície rugosa para $T_r = 0,90$. O efeito da rugosidade foi implementada por meio de uma cavidade retangular. As simulações foram realizadas para baixos valores de superaquecimentos considerando somente uma cavidade ativa. Os autores reportaram que o

Figura 15 – Curva de ebulição versus superaquecimento da superfície

Fonte: Adaptado de [Gong e Cheng \(2015a\)](#)

início da nucleação ocorre na região central da cavidade hidrofílica e nos cantos da cavidade hidrofóbica. O diâmetro de desprendimento da bolha aumenta com o aumento do ângulo de contato para condição de molhabilidade uniforme na superfície. Os autores também reportaram pouca influência no comportamento da bolha quando a profundidade da cavidade é pequena, entretanto um salto na frequência de desprendimento foi observado na cavidade hidrofílica quando a profundidade atinge um valor crítico, levando a formação de uma bolha residual nesta cavidade. De maneira análoga, os autores reportaram a existência de um valor de largura crítica da cavidade, a partir do qual a frequência e diâmetro de desprendimento aumentam com o aumento da largura da cavidade, aumentando o fluxo de calor.

Em uma continuação do estudo anterior, [Gong e Cheng \(2016\)](#) avaliaram as interações das bolhas em múltiplas cavidades de nucleação para $T_r = 0, 90$. Os resultados mostraram que a presença das cavidades na superfície aquecida promove aumento do fluxo de calor no regime de ebulição nucleada. Um aumento mais pronunciado foi observado para a superfície hidrofóbica em comparação com a superfície hidrofílica, para o mesmo superaquecimento. Para condição de molhabilidade mista (cavidade hidrofóbica e superfície hidrofílica), foi obtido o maior fluxo de calor para o regime de ebulição nucleada.

[Li, Zhou e Yan \(2017\)](#) realizaram uma discussão detalhada sobre as inconsistências

do modelo de [Gong e Cheng \(2012a\)](#). O modelo proposto por [Li et al. \(2015\)](#) foi empregado no estudo. Além da derivação incorreta do termo fonte, que gera termos extras na equação da energia, foi demonstrada a existência de termos adicionais indesejados na equação de conservação da energia resolvida pelo Método de *Lattice* Boltzmann, devido à utilização de uma formulação de segunda ordem para a função distribuição de equilíbrio, $g(\mathbf{x}, t)$:

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{v}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{v})^2}{2c_s^4} - \frac{|\mathbf{v}|^2}{2c_s^2} \right] \quad (2.169)$$

[Li, Zhou e Yan \(2017\)](#) demonstraram o efeito sobre os resultados da formulação da equação de conservação da energia utilizada por [Gong e Cheng \(2012a\)](#), apresentada anteriormente. Embora os erros que surgem devido a formulação utilizada possam ser desprezíveis para escoamentos monofásicos incompressíveis, podem ser relevantes para escoamentos multifásicos, por dependerem dos gradientes da densidade e da força de interação intermolecular. Além de apresentarem as inconsistências do modelo de [Gong e Cheng \(2012a\)](#), os autores apresentaram um modelo consistente utilizando o operador MRT para resolver a equação de conservação da energia, eliminando os erros devido à inclusão do termo-fonte e da formulação da função distribuição de equilíbrio. Os autores também reportaram que o coeficiente de difusão na Equação 2.98, D , deve ser tratado como um parâmetro sem significado físico, sendo geralmente assumido como uma constante. Esta observação poderia estar relacionada ao fato deste parâmetro ser cancelado na implementação do termo fonte, conforme Equação 2.162.

[Zhang e Cheng \(2017\)](#) publicaram um estudo da obtenção numérica de curvas de ebulição para condições de temperatura e fluxo de calor constantes para $T_r = 0,85$ e $T_r = 0,90$. O Método de *Lattice* Boltzmann foi utilizado para resolver as equações hidrodinâmicas e também a equação da energia. O fator acêntrico utilizado foi o da água. Os autores reportaram que as curvas de ebulição obtidas, em termos de parâmetros adimensionais, são praticamente idênticas para os regimes de ebulição nucleada e ebulição em filme. Diferenças foram reportadas somente para o regime de transição. O efeito da temperatura de saturação é pequeno até o regime de ebulição nucleada plenamente desenvolvida e mais pronunciada no fluxo crítico e ebulição em filme. Os resultados numéricos do regime de ebulição nucleada foram comparados com a correlação de [Rohsenow \(1952\)](#) boa acórdância foi observada para condição de superfície lisa. Comparações qualitativas foram realizadas para resultados do fluxo crítico com as correlações de [Zuber \(1959\)](#) e [Kandlikar \(2001\)](#) e os resultados mostraram-se satisfatórios. Nesta publicação, os autores utilizaram o modelo de [Gong e Cheng \(2012a\)](#), mas com uma derivação correta do termo-fonte, dado por:

$$\phi = T \left[1 - \frac{1}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \nabla \cdot \mathbf{v} - \nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho c_p} \nabla T \right) + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} \quad (2.170)$$

Em que os autores consideram que o coeficiente de difusão, D , apresenta a mesma formulação da difusividade térmica: $D = \frac{k}{\rho c_p}$, o que em termos de implementação numérica é irrelevante, uma vez que o termo $\nabla \cdot \left(\frac{k}{\rho c_p} \nabla T \right)$ é cancelado. Isso é demonstrado por meio de uma análise das Equações 2.161 e 2.162.

Gong e Cheng (2017) realizaram simulações numéricas diretas da curva de ebulição em piscina para diferentes condições da superfície de aquecimento para $T_r = 0, 90$, utilizando o modelo de Zhang e Cheng (2017). Embora possa-se questionar a denominação "simulações numéricas diretas", o termo foi utilizado aqui por constar no título do trabalho dos autores. O fator acêntrico utilizado foi o da água. Os autores avaliaram os efeitos das propriedades termofísicas da superfície de aquecimento e da condutividade térmica da fase vapor. Os autores resolveram o problema de transferência de calor conjugada para obter a curva de ebulição, ou seja, considerando a inércia térmica do sólido aquecido. Comparações foram realizadas para o regime de ebulição em filme com as correlações de Berenson (1961) e Kandlikar (2001) e uma excelente acórdância foi observada. Para os outros regimes, apenas uma análise teórica dos resultados foi obtida. Qualitativamente, os resultados reproduzem a curva de ebulição e estes são apresentados na Figura 16. Os resultados obtidos pelos autores mostram que existe uma significativa distribuição da temperatura próxima ao topo da superfície de aquecimento durante os regimes de ebulição nucleada, fluxo crítico e transição. Isso demonstra que os efeitos de condução de calor bidimensional não podem ser desprezados na superfície de aquecimento.

Figura 16 – Curva de ebulição versus supraaquecimento da superfície para: diferentes condições da difusividade térmica da superfície de aquecimento (à esquerda) e para diferentes capacitâncias por unidade de volume da superfície de aquecimento (à direita)

Fonte: Adaptado de Gong e Cheng (2017)

Fang et al. (2017) aplicaram o método dos pseudopotenciais combinado com

o operador de múltipla relaxação temporal desenvolvido por [Li, Zhou e Yan \(2017\)](#) para simulação bidimensional dos ciclos de nucleação, crescimento e desprendimento de bolhas em uma placa aquecida. Dois valores de temperatura reduzida foram considerados: $T_r = 0,86$ e $T_r = 0,68$. O fator acêntrico utilizado foi o da água. Um menor valor para o parâmetro a da equação de estado de Peng-Robinson foi utilizado de modo a obter uma maior espessura da interface, o que torna o modelo numericamente mais robusto. Os autores reportaram redução do fluxo de calor durante o processo de crescimento da bolha e aumento do fluxo durante o processo de molhabilidade do líquido, após o desprendimento. Uma análise do ciclo da bolha sobre superfícies hidrofílicas e hidrofóbicas foi realizada pelos autores. Foi reportado que a formação de bolha ocorre primeiramente na superfície hidrofóbica em comparação com a superfície hidrofílica. Após o desprendimento, um núcleo de vapor estava presente somente na superfície hidrofóbica. Em relação ao fluxo crítico de calor, os resultados mostraram que este diminui com a diminuição da molhabilidade da superfície. Em relação à comparação entre resultados do ciclo de uma bolha para diferentes temperaturas reduzidas, os autores reportaram o diâmetro do núcleo de vapor em função do tempo, conforme apresentado na Figura 17.

Figura 17 – Crescimento da bolha em uma superfície aquecida (à esquerda) e campo de velocidades (à direita)

Fonte: Adaptado de [Fang et al. \(2017\)](#)

Considerando o resultado apresentado pelos autores nota-se que o diâmetro da bolha para $T_r = 0,68$ é inferior ao obtido para $T_r = 0,86$, o que é um resultado inconsistente do ponto de vista teórico.

[Gong et al. \(2018\)](#) realizaram um estudo numérico de simulação de diferentes regimes de ebulição, para $T_r = 0,86$, utilizando o modelo dos pseudopotenciais e os

parâmetros de [Li et al. \(2015\)](#). Entretanto, os autores argumentaram que a equação da energia resolvida no trabalho de [Li et al. \(2015\)](#), dada pela Equação 2.157, é incorreta. Por este motivo, os autores consideraram que a equação de conservação da energia a ser resolvida é dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{p}{\rho c_v} \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (2.171)$$

Na Equação 2.171, a pressão é calculada pela equação de estado não-ideal. Entretanto, partindo-se da Equação 2.157 e utilizando-se a equação de gás ideal, $p = \rho RT$, no cálculo da pressão obtém-se a Equação 2.171. Desta forma, a equação da energia resolvida por [Gong et al. \(2018\)](#) é incorreta. Ainda assim, os autores conseguiram simular diferentes regimes de ebulição com este modelo.

Na literatura, alguns estudos de simulação numérica tridimensional da formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando o método dos pseudopotenciais já foram realizados. [Chang, Huang e Lu \(2017\)](#) realizaram um estudo numérico tridimensional do crescimento de uma bolha em um meio líquido quiescente. As simulações foram realizadas utilizando o Método de *Lattice* Boltzmann híbrido, no qual a equação do momentum é resolvida pelo Método de *Lattice* Boltzmann e a equação da energia é resolvida pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Dessa forma, de acordo com os autores, é possível evitar o surgimento de correntes espúrias típicas da simulação deste tipo de problema. O estudo realizado compreendeu dois estágios de crescimento de bolhas em um meio líquido quiescente: o crescimento isotérmico e o crescimento isobárico. O primeiro está associado à dominância de forças de inércia, uma vez que a pressão no interior da bolha é muito elevada. Neste caso, o efeito da transferência de calor pode ser desprezado. Para o segundo, após o crescimento da bolha, a pressão e temperatura no interior da mesma é reduzido. Assim, o efeito de inércia pode ser desprezado e o crescimento da bolha se dá à pressão constante, dependendo principalmente da transferência de calor a partir do líquido superaquecido. Os resultados numéricos foram comparados com relações analíticas disponíveis na literatura, dadas pela Equação de Rayleigh-Plesset ([BRENNEN, 1993](#)) e a Lei D^2 de evaporação de uma gota ([KUO, 1986](#)). A comparação dos resultados revelou que o Método de *Lattice* Boltzmann forneceu excelentes resultados para a simulação das duas fases de crescimento de uma bolha em um meio líquido quiescente.

[Yu et al. \(2018\)](#) realizaram um estudo numérico tridimensional da transferência de calor por ebulição em superfícies com estruturas com condições de molhabilidade mista (combinação de porções hidrofílica e hidrofóbica). O Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais foi utilizado para o modelo hidrodinâmico e o método de Runge-Kutta de 4ª ordem para o modelo térmico. As simulações foram realizadas para $T_r = 0,8$. O fator acêntrico utilizado foi o da água. Os autores reportaram que o aumento do ângulo de contato da região hidrofílica pode aumentar a nucleação de bolhas em uma superfície

com molhabilidade mista. Por outro lado, um maior ângulo de contato pode levar à uma rápida evolução para os regimes de ebulição em transição ou ebulição em filme. O ângulo de contato ótimo e largura ótima do pilar variam de acordo com o superaquecimento da superfície, sendo que ambos diminuem com o aumento do superaquecimento. Os autores afirmaram que isso demonstra que a região hidrofílica tem um papel fundamental durante o aumento do superaquecimento.

Li et al. (2020) realizaram um estudo numérico tridimensional da intensificação da ebulição nucleada pela combinação de superfícies estruturadas e molhabilidade mista. O Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais foi utilizado para o modelo hidrodinâmico e o método de Runge-Kutta de 4^a ordem para o modelo térmico. As simulações foram realizadas para $T_r = 0,8$. Os autores desenvolveram um tipo de superfície estruturada com molhabilidade mista que intensifica a ebulição nucleada. Adicionalmente, foi realizada uma análise da influência da largura e forma da superfície estruturada. Os autores reportaram que a estrutura quadrada intensifica mais a taxa de transferência de calor do que as estruturas circular e quadrada com rotação de 45°.

2.6.5 Análise crítica dos trabalhos da literatura

Em relação aos trabalhos que simularam a formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando-se o Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais, nota-se que a grande maioria realizou simulações para temperaturas reduzidas superiores a 0,8, ou seja, $T_r \geq 0,8$. Isso é justificado pelas instabilidades que surgem devido às correntes espúrias próximas à interface. Essas correntes espúrias são maiores quando a temperatura reduzida é menor, devido ao aumento da tensão superficial. Cabe ressaltar aqui que as instabilidades surgem mesmo com a utilização do operador colisão MRT.

Além disso, nota-se que nenhum dos trabalhos buscou obter os parâmetros de simulação (em unidades de *lattice*) com base em parâmetros de um fluido específico. De fato, embora todos os trabalhos da revisão bibliográfica utilizem o fator acêntrico da água nas simulações, a razão de densidades simulada à temperatura reduzida utilizada não corresponde à razão de densidades da água. Adicionalmente, foram citados vários trabalhos que utilizaram uma formulação incorreta para a equação de conservação da energia mas reportaram resultados coerentes qualitativamente. Isto poderia ser explicado pelo fato de alguns termos do termo fonte, ϕ , serem desprezíveis em relação aos demais.

Considerando as observações anteriores, de modo a possibilitar simulações realizadas a temperaturas reduzidas inferiores, a presente tese combina os modelos propostos por Li, Luo e Li (2013) e Li e Luo (2013) resultando em um modelo consistente do ponto de vista termodinâmico e possibilita o ajuste da tensão superficial de forma independente à razão de densidades. Por meio deste modelo e de um modelo para definição dos parâmetros em unidades de *lattice* com base em parâmetros do sistema físico (em unidades do sistema

internacional) realizam-se simulações utilizando as propriedades termofísicas do fluido HFE-7100.

3 MODELO E METODOLOGIA NUMÉRICA

Neste capítulo serão apresentadas as equações complementares que irão compôr o modelo numérico com operador MRT, incorporando-se os modelos de [Li, Luo e Li \(2013\)](#) e [Li e Luo \(2013\)](#). Desta forma, garante-se a consistência termodinâmica e o ajuste da tensão superficial de forma independente à razão de densidades. A equação de estado de Peng-Robinson é utilizada para calcular o pseudopotencial. Para a solução do modelo numérico da energia emprega-se o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem, em conjunto com o Método de Diferenças Finitas. Além disso serão apresentadas as condições de contorno e as condições iniciais.

3.1 Equações complementares e metodologia numérica para o modelo hidrodinâmico

O modelo hidrodinâmico baseia-se na solução da equação de Lattice Boltzmann para o operador MRT, por meio das operações de colisão e transmissão. Por meio do modelo de [Li, Luo e Li \(2013\)](#), adiciona-se o termo de inclusão das forças externas modificado para garantir a consistência termodinâmica. Por meio do modelo de [Li e Luo \(2013\)](#), introduz-se o termo de ajuste da tensão superficial. Desta forma, a operação de colisão é dada pela Equação 2.145. A força de interação intermolecular é calculada pela Equação 2.113. A operação de transmissão é realizada pela equação mesma apresentada no capítulo anterior, ou seja, Equação 2.55.

Além da força de interação intermolecular, outras forças existentes no problema de formação de bolhas em superfícies aquecidas devem ser incorporadas ao modelo hidrodinâmico. A força de empuxo é introduzida conforme [Yuan e Schaefer \(2006\)](#), por meio da Equação 3.1:

$$\mathbf{F}_g = g(\rho - \bar{\rho}) \quad (3.1)$$

Na Equação 3.1, g representa a aceleração da gravidade e $\bar{\rho}$ representa a densidade média, que é calculada considerando todo o domínio computacional. Esta implementação da força de empuxo é a mais utilizada na literatura, pois garante que a aceleração do sistema seja nula ([CHEN et al., 2014](#)).

A força de interação da superfície sólida e o fluido, utilizada para ajustar o ângulo de contato, é introduzida conforme [Li et al. \(2015\)](#) pela Equação 3.2:

$$\mathbf{F}_{sup} = -\frac{\psi(\mathbf{x}, t)}{3} \sum_i G_s w'_i (|\mathbf{c}_i|^2) s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \mathbf{c}_i \Delta t \quad (3.2)$$

Na Equação 3.2, G_s é um parâmetro que representa a magnitude da interação entre o fluido e o sólido de modo a ajustar ângulos de contato, $s(\mathbf{x})$ é uma função que é unitária caso a posição $\mathbf{x}$ corresponda ao sólido e nula do contrário.

Os campos de densidades e velocidades são obtidos diretamente da função de distribuição, $f_i(\mathbf{x}, t)$, por meio das Equações 3.3 e 3.4, considerando o efeito da força total $\mathbf{F}_{total} = \mathbf{F}_{int} + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_{sup}$, respectivamente:

$$\rho = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.3)$$

$$\mathbf{v} = \frac{\sum_i \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t)}{\rho} + \frac{\mathbf{F}_{total}}{2\rho} \quad (3.4)$$

Para o modelo utilizado, as equações hidrodinâmicas resolvidas obtidas por meio da Expansão de Chapman-Enskog são expressas por (LI et al., 2015):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{P} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma} + \mathbf{F}_{sup} + \mathbf{F}_g \quad (3.6)$$

Na Equação 3.6 nota-se que os efeitos das forças de empuxo e da força de interação de superfície aparecem de forma explícita. A força de interação intermolecular é introduzida por meio do tensor pressão. Para o modelo utilizado nesta tese, composto pelas formulações de Li, Luo e Li (2013), Li e Luo (2013), o tensor pressão $\mathbf{P}$ é modificado pelo ajuste da condição de estabilidade mecânica do modelo de Li, Luo e Li (2013) e a possibilidade de ajuste da tensão superficial por meio do modelo de Li e Luo (2013):

$$\mathbf{P} = \left(p_{EE} + \frac{G^2 c^4}{6} \sigma_{MRT} |\nabla \psi|^2 + \frac{G c^4 (1 + 2\kappa)}{12} \psi \nabla^2 \psi \right) \mathbf{I} + \frac{G c^4 (1 - \kappa)}{6} \psi \nabla \nabla \psi \quad (3.7)$$

Na Equação 3.7, o parâmetro σ_{MRT} tem a função de garantir a consistência termodinâmica e o parâmetro κ é utilizado para ajustar a tensão superficial.

3.2 Metodologia numérica para o modelo térmico

Seguindo a abordagem introduzida por Li et al. (2015), a solução numérica da equação da energia baseia-se no Método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Isso é justificado pelo fato de que, ao utilizar o Método de *Lattice Boltzmann* para resolver esta equação, o termo-fonte ainda deve ser discretizado por diferenças finitas. Assim, por meio da integração

temporal da Equação 2.157 pelo Método de Runge-Kutta de 4ª ordem, a temperatura no próximo instante de tempo é calculada por:

$$T(\mathbf{x}, t + \Delta t) = T(\mathbf{x}, t) + \frac{(h_1 + 2h_2 + 2h_3 + h_4)}{6} \quad (3.8)$$

Na Equação 3.8, h_1 , h_2 , h_3 e h_4 são calculados, respectivamente, por:

$$h_1 = \left[-\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right]_{T(\mathbf{x}, t)} \quad (3.9)$$

$$h_2 = \left[-\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right]_{T(\mathbf{x}, t) + \Delta t \frac{h_1}{2}} \quad (3.10)$$

$$h_3 = \left[-\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right]_{T(\mathbf{x}, t) + \Delta t \frac{h_2}{2}} \quad (3.11)$$

$$h_4 = \left[-\mathbf{v} \cdot \nabla T + \frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \right]_{T(\mathbf{x}, t) + \Delta t h_3} \quad (3.12)$$

Cabe ressaltar que o termo difusivo foi expandido conforme $\frac{\nabla \cdot (k \nabla T)}{\rho c_v} = \alpha \nabla^2 T + \frac{\nabla k \cdot \nabla T}{\rho c_v}$.

As derivadas de primeira ordem e de segunda ordem são calculadas com base nos esquemas de discretização apresentados em Lee e Lin (2005). Estes esquemas são dados, respectivamente, pelas Equações 3.13 e 3.14 apresentados para um campo genérico, $H(\mathbf{x})$:

$$\frac{\partial H(\mathbf{x})}{\partial x_j} = \frac{1}{c_s^2} \sum_i w_i H(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) c_{ij} \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial^2 H(\mathbf{x})}{\partial x_j^2} = \frac{2}{c_s^2} \sum_i w_i [H(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - H(\mathbf{x})] \quad (3.14)$$

3.3 Condições de contorno

Nesta seção é descrita a implementação das condições de contorno para os modelos hidrodinâmico e térmico.

3.3.1 Modelo hidrodinâmico

Para o modelo hidrodinâmico, as condições de contorno são dadas em termos da função distribuição. Neste trabalho serão utilizadas as condições de contorno consideradas por Li et al. (2015). Neste caso, as superfícies inferior e superior serão modeladas como paredes sólidas em repouso e para as superfícies laterais são consideradas condições de

contorno do tipo periódicas. Considerando a última, assume-se então que o domínio computacional tem dimensão suficientemente grande nesta direção. As condições de contorno do tipo periódicas são facilmente aplicadas por meio de uma implementação numérica apropriada da operação de transmissão (*streaming*), dada pela Equação 2.53.

Uma representação esquemática do domínio computacional é apresentada na Figura 18, com dimensões L_x e L_y , incluindo a superfície de aquecimento. Considerando o esquema de velocidades $D2Q9$, o empregado para realizar as simulações, e o domínio representado pela Figura 18, tem-se que, após a operação de transmissão (*streaming*), as funções distribuição com direções para o interior do domínio computacional devem ser determinadas, conforme apresentado na Figura 19.

Para a superfície lateral esquerda ($x = 0$), a condição de contorno do tipo periódica é expressa pela relação a seguir, considerando as direções $i = 1, 5, 8$:

$$f_i^*(\mathbf{x}, t) = f_i^*(\mathbf{x} + L_x, t) \quad (3.15)$$

Para a superfície lateral direita ($x = L_x$), a condição de contorno do tipo periódica é expressa pela relação a seguir, considerando as direções $i = 3, 6, 7$:

$$f_i^*(\mathbf{x} + L_x, t) = f_i^*(\mathbf{x}, t) \quad (3.16)$$

A condição na interface fluido-sólido aplicada nesta tese é a condição de não-deslizamento. No Método de *Lattice Boltzmann*, esta condição de contorno pode ser implementada por meio do esquema *bounce-back* (GINZBOURG; ADLER, 1994).

O esquema *bounce-back* baseia-se na condição de que, durante a etapa de transmissão, as populações que atingem a parede são refletidas na direção do domínio, conforme a Figura 20. Dessa forma, as componentes normal e tangencial da velocidade são revertidas.

A formulação em termos da função distribuição para a condição de contorno *bounce-back* baseia-se em igualar as funções distribuição desconhecidas às funções distribuição opostas à estas na interface fluido-sólido. Considerando o esquema de discretização no espaço de velocidades $D2Q9$, para a interface fluido-sólido indicada na Figura 21, as seguintes igualdades devem ser cumpridas (KRÜGER et al., 2017):

$$f_2^*(\mathbf{x}, t) = f_4^*(\mathbf{x}, t) \quad (3.17)$$

$$f_5^*(\mathbf{x}, t) = f_7^*(\mathbf{x}, t) \quad (3.18)$$

$$f_6^*(\mathbf{x}, t) = f_8^*(\mathbf{x}, t) \quad (3.19)$$

Figura 18 – Representação esquemática do domínio computacional

Fonte: Próprio autor

Figura 19 – Esquema das condições de contorno para o esquema de velocidades D2Q9

Fonte: Próprio autor

Outro esquema que possibilita a implementação da condição de não-deslizamento foi proposto por [Zou e He \(1997\)](#). Neste trabalho, os autores desenvolveram um esquema geral para paredes sólidas com uma determinada velocidade, $\mathbf{v}_p$. Este é o esquema adotado neste trabalho. Por simplicidade, a função distribuição será apresentada simplesmente por f_i^* , omitindo-se o argumento $(\mathbf{x}, t)$. Supondo que a parede sólida inferior possua densidade ρ_p (a ser calculada), velocidade dada por $\mathbf{v}_p = (v_{p,x}, v_{p,y})$ e desconsiderando-se inicialmente o efeito de forças externas, as seguintes relações podem ser obtidas, considerando as

Figura 20 – Representação esquemática do esquema *bounce-back*

Fonte: Modificado de Krüger et al. (2017)

Figura 21 – Formulação do esquema *bounce-back* para o esquema D2Q9

Fonte: Modificado de Mohamad (2011)

Equações 3.3 e 3.4:

$$f_2^* + f_5^* + f_6^* = \rho_p - (f_9^* + f_1^* + f_3^* + f_4^* + f_7^* + f_8^*) \quad (3.20)$$

$$f_5^* - f_6^* = \rho_p v_{p,x} - (f_1^* - f_3^* - f_7^* + f_8^*) \quad (3.21)$$

$$f_2^* + f_5^* + f_6^* = \rho_p v_{p,y} + (f_4^* + f_7^* + f_8^*) \quad (3.22)$$

Combinando-se as Equações 3.20 e 3.22, pode-se calcular a densidade da parede sólida, ρ_p :

$$\rho_p = \frac{1}{1 - v_{p,y}} [f_9^* + f_1^* + f_3^* + 2(f_4^* + f_7^* + f_8^*)] \quad (3.23)$$

Entretanto, as componentes nas direções 2, 5 e 6 são desconhecidas. O fechamento do sistema de equações baseia em admitir que a regra de *bounce-back* é aplicada para a parcela de não-equilíbrio ($f_i^{neq} = f_i - f_i^{eq}$) da função distribuição nas direções normais, 2 e 4:

$$f_2^* - f_2^{eq} = f_4^* - f_4^{eq} \quad (3.24)$$

Desta forma, equações para as direções desconhecidas podem ser obtidas:

$$f_2^* = f_4^* + \frac{2}{3}\rho_p v_{p,y} \quad (3.25)$$

$$f_5^* = f_7^* - \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) + \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} + \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} \quad (3.26)$$

$$f_6^* = f_8^* - \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) - \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} + \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} \quad (3.27)$$

Um procedimento análogo pode ser obtido para o contorno superior, de modo que a densidade no contorno e as funções distribuição das direções desconhecidas podem ser obtidas:

$$\rho_p = \frac{1}{1 + v_{p,y}} [f_9^* + f_1^* + f_3^* + 2(f_2^* + f_5^* + f_6^*)] \quad (3.28)$$

$$f_4^* = f_2^* - \frac{2}{3}\rho_p v_{p,y} \quad (3.29)$$

$$f_7^* = f_5^* + \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) - \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} - \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} \quad (3.30)$$

$$f_8^* = f_6^* + \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) + \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} - \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} \quad (3.31)$$

Considera-se agora o efeito das forças externas no cálculo da função distribuição nos contornos inferior e superior. De acordo com [Krüger et al. \(2017\)](#), pela expansão de Chapman-Enskog para o contorno superior sob o efeito das forças, as Equações 3.29, 3.30 e 3.31 são modificadas e as equações a serem aplicadas são dadas por:

$$\rho_p = \frac{1}{1 + v_{p,y}} \left[f_9^* + f_1^* + f_3^* + 2(f_2^* + f_5^* + f_6^*) + \frac{F_{total,y}}{2} \right] \quad (3.32)$$

$$f_4^* = f_2^* - \frac{2}{3}\rho_p v_{p,y} + \frac{F_{total,y}}{6} \quad (3.33)$$

$$f_7^* = f_5^* + \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) - \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} - \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} + \frac{F_{total,x}}{4} + \frac{F_{total,y}}{6} \quad (3.34)$$

$$f_8^* = f_6^* + \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) + \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} - \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} - \frac{F_{total,x}}{4} + \frac{F_{total,y}}{6} \quad (3.35)$$

Analogamente, para o contorno inferior, as equações que permitem o cálculo da densidade na parede e as funções distribuição desconhecidas são dadas por:

$$\rho_p = \frac{1}{1 - v_{p,y}} \left[f_9^* + f_1^* + f_3^* + 2(f_4^* + f_7^* + f_8^*) - \frac{F_{total,y}}{2} \right] \quad (3.36)$$

$$f_2^* = f_4^* + \frac{2}{3}\rho_p v_{p,y} - \frac{F_{total,y}}{6} \quad (3.37)$$

$$f_5^* = f_7^* - \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) + \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} + \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} - \frac{F_{total,x}}{4} - \frac{F_{total,y}}{6} \quad (3.38)$$

$$f_6^* = f_8^* - \frac{1}{2}(f_1^* - f_3^*) - \frac{1}{2}\rho_p v_{p,x} + \frac{1}{6}\rho_p v_{p,y} + \frac{F_{total,x}}{4} - \frac{F_{total,y}}{6} \quad (3.39)$$

Cabe ressaltar que, para o caso particular das simulações realizadas nesta tese, as velocidades da parede sólidas são nulas, de modo que $v_{p,x} = v_{p,y} = 0$.

3.3.2 Modelo térmico

Ao contrário do modelo hidrodinâmico, para o modelo térmico as condições de contorno são expressas diretamente no campo de temperaturas, uma vez que emprega-se o Método de Runge-Kutta de 4^a ordem.

Para o campo de temperaturas pode-se considerar, basicamente, condições de contorno de Dirichlet (temperatura constante) ou de Neumann (fluxo de calor constante). Para o primeiro caso, a equação evolutiva para a temperatura (Equação 3.8) é resolvida para os nós do interior do domínio e os contornos possuem temperatura conhecida. Para o segundo caso, as temperaturas nos contornos podem ser extrapoladas considerando os nós interiores, sendo que a temperatura no instante $t' = t + \Delta t$ é obtida pela Equação 3.8, conforme indicado em Li et al. (2016).

Para a condição de temperatura constante, os contornos superior e inferior são considerados com temperatura igual à de saturação. Para a condição de fluxo de calor constante, considera-se as superfícies superior e inferior como adiabáticas. Para ambas condições, assume-se que a superfície de aquecimento possui temperatura constante, dada por $T = T_i$.

3.4 Condições iniciais

Nesta seção é descrita a implementação das condições de iniciais para os modelos hidrodinâmico e térmico.

3.4.1 Modelo hidrodinâmico

Para as simulações do ciclo de uma bolha, o campo de densidades é imposto como uma mistura de líquido-vapor, com cada fase ocupando 50% do domínio computacional. Para as simulações da curva de ebulição, o campo de densidades é imposto como uma mistura de líquido-vapor, com cada vapor ocupando 40% do domínio computacional e fase líquida ocupando o restante (LI et al., 2015). Para ambos casos, o campo de velocidades inicial é considerado nulo (LI; ZHOU; YAN, 2017).

Como condição inicial para o modelo hidrodinâmico, tipicamente na literatura, emprega-se a função distribuição de equilíbrio como condição inicial. Desta forma, tem-se:

$$f_i(\mathbf{x}, 0) = f_i^{eq}(\mathbf{x}, 0) \quad (3.40)$$

Neste trabalho emprega-se uma estratégia distinta, baseada nos trabalhos de Caiazzo (2005) e Mei et al. (2006). Neste caso, conhecidos os campos de densidade e velocidade iniciais calcula-se a função distribuição de equilíbrio e esta é utilizada na inicialização. Posteriormente, somente o modelo hidrodinâmico, sem efeito da aceleração gravitacional, é resolvido até que os campos de densidade e velocidade atinjam a convergência, considerando um resíduo relativo de 10^{-4} . Após a convergência dos campos, o efeito da aceleração gravitacional é considerado e a equação de conservação da energia é resolvida.

3.4.2 Modelo térmico

Para o modelo térmico, a condição inicial é imposta assumindo-se temperatura uniforme no domínio computacional e igual à temperatura de saturação: $T_s = T_r T_c$.

3.5 Algoritmo de solução

Após a definição dos modelos hidrodinâmico e térmico apresenta-se a seguir o algoritmo de solução do modelo matemático:

1. Os campos macroscópicos de densidade, velocidade e temperatura são inicializados.
2. A função distribuição de equilíbrio é calculada por meio da Equação 2.27.
3. As forças externas (intermolecular, gravitacional, interação sólido-fluido) são calculadas por meio das Equações 2.113, 3.1 e 3.2, respectivamente, e o esquema de forças é implementado por meio da Equação 2.140.

4. Somente o modelo hidrodinâmico é resolvido por meio das operações de colisão e transmissão (Equações 2.54 e 2.55, respectivamente), sem influência da aceleração gravitacional.
5. As condições de contorno são aplicadas nas fronteiras por meio das Equações 3.15 e 3.16 (condições periódicas), Equações 3.33, 3.34, 3.35 (contorno superior) e Equações 3.37, 3.38 e 3.39 (contorno inferior).
6. A convergência dos campos macroscópicos é verificada. Em caso negativo retorna-se ao passo 3.
7. As forças externas são recalculadas para os novos campos macroscópicos de densidade e velocidade.
8. O modelo hidrodinâmico passa a ser resolvido sob a influência da aceleração gravitacional. As condições de contorno são aplicadas nas fronteiras pelas equações apresentadas anteriormente.
9. O modelo térmico é resolvido, incluindo as condições de contorno, e o campo de temperaturas é calculado para $t \rightarrow t + \Delta t$.
10. As forças externas são atualizadas com o novo campo de temperaturas e os campos macroscópicos de densidade e velocidade são atualizados.
11. Retornar ao passo 8 até o tempo total da simulação.

3.6 Definição de unidades e de parâmetros no Método de *Lattice Boltzmann*

As unidades utilizadas no Método de *Lattice Boltzmann* são próprias do método e são denominadas unidades de *lattice*. Cabe ressaltar que, até o presente momento, a discretização espacial e o avanço temporal em unidades de *lattice* apresentados foram expressos como Δx e Δt , respectivamente. A partir deste ponto, os parâmetros relevantes em unidades de *lattice* são representadas com o subscrito MLB, enquanto que as grandezas dadas em unidades do sistema físico (que serão denominadas como unidades do sistema internacional), são representadas com o subscrito SI.

A etapa de colisão é realizada considerando-se que a distância de um dado nó e seu nó vizinho é dada por Δx_{MLB} . Por outro lado, o avanço temporal associado à operação de transmissão (*streaming*) é dada por Δt_{MLB} . Na literatura, tanto a distância entre os *lattices* quando o avanço temporal são unitários: $\Delta x_{MLB} = \Delta t_{MLB} = 1$ (KRüGER et al., 2017).

A conversão das unidades de *lattice* para unidades do sistema internacional pode ser realizada por meio de fatores de conversão para as escalas de comprimento, tempo e

densidade, conforme Krüger et al. (2017). Estes fatores de conversão podem ser definidos, respectivamente por:

$$C_L = \frac{\Delta L_{SI}}{\Delta L_{MLB}} \quad (3.41)$$

$$C_t = \frac{\Delta t_{SI}}{\Delta t_{MLB}} \quad (3.42)$$

$$C_\rho = \frac{\rho_{SI}}{\rho_{MLB}} \quad (3.43)$$

Considerando as equações anteriores e o fato de que $\Delta x_{MLB} = \Delta t_{MLB} = 1$, tem-se naturalmente que $C_L = \Delta x_{SI}$, $C_t = \Delta t_{SI}$ e $C_\rho = \rho_{SI}$. Assim, os fatores de conversão são iguais aos parâmetros definidos no sistema internacional de unidades.

As relações anteriores podem ser utilizadas para relacionar grandezas em unidades de *lattice* com as grandezas correspondentes no sistema internacional. Por exemplo, a aplicação para a Equação 2.82 permite relacionar a viscosidade cinemática no sistema internacional com o tempo de relaxação temporal no Método de *Lattice* Boltzmann, τ_{MLB} , e a velocidade do som, $c_{s,MLB}$ (KRÜGER et al., 2017):

$$\nu_{SI} = c_{s,MLB}^2 (\tau_{MLB} - 0,5) \frac{\Delta x_{SI}^2}{\Delta t_{SI}} \quad (3.44)$$

É interessante notar que, considerando a Equação 2.82, a Equação 3.44 pode ser reescrita como:

$$\nu_{SI} = \nu_{MLB} \frac{\Delta x_{SI}^2}{\Delta t_{SI}} \quad (3.45)$$

Outra relação de extrema importância, particularmente no estudo da formação de bolhas em superfícies aquecidas, está relacionada à aceleração gravitacional em unidades de *lattice* e a aceleração gravitacional no sistema internacional (KRÜGER et al., 2017):

$$g_{SI} = g_{MLB} \frac{\Delta x_{SI}}{\Delta t_{SI}^2} \quad (3.46)$$

3.7 Proposta de um modelo para obtenção dos parâmetros em unidades de *lattice* para a simulação da formação de bolhas em superfícies aquecidas

A obtenção dos parâmetros em unidades de *lattice* a serem utilizados no Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais é realizada definindo-se, primeiramente, os parâmetros adimensionais para o problema de formação de bolhas em superfícies aquecidas. Para isso, faz-se necessária a definição das escalas de comprimento, velocidade e tempo.

Considerando o trabalho de [Son e Dhir \(1999\)](#), as escalas de comprimento L_0 , velocidade u_0 e de tempo t_0 são definidas como:

$$L_0 = \sqrt{\frac{\gamma}{g(\rho_l - \rho_v)}} \quad (3.47)$$

$$u_0 = \sqrt{gL_0} \quad (3.48)$$

$$t_0 = \frac{L_0}{u_0} \quad (3.49)$$

Ainda segundo [Son e Dhir \(1999\)](#), os parâmetros adimensionais de Reynolds (Re), Prandtl (Pr) e Jakob (Ja) podem ser expressos, respectivamente, por:

$$Re = \frac{u_0 L_0}{\nu} \quad (3.50)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (3.51)$$

$$Ja = \frac{c_p \Delta T}{h_{lv}} \quad (3.52)$$

Para o modelo hidrodinâmico, as viscosidades cinemáticas das fases devem ser obtidas para que as frequências de relaxação temporal ($\bar{\omega}_7$ e $\bar{\omega}_8$) associadas sejam calculadas.

O procedimento proposto nesta tese baseia-se na definição do fluido de trabalho e da temperatura reduzida na qual a simulação será realizada. A partir destas definições, as propriedades de transporte das fases no sistema internacional são obtidas por meio do *software* EES® (*Engineering Equation Solver*). Pode-se então calcular a escala de comprimento associada, $L_{0,SI}$. Em relação às grandezas em unidades de *lattice*, a definição da temperatura reduzida permite obter as densidades das fases, por meio da Regra de Maxwell, e a tensão superficial, por meio da simulação de uma gota estática imersa no vapor. Após o equilíbrio, a tensão superficial pode ser obtida pela Equação de Young-Laplace.

Para as unidades no sistema internacional, o número de Reynolds, dado pela Equação 3.50 pode ser calculado para cada fase, considerando a respectiva viscosidade cinemática. O mesmo pode ser afirmado para o número de Prandtl, dado pela Equação 3.51. Em relação ao número de Jacob, o superaquecimento, ΔT , corresponde à condição de superaquecimento da superfície, na qual a simulação será realizada.

Nessa tese propõe-se a escolha da discretização espacial, Δx_{SI} , e a partir desta, todas as demais grandezas podem ser calculadas. Definida uma discretização espacial, a

escala de comprimento em unidades de *lattice* pode ser calculada conforme Krüger et al. (2017):

$$L_{0,MLB} = \frac{L_{0,SI}}{\Delta x_{SI}} \quad (3.53)$$

A partir da escala de comprimento $L_{0,MLB}$, pode-se calcular a respectiva aceleração gravitacional por meio da Equação 3.47:

$$g_{MLB} = \sqrt{\frac{\gamma_{MLB}}{L_{0,MLB}^2 (\rho_{l,MLB} - \rho_{v,MLB})}} \quad (3.54)$$

Posteriormente, as escalas de velocidade e tempo podem ser calculadas, respectivamente, por:

$$u_{0,MLB} = \sqrt{g_{MLB} L_{0,MLB}} \quad (3.55)$$

$$t_{0,MLB} = \frac{L_{0,MLB}}{u_{0,MLB}} \quad (3.56)$$

O próximo passo é calcular as viscosidades cinemáticas das fases, utilizando os números de Reynolds correspondentes à cada fase calculados no sistema internacional:

$$\nu_{l,MLB} = \frac{u_{0,MLB} L_{0,MLB}}{Re_{l,SI}} \quad (3.57)$$

$$\nu_{v,MLB} = \frac{u_{0,MLB} L_{0,MLB}}{Re_{v,SI}} \quad (3.58)$$

Após o cálculos das viscosidades cinemáticas das fases, as respectivas difusividades térmicas podem ser calculadas:

$$\alpha_{l,MLB} = \frac{\nu_{l,MLB}}{Pr_{l,SI}} \quad (3.59)$$

$$\alpha_{v,MLB} = \frac{\nu_{v,MLB}}{Pr_{v,SI}} \quad (3.60)$$

A utilização de propriedades termofísicas distintas para cada uma das fases (por exemplo, a viscosidade cinemática e a difusividade térmica) requer que uma interpolação seja realizada de modo a considerar a variação destas grandezas ao longo da interface. A formulação mais comum para esta interpolação é dada pela Equação 3.61:

$$\varphi = \varphi_l \left(\frac{\rho - \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \right) + \varphi_v \left(\frac{\rho_l - \rho}{\rho_l - \rho_v} \right) \quad (3.61)$$

Na Equação 3.61, φ corresponde à propriedade de transporte local e φ_l e φ_v são as respectivas propriedades de transporte associadas à cada fase, líquida e vapor, respectivamente.

A discretização temporal em unidades do sistema internacional pode ser calculada considerando a Equação 3.45, que relaciona as viscosidades no sistema internacional e em unidades de *lattice*:

$$\Delta t_{SI} = \Delta x_{SI}^2 \frac{\nu_{MLB}}{\nu_{SI}} \quad (3.62)$$

Uma questão importante está relacionada ao cálculo do avanço temporal pela Equação 3.62: o mesmo avanço temporal deve ser obtido ao aplicar esta equação para a viscosidade da fase líquida ou da fase vapor. Desta forma, tem-se esta restrição em relação ao cálculo do avanço temporal. A mesma discretização espacial, Δx_{SI} , é utilizada no domínio computacional.

Por fim, calcula-se o número de iterações que devem ser realizadas em unidades de *lattice* para correspondência com 1 segundo de simulação do modelo no sistema internacional (KRÜGER et al., 2017):

$$N_{it,MLB} = \frac{1}{\Delta t_{SI}} \quad (3.63)$$

Cabe ressaltar que o procedimento apresentado anteriormente deve ainda considerar o limite de estabilidade do Método de *Lattice Boltzmann*. Nota-se claramente que pela Equação 3.44 deve-se ter $\tau_{MLB} > 0,5$. Por esse motivo, após o procedimento descrito anteriormente, deve-se verificar o valor calculado do tempo de relaxação temporal. Caso a condição de limite de estabilidade não seja verificada, deve-se considerar uma discretização espacial Δx_{SI} inferior. Por questões de não se manter no limite de estabilidade, considerou-se a condição de $\tau_{i,MLB} > 0,6$, para garantir a estabilidade do modelo. Cabe aqui ressaltar que somente faz-se necessário garantir esta condição para o tempo de relaxação correspondente à fase líquida, pois a fase líquida possui menor viscosidade cinemática que a fase vapor.

Por fim, apresenta-se um fluxograma para o cálculo dos parâmetros apresentados anteriormente, conforme proposta de modelo dessa tese, para o Método de *Lattice Boltzmann* dos pseudopotenciais na Figura 22.

Figura 22 – Fluxograma do procedimento para a definição dos parâmetros de simulação proposta nessa tese

Fonte: Próprio autor

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados resultados numéricos obtidos pela implementação e simulação da formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando o Método de *Lattice Boltzmann* dos pseudopotenciais. Nas primeiras duas seções, as simulações são realizadas com parâmetros da literatura. Assim, as variáveis utilizadas são apresentadas em unidades de *lattice*, da mesma forma que os demais trabalhos da literatura. Posteriormente, faz-se a aplicação do modelo para obtenção dos parâmetros em unidades de *lattice* com base em parâmetros do sistema internacional para o fluido HFE-7100.

Para todas as simulações, as frequências de relaxação foram escolhidas conforme o trabalho de Li, Luo e Li (2013): $\bar{\omega}_0 = \bar{\omega}_3 = \bar{\omega}_5 = 1$, $\bar{\omega}_1 = \bar{\omega}_2 = \bar{\omega}_4 = \bar{\omega}_6 = 1,1$. As frequências de relaxação $\bar{\omega}_7$ e $\bar{\omega}_8$ são calculadas a partir das viscosidades cinemáticas.

Todas as simulações foram realizadas em um computador *desktop* com processador Intel® Core i7-4790 CPU @ 3,60 GHz x 8, com 32 GB de memória RAM. O código computacional foi implementado no *software* MATLAB®.

4.1 Simulação do ciclo de uma bolha utilizando os dados da literatura

Nesta seção, simulações do ciclo de uma bolha são realizadas empregando-se os parâmetros do trabalho de Li, Zhou e Yan (2017). Neste trabalho, as simulações do ciclo de uma bolha foram realizadas para temperatura reduzida de $T_r = 0,86$. Os parâmetros da equação de Peng-Robinson são $a = \frac{3}{49}$, $b = \frac{2}{21}$ e $R = 1$. A temperatura crítica pode ser então obtida, sendo igual a $T_c = 0,1094$. As densidades de equilíbrio são $\rho_{l,MLB} = 6,5$ e $\rho_{v,MLB} = 0,38$. As propriedades termofísicas são $\nu_{l,MLB} = \nu_{v,MLB} = 0,1$, $\alpha_{l,MLB} = \alpha_{v,MLB} = 0,06$ e $c_{v,l,MLB} = c_{v,v,MLB} = 5$. Nota-se que a mesma difusividade térmica foi aplicada para ambas fases. A condutividade térmica de cada fase é calculada por $k = \alpha \rho c_v$, conforme Li, Zhou e Yan (2017). Nota-se então que os autores consideraram que $c_p \approx c_v$. O fator acêntrico é o da água, ou seja, $\omega_{EE} = 0,344$. Por fim, o parâmetro de ajuste da consistência termodinâmica é $\sigma_{MRT} = 0,1$.

Com os dados apresentados, primeiramente, a obtenção da tensão superficial é obtida pela simulação do problema hidrodinâmico de uma gota estática, imersa na fase vapor. A malha computacional é 200x200. Condições de contorno do tipo periódicas são aplicadas em todas as direções. O parâmetro κ , que permite o ajuste da tensão superficial é escolhido, inicialmente como $\kappa = 0$. Neste caso, o campo de temperatura é mantido constante e igual à temperatura de saturação. O campo de densidade para obtenção de

uma gota circular de líquido é definido conforme [Huang, Krafczyk e Lu \(2011\)](#):

$$\rho(x, y) = \frac{(\rho_l + \rho_v)}{2} - \frac{(\rho_l - \rho_v)}{2} \tanh \left[\frac{2 \left(\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} - \bar{R}_{ini} \right)}{W} \right] \quad (4.1)$$

Dos parâmetros da Equação 4.1, tem-se que $\bar{R}_{ini} = 50$ é o raio inicial da gota, (x_0, y_0) é a coordenada do centro do domínio computacional e $W = 5$ é a espessura da interface ([GUZELLA et al., 2020](#)). O critério de convergência da simulação é definido por meio do erro relativo do campo de densidade entre iterações consecutivas, considerando um resíduo de 10^{-8} . Após a convergência do campo de densidade, determina-se a tensão superficial por meio da equação de Young-Laplace:

$$\Delta p_{MLB} = \frac{\gamma_{MLB}}{R_{fim,LBM}} \quad (4.2)$$

Na Equação 4.2, Δp é a diferença de pressão entre o interior e o exterior da gota, γ é a tensão superficial e $\bar{R}_{fim}$ é o raio da gota. Cabe ressaltar que o raio de equilíbrio da gota (após a convergência da simulação), pode ser ligeiramente diferente do raio inicial da gota, $\bar{R}_0$. Por este motivo, após a convergência da simulação, o raio da gota é novamente obtido por um procedimento numérico, considerando que a interface encontra-se na posição em que $\rho = 0,5(\rho_l + \rho_v)$, conforme [Krüger et al. \(2017\)](#). A Figura 23 apresenta o campo de densidade obtido após a convergência da simulação.

Para os parâmetros do trabalho de [Li, Zhou e Yan \(2017\)](#), a tensão superficial calculada por meio da simulação para o modelo com o operador MRT é igual a $\gamma_{MLB} = 0,0857$, valor obtido para $\kappa = 0$. Para a simulação da formação de bolhas, as superfícies superior e inferior são modeladas como paredes sólidas adiabáticas (exceto para a superfície de aquecimento) e condições de contorno periódicas são assumidas nas paredes laterais. A superfície de aquecimento está localizada no centro da parede inferior e tem comprimento $L_i = 3$, sendo formada pelo nó central e pelos nós adjacentes à esquerda e à direita. A temperatura da superfície de aquecimento é constante e igual a $T_i = 1,25T_c$. A malha computacional empregada para as simulações é 150×300 , a mesma adotada por [Li, Zhou e Yan \(2017\)](#). O parâmetro de ajuste do ângulo de contato é escolhido como $G_s = 0$, de modo que o ângulo de contato é aproximadamente igual a 45° .

A Figura 24 apresenta os resultados do campo de densidade para distintos intervalos de tempo, para a condição em que $g_{MLB} = 2,5 \times 10^{-5}$. O campo de temperatura para os mesmos instantes é apresentado na Figura 25. É possível observar a formação de um núcleo de vapor próximo à superfície de aquecimento, devido a maior temperatura. Após $t = 5000$, nota-se o desprendimento da bolha devido ao efeito da força de empuxo.

Do ponto de vista teórico, o aumento da aceleração gravitacional resulta em um menor diâmetro e menor período de desprendimento. Isso é justificado pelo aumento

Figura 23 – campo de densidade obtido para $\kappa = 0$ com os dados de Li, Zhou e Yan (2017)

Fonte: Próprio autor

da força de empuxo, que favorece o desprendimento da bolha da superfície aquecida. Simulações do ciclo de uma bolha foram realizadas para distintos valores da aceleração da gravidade, iniciando-se em $g_{MLB} = 3,125 \times 10^{-6}$ até $g_{MLB} = 5 \times 10^{-5}$, com incrementos uniformes. Os resultados numéricos do diâmetro e período de desprendimento foram obtidos e são apresentados na Figura 26. Além disso, curvas ajustadas das relações baseadas no diâmetro e período de desprendimento considerando as correlações de Fritz (1935) e Zuber (1963) são consideradas. Estas correlações são dadas, respectivamente, pelas Equações 4.3 e 4.4:

$$D_b = 0,0208\theta \left[\frac{\gamma}{g(\rho_l - \rho_v)} \right]^{-0,5} \quad (4.3)$$

$$T_b = \frac{D_b}{0,59} \left[\frac{g(\rho_l - \rho_v)\gamma}{\rho_l^2} \right]^{-0,25} \quad (4.4)$$

Considerando estas correlações, as relações entre o diâmetro e período de despren-

Figura 24 – Resultados dos campos de densidade obtidos com os dados de Li, Zhou e Yan (2017), considerando $g_{MLB} = 2,5 \times 10^{-5}$ para distintos instantes de tempo

Fonte: Próprio autor

Figura 25 – Resultados dos campos de temperatura obtidos com os dados de Li, Zhou e Yan (2017), considerando $g_{MLB} = 2,5 \times 10^{-5}$ para distintos instantes de tempo

Fonte: Próprio autor

Figura 26 – Resultados do (a) diâmetro e (b) período de desprendimento da bolha versus aceleração da gravidade obtidos com os dados de Li, Zhou e Yan (2017)

Fonte: Próprio autor

dimento com a aceleração da gravidade são, respectivamente, $D_b \propto g^{-0.5}$ e $T_b \propto g^{-0.75}$. Nota-se que os resultados numéricos estão em razoável acórdância com as relações anteriores.

Durante o ciclo da bolha, o comportamento dinâmico do fluxo de calor médio-espacial permite a definição dos processos de expansão da bolha e molhabilidade do líquido. Para o primeiro processo, o efeito da expansão da bolha resulta em uma redução do fluxo de calor médio-espacial. Já para o segundo, o efeito de molhabilidade do líquido resulta em um aumento do fluxo de calor. O fluxo de calor médio-espacial pode ser definido pela seguinte relação:

$$\overline{q''}(t) = \frac{1}{L_i} \int_0^{L_i} \left(-k \frac{\partial T}{\partial y} \right)_{y=0} dx \quad (4.5)$$

Na Equação 4.5, o gradiente de temperaturas na parede é calculado por meio de uma aproximação em diferenças finitas de 2ª ordem.

O fluxo de calor médio-espacial transiente, na forma adimensional, pode ser expresso considerando a formulação introduzida por Gong e Cheng (2017):

$$\overline{q''}^{adim}(t) = \frac{\overline{q''}(t)L_0}{\nu_l \rho_l h_{lv}} \quad (4.6)$$

Na Equação 4.6, a entalpia de vaporização, h_{lv} , é calculada conforme o procedimento

de [Gong e Cheng \(2013\)](#) baseando-se na definição de entalpia dada pela Equação 4.7:

$$h = - \int \frac{1}{\rho^2} \left[T \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho - p \right] d\rho + \frac{p}{\rho} \quad (4.7)$$

Na Equação 4.7, p é a pressão calculada por meio da equação de estado não-ideal.

Considerando a equação de estado de Peng-Robinson, a equação resultante para o cálculo da entalpia é dada por:

$$h = \left[aT\eta(\omega_{EE}) \sqrt{\frac{\alpha(T)}{TT_c}} + a\alpha(T) \right] \frac{1}{2\sqrt{2}} \ln \left| \frac{2b^2\rho - 2b - 2\sqrt{2}b}{2b^2\rho - 2b + 2\sqrt{2}b} \right| \quad (4.8)$$

Na Equação 4.8, $\eta(\omega_{EE}) = (0,37464 + 1,54226\omega_{EE} - 0,26992\omega_{EE}^2)$. Portanto, a entalpia de vaporização pode ser calculada por $h_{lv} = h_v - h_l$.

Na Figura 27 são apresentados o diâmetro e o fluxo de calor médio-espacial adimensional versus tempo adimensional (adimensionalizado por meio da escala de tempo, t_0 , dada pela Equação 3.49) durante o ciclo da bolha. Para o primeiro ciclo, que é o mais longo em comparação com os demais, nota-se a redução do fluxo de calor até $t \approx 4000$ que corresponde ao processo de expansão da bolha. A partir deste instante, o fluxo de calor passa a aumentar, caracterizando o processo de molhabilidade do líquido. O pico do fluxo de calor corresponde ao instante de desprendimento da bolha da superfície aquecida.

Após a realização de uma comparação preliminar com resultados empíricos, mais especificamente o diâmetro e a frequência de desprendimento, o modelo numérico pode ser empregado para análises paramétricas bem como comparação de modelos distintos.

4.1.1 Comparação dos resultados obtidos por um modelo com o operador BGK e um modelo com o operador MRT

Nesta seção foram utilizados os modelos resultantes dos esquemas de [Li, Luo e Li \(2012\)](#), com o operador BGK, e [Li, Luo e Li \(2013\)](#) e [Li e Luo \(2013\)](#), com o operador MRT. O objetivo é comparar os resultados obtidos por meio dos dois modelos. Foram considerados os parâmetros de simulação de [Li, Zhou e Yan \(2017\)](#) ($T_r = 0,86$) e também para $T_r = 0,76$. Para $T_r = 0,76$ os parâmetros são: $\nu_{l,MLB} = 0,1$, $\nu_{v,MLB} = 0,2$, $\alpha_{l,MLB} = 0,0075$, $\alpha_{v,MLB} = 0,12$, $c_{p,l,MLB} = c_{v,l,MLB} = 7$ e $c_{p,l,MLB} = c_{v,l,MLB} = 5$. Cabe ressaltar que essas propriedades foram obtidas por meio de experimentação numérica. Para os parâmetros da equação de estado utilizados anteriormente tem-se que as densidades das fases para $T_r = 0,76$ são $\rho_l = 7,59$ e $\rho_v = 0,12$.

Como os esquemas de forças propostos por [Li, Luo e Li \(2012\)](#) e [Li, Luo e Li \(2013\)](#) resultam em tensores pressão que são distintos, as tensões superficiais serão distintas. Dessa forma, o primeiro passo ao realizar a comparação com os referidos modelos é garantir

Figura 27 – Resultados do diâmetro da bolha e o fluxo de calor médio-espacial adimensional versus tempo adimensional

Fonte: Próprio autor

que ambos tenham mesma tensão superficial. Uma vez que o modelo de [Li e Luo \(2013\)](#) permite o ajuste da tensão superficial, determina-se a tensão superficial obtida com o modelo de [Li, Luo e Li \(2012\)](#), que utiliza o operador BGK, e ajusta-se a tensão superficial do modelo que utiliza o operador MRT. Este procedimento deve ser realizado para ambas temperaturas reduzidas.

De modo a obter uma relação que permita o ajuste da tensão superficial em função do parâmetro κ , novas simulações da gota estática foram realizadas para valores de κ iniciando-se em $-0,50$ até $0,50$. Os resultados são apresentados na Figura 28, incluindo uma curva ajustada para cada temperatura reduzida.

Por meio da simulação da gota estática com o modelo com o operador BGK com o esquema de [Li, Luo e Li \(2012\)](#), a tensão superficial obtida é igual a $\gamma_{MLB} = 0,188$. Para que o modelo com o operador MRT tenha a mesma tensão superficial do modelo com o operador BGK, deve-se atribuir $\kappa = -1,18$, para $T_r = 0,86$, e $\kappa = -1,12$, para $T_r = 0,76$. Ajustada a tensão superficial, a comparação dos resultados pode ser realizada. A aceleração gravitacional para as simulações é $g_{MLB} = 2,5 \times 10^{-5}$ para $T_r = 0,86$, e $g_{MLB} = 1 \times 10^{-5}$ para $T_r = 0,76$.

Figura 28 – Resultados de tensão superficial versus parâmetro κ para (a) $T_r = 0,86$ e (b) $T_r = 0,76$

Fonte: Próprio autor

Figura 29 – campo de densidade para o ciclo de uma bolha para $T_r = 0,86$ com os modelos para os operadores (a) BGK (b) MRT

Fonte: Próprio autor

Figura 30 – campo de densidade para o ciclo de uma bolha para $T_r = 0,76$ com os modelos para os operadores (a) BGK (b) MRT

Fonte: Próprio autor

Os resultados dos campos de densidade obtidos com os dois modelos são apresentados nas Figuras 29 e 30, para $T_r = 0,86$ e $T_r = 0,76$ respectivamente. O diâmetro de desprendimento das bolhas é o mesmo para ambas temperaturas reduzidas e ambos modelos. Nota-se que, para $T_r = 0,86$, o período de desprendimento da bolha é muito semelhante para ambos modelos. Entretanto, para $T_r = 0,76$, nota-se uma maior discrepância no período de desprendimento, sendo que o modelo com o operador MRT possui um período menor que o modelo com o operador BGK. Esta diferença está relacionada a um efeito do esquema de forças de Li, Luo e Li (2012), que introduz a velocidade modificada na Equação 2.138, $\mathbf{v}'$, na equação de *Lattice Boltzmann*, cujos termos adicionais servem como aproximação para $\psi \nabla \psi$ (LI et al., 2016). Desta forma, para menores temperaturas reduzidas (maiores razões de densidade) a coexistência das fases é influenciada pela viscosidade cinemática e, conseqüentemente, pela frequência de relaxação temporal. Para o modelo com o operador MRT, essa influência da viscosidade influencia somente uma frequência de relação temporal. Com base nesse resultado, o modelo com o operador MRT deve ser utilizado para simulações com maiores razões de densidade (menores temperaturas reduzidas).

Figura 31 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$; (b) $G_s = 0$; (c) $G_s = 0,75$

Fonte: Próprio autor

4.1.2 Influência da molhabilidade do líquido

Uma análise da influência do ângulo de contato sobre os resultados de diâmetro e período de desprendimento foi realizada alterando-se o parâmetro G_s na Equação 3.2. Inicialmente, determina-se a influência de G_s sobre o ângulo de contato de uma gota de líquido. A malha computacional nessa simulação é de 300x300. Uma gota de líquido de raio $\bar{R}_{ini} = 50$ é inicializada próxima à superfície inferior. As condições de contorno nas paredes inferior e superior são tipo parede sólida. A Figura 31 apresenta os resultados da interação de uma gota com a superfície sólida após a convergência do campo de densidade para um resíduo relativo de 10^{-10} . Distintos valores de G_s foram considerados: -0,75; 0; 0,75. Nota-se que, por meio deste parâmetro, é possível ajustar o ângulo de contato e consequentemente a condição de molhabilidade. Neste caso, o aumento da molhabilidade ocorre quando o parâmetro G_s é reduzido.

O cálculo do ângulo de contato, θ_c , foi realizado utilizando o *software* livre imageJ (*Image Processing and Analysis in Java*). Para os valores do parâmetro G_s considerados, os ângulos de contato calculados são $\theta_c = 36^\circ$, $\theta_c = 45^\circ$ e $\theta_c = 56^\circ$, respectivamente.

Posteriormente, simulações do ciclo de uma bolha são realizadas para estes valores do parâmetro G_s . Os resultados obtidos para o campo de densidade são apresentados na Figura 32. Nota-se que o período de desprendimento é ligeiramente menor para a condição $G_s = -0,75$ em comparação com $G_s = 0,75$, resultando em um maior fluxo de calor médio-espacial, conforme apresentado na Figura 33.

Figura 32 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$ e (b) $G_s = 0,75$

Fonte: Próprio autor

4.1.3 Influência da tensão superficial

Uma vez que o modelo de Li e Luo (2013) permite o ajuste da tensão superficial independente da razão de densidades, uma análise da influência da tensão superficial sobre os resultados do ciclo de uma bolha foi realizada variando-se o parâmetro κ . Dois valores foram considerados: $\kappa = -0,75$ e $\kappa = 0,75$, além da simulação anterior obtida para $\kappa = 0$.

Os campos de densidade obtidos pela simulação são apresentados na Figura 34. É evidente o efeito da redução da tensão superficial sobre o ciclo da bolha, em que o diâmetro e o período de desprendimento são reduzidos significativamente. Isso ocorre devido à redução da força de tensão superficial, ressaltando que a força de empuxo é mantida constante nestes casos. O perfil da bolha após o desprendimento, apresentado na Figura 34b é característico de bolhas com tensão superficial reduzida.

O fluxo de calor médio-espacial é apresentado na Figura 35. Estes resultados

Figura 33 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$ e (b) $G_s = 0,75$

Fonte: Próprio autor

demonstram que, de fato, o fluxo de calor é maior para a condição de menor tensão superficial. Isso pode ser explicado pelo menor período de desprendimento da bolha.

4.1.4 Influência da difusividade térmica

Uma análise da influência da difusividade térmica sobre os resultados de diâmetro e período de desprendimento é realizada. Para as simulações apresentadas, todos os parâmetros são mantidos constantes, exceto pela difusividade térmica. Dois valores distintos para α_{MLB} foram considerados: 0,02 e 0,18, resultando em números de Prandtl iguais a $Pr_{MLB} = 5$ e $Pr_{MLB} = 0,56$, respectivamente.

Os resultados dos campos de densidade são apresentados na Figura 36. Para as simulações realizadas nota-se que a redução do número de Prandtl resulta em um aumento da condutividade térmica de ambas fases, uma vez que $k = \alpha \rho c_p$. Desta forma, o fluxo de calor médio-espacial aumenta com a redução do número de Prandtl, conforme os resultados apresentados na Figura 37.

Figura 34 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores da tensão superficial: (a) $\kappa = -0,75$ e (b) $\kappa = 0,75$

Fonte: Próprio autor

4.1.5 Influência da formulação da força de empuxo

Uma análise da influência da formulação da força de empuxo foi realizada, mantendo-se constantes os demais parâmetros de simulação. As formulações apresentadas em [Chen et al. \(2014\)](#), alternativas à Equação 3.1, são dadas pelas Equações 4.9 e 4.10:

$$\mathbf{F}_g = g(\rho - \rho_v) \quad (4.9)$$

$$\mathbf{F}_g = g\rho \quad (4.10)$$

Uma análise da Equação 4.9 mostra que a força de empuxo irá influenciar somente a fase líquida, enquanto a formulação dada pela Equação 4.10 resulta em uma força

Figura 35 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para $\kappa = -0,75$ e $\kappa = 0,75$

Fonte: Próprio autor

uniforme em todo o domínio computacional. Conforme sugerido por [Chen et al. \(2014\)](#), as formulações apresentadas não devem ser utilizadas em domínios com condições de contorno do tipo periódicas nos contornos superior e inferior, pois elas introduziriam uma aceleração no domínio computacional.

Os resultados dos campos de densidade obtidos por simulações do ciclo de uma bolha com estas formulações são apresentadas na Figura 38. Nota-se uma semelhança entre os resultados do campo de densidade obtidos para as formulações dadas pela Equações 4.9 e 4.10. Entretanto, estes resultados são significativamente distintos dos obtidos pela Equação 3.1, que é a formulação mais utilizada na literatura. Nota-se então que a formulação da força de empuxo é muito importante neste tipo de simulação já que o perfil da bolha pode ser bem distinto. Além disso, destaca-se o papel fundamental da aceleração gravitacional na estabilidade da simulação, por definir a velocidade característica.

Figura 36 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes valores da difusividade térmica: (a) $\alpha_{MLB} = 0,02$ e (b) $\alpha_{MLB} = 0,18$

Fonte: Próprio autor

4.1.6 Influência de escoamento plenamente desenvolvido

Uma análise da influência de um escoamento horizontal plenamente desenvolvido sobre o ciclo de uma bolha é realizado. Uma representação esquemática do domínio computacional é apresentada na Figura 39. Para estas simulações, a malha escolhida foi de 800x150. Um maior número de pontos foi escolhido na direção X em virtude da condição de contorno periódica aplicada nas laterais.

Considerando [Gong e Cheng \(2014\)](#), define-se o número de Reynolds para este problema conforme a Equação 4.11:

$$Re = \frac{V_{max} L_y}{\nu_l} \quad (4.11)$$

A implementação do efeito do escoamento é realizada por meio do efeito de uma

Figura 37 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para $\alpha_{MLB} = 0,02$ e $\alpha_{MLB} = 0,18$

Fonte: Próprio autor

força, cujas componentes nas direções x e y da Figura 18 são dadas por (KRÜGER et al., 2017):

$$F_{esc,x} = \frac{8V_{max}\mu}{L_y^2} \quad (4.12)$$

$$F_{esc,y} = 0 \quad (4.13)$$

Inicialmente, uma simulação isotérmica do escoamento plenamente desenvolvido foi realizada para $Re = 300$ e os resultados obtidos da velocidade adimensional em função da coordenada vertical adimensionalizada pela altura do domínio, L_y , são apresentados na Figura 40, após 100000 instantes de tempo, para garantir a convergência do campo de velocidades. Uma comparação com a solução analítica na forma adimensional é realizada (KIRBY, 2010). Nota-se que a solução numérica é capaz de prever corretamente o perfil plenamente desenvolvido para o escoamento no interior do domínio.

Figura 38 – Resultados dos campos de densidade obtidos para diferentes formulações para a força de empuxo dada pela: (a) Equação 4.9 e (b) Equação 4.10

Fonte: Próprio autor

Figura 39 – Representação esquemática do modelo numérico para ebulição com escoamento

Fonte: Próprio autor

Figura 40 – Comparação entre os resultados de velocidade adimensionalizada versus a altura adimensional do domínio obtidos pelo Método de *Lattice Boltzmann* e a solução analítica

Fonte: Próprio autor

Assim, de forma a garantir que o escoamento encontra-se plenamente desenvolvido, o escoamento isotérmico é simulado por 100000 instantes de tempo. Posteriormente, resolve-se a equação de conservação da energia. Distintos valores para o número de Reynolds são considerados: 300, 500, 700, 900, 1200. Os resultados dos campos de densidade para $Re = 300$ e $Re = 1200$ são apresentados na Figura 41 para distintos instantes de tempo para $Re = 300$ e $Re = 1200$, de forma a comparar as condições mais distintas. Nota-se que o período de desprendimento é reduzido com o aumento do número de Reynolds, devido ao aumento do efeito de advecção. Além disso, o aumento do número de Reynolds resulta no aumento do fluxo de calor médio-espacial, conforme demonstrado na Figura 42. Adicionalmente, nota-se que após 25000 instantes de tempo, os fluxos de calor tornam-se aproximadamente constantes e iguais.

Figura 41 – Resultados dos campos de densidade obtidos para (a) $Re = 300$ e (b) $Re = 1200$

Fonte: Próprio autor

Figura 42 – Resultados do fluxo de calor médio-espacial versus tempo para a simulação da ebulição com escoamento.

Fonte: Próprio autor

4.2 Simulação da curva de ebulição utilizando dados da literatura para diferentes temperaturas reduzidas

O método dos pseudopotenciais foi aplicado na literatura para simulação da curva de ebulição. Neste caso, considera-se que a superfície de aquecimento corresponde à totalidade da superfície inferior, ou seja, $L_i = L_x$ de acordo com a Figura 18. Nesta seção, diferentes temperaturas reduzidas foram consideradas e uma comparação qualitativa entre os resultados foi realizada considerando os parâmetros dos trabalhos de Li et al. (2015) e Gong e Cheng (2017).

No trabalho de Li et al. (2015), os diferentes regimes da curva de ebulição foram simulados para diferentes condições de molhabilidade do líquido. As simulações foram realizadas novamente para $T_r = 0,86$, cujas densidades de equilíbrio foram utilizadas na seção anterior. Os seguintes parâmetros foram utilizados: $\nu_{l,MLB} = 0,1$, $\nu_{v,MLB} = \frac{0,5}{3}$, $c_{v,MLB} = c_{v,l,MLB} = c_{v,v,MLB} = 6$ e $\alpha_{MLB} = \frac{0,028}{c_{v,MLB}}$. Da última relação, nota-se que os autores relacionaram a difusividade térmica com o calor específico a volume constante, o que difere da definição: $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$. Assim, conclui-se que os autores consideraram que $c_p \approx c_v$.

No trabalho de Gong e Cheng (2017), as simulações da curva de ebulição foram realizadas a $T_r = 0,9$. A equação de estado de Peng-Robinson foi utilizada, considerando o parâmetro $a = \frac{2}{49}$. De forma a obter a mesma temperatura crítica para as duas temperaturas reduzidas, o parâmetro a da equação de estado foi escolhido como $a = \frac{3}{49}$. Considerando $a = \frac{3}{49}$, tem-se que a temperatura crítica é a mesma para ambas condições. Para $T_r = 0,9$, as densidades de equilíbrio são $\rho_{l,MLB} = 5,9$ e $\rho_{v,MLB} = 0,58$. As viscosidades das fases são: $\nu_{l,MLB} = \nu_{v,MLB} = 0,06$. As difusividades térmicas são: $\alpha_{l,MLB} = 0,05$ e $\alpha_{v,MLB} = 0,06$. Por fim, os calores específicos utilizados foram: $c_{p,l,MLB} = c_{v,l,MLB} = 4$ e $c_{p,v,MLB} = c_{v,v,MLB} = 2$. Para todas as propriedades termofísicas utilizadas, o mesmo esquema de interpolação dado pela Equação 3.61 foi utilizado. O fator acêntrico é o da água: $\omega_{EE} = 0,344$. O parâmetro de ajuste da consistência termodinâmica é o mesmo das seção anterior: $\sigma_{MRT} = 0,1$. A aceleração da gravidade foi considerada igual a $g_{MLB} = 3 \times 10^{-5}$ para ambos os casos, assim como a malha computacional: 600x150. O parâmetro de ajuste do ângulo de contato foi assumido como $G_s = 0$, resultando em um ângulo de contato de $\theta_c = 45^\circ$. Condições de contorno do tipo parede sólida com temperatura constante foram assumidas para as superfícies inferior e superior, enquanto condições de contorno periódicas foram assumidas para as superfícies laterais. Na superfície inferior a temperatura é dada por $T_i = T_s + \Delta T$, sendo ΔT o superaquecimento da superfície. A parede superior possui temperatura constante e igual à de saturação, T_s . Estas mesmas condições de contorno foram consideradas por Li et al. (2015).

No trabalho de Li et al. (2015), flutuações de temperatura foram inseridas na equação de estado, utilizada no cálculo do pseudopotencial (Equação 2.122), de modo a

intensificar a formação de bolhas na superfície. Estas flutuações são necessárias uma vez que o superaquecimento é aplicado em toda a superfície de aquecimento. Neste trabalho, a flutuação de temperatura introduzida no pseudopotencial é aplicada no centro do domínio computacional e foi considerada igual a metade da temperatura crítica calculada anteriormente.

A metodologia utilizada por [Li et al. \(2015\)](#) para as simulações numéricas para diferentes valores do superaquecimento da superfície é descrita a seguir. Os autores definiram, por meio de simulações, que o início da ebulição (*ONB - Onset of Nucleate Boiling*) ocorre para $\Delta T = 0,0137$. Para simulações com superaquecimentos maiores, os autores simularam 20000 instantes para $\Delta T = 0,0137$ e, a partir desse instante, um novo valor para o superaquecimento da superfície foi utilizado. Em relação ao trabalho de [Gong e Cheng \(2017\)](#), nota-se que o superaquecimento da superfície é utilizado desde o início das simulações, ou seja, de maneira distinta ao procedimento adotado por [Li et al. \(2015\)](#). Nesta tese optou-se por realizadas as simulações da mesma forma que [Gong e Cheng \(2017\)](#), ou seja, utilizando o superaquecimento desejado desde o início da simulação.

Neste ponto, uma discussão à respeito da adimensionalização do superaquecimento da superfície é realizada a seguir. No trabalho de [Gong e Cheng \(2017\)](#), os autores adimensionalizaram o superaquecimento na superfície por meio do número de Jakob. Entretanto, baseado na revisão bibliográfica realizada nesta tese, nota-se que a escolha para o calor específico em unidades de *lattice* aparenta ser por experimentação numérica. Por outro lado, no trabalho de [Li et al. \(2015\)](#), os autores apresentaram todos os resultados de fluxo de calor médio versus superaquecimento da superfície em unidades de *lattice*.

Nesta tese optou-se por adimensionalizar o fluxo de calor médio-espacial e o superaquecimento da superfície utilizando-se parâmetros que podem ser obtidos por meio da equação de estado e da temperatura de saturação. Isto é justificado pelo fato do valor do calor específico utilizado pelos trabalhos mencionados não ter sido obtido como função da temperatura (como realizado no sistema de unidades internacional). Desta forma, propõe-se adimensionalizar o superaquecimento da superfície de acordo com a Equação 4.14:

$$\Delta T^{adim} = \frac{\Delta T}{T_c} \quad (4.14)$$

Após o cálculo do fluxo de calor médio-espacial utilizando a Equação 4.6, realiza-se a média temporal, por meio da Equação 4.15:

$$\overline{q''^{adim}} = \frac{1}{T_t} \int_{t=0}^{t=T_t} q''^{adim}(t) dt \quad (4.15)$$

Em que T_t é o tempo total de simulação. A simulação é realizada até que o fluxo

Figura 43 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ e $T_r = 0,86$

Fonte: Próprio autor

de calor médio-espacial permaneça constante entre 1000 iterações.

As simulações foram realizadas com superaquecimento da superfície igual a $\Delta T = 0,005$ para ambas temperaturas reduzidas. Esse valor foi aumentado progressivamente, considerando incrementos de 0,001, até o valor final de $\Delta T = 0,04$. Os resultados do fluxo de calor médio, obtidos para simulação numérica para as temperaturas reduzidas $T_r = 0,90$ e $T_r = 0,86$, são apresentados na Figura 43. Na mesma figura é indicado o início da ebulição nucleada (*ONB - Onset of Nucleate Boiling*) para ambas temperaturas reduzidas. Para $T_r = 0,90$, o início da ebulição nucleada ocorre para $\Delta T = 0,008$ (em unidades de *lattice*) e para $T_r = 0,86$, ocorre para $\Delta T = 0,013$ (em unidades de *lattice*).

Ainda em relação à Figura 43, nota-se que o fluxo crítico foi maior para $T_r = 0,90$ em comparação com $T_r = 0,86$. Considerando o trabalho de Zuber (1958) e considerando a água como fluido, uma vez que os trabalhos de Li et al. (2015) e Gong e Cheng (2017) utilizaram o fator acêntrico da água, tem-se que o fluxo crítico obtido para $T_r = 0,86$ deveria ter sido superior ao obtido para $T_r = 0,90$. Entretanto, não é possível garantir que os parâmetros em unidades de *lattice* para as temperaturas reduzidas consideradas

Figura 44 – Curvas de ebulição para distintas pressões de saturação para o fluido HFE-7100, considerando uma superfície polida

Fonte: Adaptado de [Alvariño et al. \(2019\)](#)

correspondem à simulação do mesmo fluido. Isso é justificado pois as propriedades de transporte não foram obtidas como funções da temperatura, apesar da utilização do fator acêntrico da água.

Em relação ao fluxo crítico de calor, ressalta-se aqui a sua forte dependência com a temperatura reduzida como reportado na literatura, por exemplo em [Alvariño et al. \(2019\)](#). Em relação ao estudo citado, a Figura 44 apresenta resultados de curvas de ebulição para o fluido HFE-7100 em distintas pressões de saturação, considerando uma superfície de aquecimento polida.

A Figura 45 apresenta os campos de densidade e temperatura obtidos para a condição de início da ebulição para $T_r = 0,90$. Em relação ao campo de densidade nota-se, para $t = 10000$, a redução da densidade nas proximidades à superfície aquecida, devido

Figura 45 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,90$ em regime de ebulição nucleada

Fonte: Próprio autor

à maior temperatura. Posteriormente, para $t = 20000$, observa-se o desprendimento de algumas bolhas, assim como a coalescência de núcleos na região central. Em relação ao campo de temperatura, nota-se claramente o efeito do aumento da temperatura sobre o líquido próximo à superfície de aquecimento.

A Figura 46 apresenta os campos de densidade e temperatura obtidos para a condição de início da ebulição para $T_r = 0,86$. Nota-se que o desprendimento das primeiras bolhas ocorre somente para $t = 30000$. Ao contrário dos resultados do campo de densidade obtido para $T_r = 0,90$ e mostrado na Figura 45a, não se observa coalescência de bolhas na superfície aquecida. Em relação ao campo de temperatura, nota-se que o efeito do aumento da temperatura sobre a redução da densidade do fluido próxima à superfície de aquecimento.

A Figura 47 apresenta os campos de densidade e temperatura para $T_r = 0,90$ considerando $\Delta T = 0,014$. Este superaquecimento foi escolhido por estar localizado no regime de ebulição nucleada plenamente desenvolvida. Nota-se a presença de mais núcleos de

Figura 46 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,86$ em regime de ebulição nucleada

Fonte: Próprio autor

vapor na superfície aquecida, assim como a maior coalescência entre bolhas, dando origem a bolhas maiores. A Figura 48 apresenta os campos para $\Delta T = 0,017$, considerando o mesmo critério de escolha para o superaquecimento da superfície. Novamente, nota-se a presença de mais núcleos de vapor na superfície assim como uma maior coalescência das bolhas. Pela temperatura de saturação ser inferior, nota-se que o diâmetro de desprendimento das bolhas é maior que os observados para $T_r = 0,90$.

A Figura 49 apresenta os campos de densidade e temperatura obtidos para $T_r = 0,90$ considerando $\Delta T = 0,019$. Para este valor de superaquecimento tem-se a condição de fluxo crítico, em que vapor é permanentemente gerado em toda a superfície de aquecimento. Um aumento do superaquecimento além desta condição resultará no regime de ebulição em transição. Para $T_r = 0,86$ a mesma condição é mostrada na Figura 50. Neste caso, o superaquecimento é $\Delta T = 0,022$.

Por fim, o aumento sucessivo do superaquecimento da superfície, para além da condição de fluxo crítico, tem-se o regime de ebulição em filme. Para a ebulição em filme,

Figura 47 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,90$ em regime de ebulição nucleada plenamente desenvolvida

Fonte: Próprio autor

o fluxo de calor fornecido pela superfície de aquecimento é elevado o suficiente para manter uma condição de película de vapor abaixo do líquido. Os campos de densidade e temperatura para $T_r = 0,90$ são apresentados na Figura 51 e para $T_r = 0,86$ são apresentados na Figura 52, ambos para a condição de superaquecimento de $\Delta T = 0,04$. Nota-se que a superfície de aquecimento é coberta por uma película de vapor, devido à sua elevada temperatura. Posteriormente, devido à instabilidades na interface líquido-vapor, bolhas de vapor são formadas na superfície e despreendem-se da mesma.

4.2.1 Influência da molhabilidade do líquido

Considerando os dados do trabalho de Gong e Cheng (2017), uma análise da influência da molhabilidade foi realizada por meio do parâmetro G_s na Equação 3.2. Os mesmos valores considerados para simulação do ciclo de uma bolha foram considerados: -0,75 e 0,75. Cabe ressaltar que os resultados da curva de ebulição apresentada na Figura 43 para $T_r = 0,90$ foram obtidos para $G_s = 0$. Dessa forma, simulações numéricas foram realizadas somente para $G_s = -0,75$ e $G_s = 0,75$.

Figura 48 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,86$ em regime de ebulição nucleada plenamente desenvolvida

Fonte: Próprio autor

A obtenção dos ângulos de contato foi também realizada para as diferentes condições de molhabilidade. A mesma metodologia utilizada para os dados de [Li, Zhou e Yan \(2017\)](#), apresentada anteriormente, foi utilizada para os dados de [Gong e Cheng \(2017\)](#), excetuando-se pela malha computacional: 500x200. A justificativa para o maior número de pontos na direção X deve-se à menor tensão superficial para $T_r = 0,90$ em comparação para $T_r = 0,86$. Os resultados dos campos de densidade para os distintos ângulos de contato são apresentados na Figura 53.

Para as simulações da curva de ebulição considerando diferentes condições de molhabilidade, a mesma metodologia anterior foi considerada. A molhabilidade possui um papel importante na transferência de calor por ebulição. Superfícies hidrofóbicas são aquelas em que, devido à interação com o fluido, resultam em ângulos de contato maiores. Por outro lado, superfícies hidrofílicas são aquelas em que o ângulo de contato, resultado da interação do sólido com o fluido, são menores. Superfícies hidrofóbicas favorecem a formação de núcleos de vapor devido à redução da barreira energética para mudança de fase líquido-vapor ([KIM et al., 2017](#)). Desta forma, para uma superfície hidrofóbica, a ebulição

Figura 49 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,90$ em fluxo crítico

Fonte: Próprio autor

iniciará para um superaquecimento da superfície inferior em comparação com a superfície hidrofílicas (BOURDON *et al.*, 2015). Por outro lado, o fluxo crítico é significativamente inferior para uma superfície hidrofóbica. Estes efeitos podem ser observados na Figura 54, para a condição $G_s = 0,75$ ($\theta_c = 63^\circ$), em que a ebulição inicia-se com um superaquecimento inferior em relação a $G_s = 0$ ($\theta_c = 45^\circ$) e $G_s = -0,75$ ($\theta_c = 36^\circ$). Adicionalmente, nota-se o aumento do fluxo crítico de calor com a redução do ângulo de contato.

Os resultados apresentados na Figura 54 podem ser confirmados, qualitativamente, com resultados numéricos da literatura. Por exemplo, o trabalho publicado por Hsu *et al.* (2017), apresentou resultados numéricos semelhantes aos apresentados na Figura 54.

4.2.2 Influência da tensão superficial

A influência da tensão superficial sobre os resultados da curva de ebulição à $T_r = 0,90$ foi realizada considerando $\kappa = 0,75$ e $\kappa = -0,75$. Desta forma, condições de menor tensão superficial ($\gamma_{MLB} = 0,0133$) e maior tensão superficial ($\gamma_{MLB} = 0,0943$), respectivamente, foram analisadas.

Figura 50 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em piscina para $T_r = 0,86$ em fluxo crítico

Fonte: Próprio autor

Considerando o mesmo procedimento realizado anteriormente, por meio de simulações da gota estática variando-se o parâmetro κ . A tensão superficial em função de κ é apresentada na Figura 55.

O resultado das curvas de ebulição para diferentes valores da tensão superficial são apresentados na Figura 56. Nota-se que o efeito da redução da tensão superficial é de aumentar o fluxo de calor, para o mesmo superaquecimento. Este efeito pode ser explicado pela ativação de um maior número de sítios de nucleação, similar ao efeito causado pela adição de surfactantes (ELGHANAM et al., 2011). Nota-se também que o fluxo crítico ocorre para um maior valor do superaquecimento da superfície. Em termos da curva de ebulição, nota-se que a simulação para maior tensão superficial ($\kappa = -0.75$) apresentou comportamento muito similar para os resultados de $\kappa = 0$ quando $\Delta T^{adim} < 0.16$. Nota-se que o fluxo crítico de calor ocorre para um menor valor do superaquecimento. O mesmo é observado para o regime de ebulição em filme para $\kappa = 0$ e $\kappa = -0.75$.

Figura 51 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em filme para $T_r = 0,90$

Fonte: Próprio autor

4.2.3 Influência da aceleração gravitacional

Por fim, a influência da aceleração da gravidade sobre a curva de ebulição foi realizada. Além dos resultados obtidos para $g_{MLB} = 3 \times 10^{-5}$, outros distintos valores foram considerados: $g_{MLB} = 1,5 \times 10^{-5}$ e $g_{MLB} = 6 \times 10^{-5}$.

A Figura 57 apresenta os resultados da curva de ebulição para os valores de aceleração gravitacional mencionados anteriormente. Nota-se que o início da ebulição (*onset of nucleate boiling*) ocorre para um menor valor do superaquecimento da superfície para $g_{MLB} = 1,5 \times 10^{-5}$, em comparação com os resultados obtidos para os outros valores de aceleração gravitacional.

Os resultados da Figura 57 demonstram que a influência da aceleração gravitacional é mais evidente a partir de $\Delta T^{adim} > 0,1$. A partir deste valor, o efeito do desprendimento

Figura 52 – Campos de (a) densidade e (b) temperatura para ebulição em filme para $T_r = 0,86$

Fonte: Próprio autor

Figura 53 – Resultados dos campos de densidade obtidos para $T_r = 0,90$ e para diferentes valores do parâmetro G_s : (a) $G_s = -0,75$; (b) $G_s = 0$; (c) $G_s = 0,75$

Fonte: Próprio autor

Figura 54 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ para distintos valores de G_s : -0,75; 0 e 0,75

Fonte: Próprio autor

das bolhas é mais intenso, aumentando o fluxo de calor. O fluxo crítico é também influenciado pela aceleração gravitacional. Como mostrado na figura, o fluxo crítico é maior para $g_{MLB} = 6 \times 10^{-5}$ e ocorre para um maior valor do superaquecimento. Do ponto de vista qualitativo, os resultados numéricos apresentados na Figura 57 estão em acórdância com resultados experimentais da literatura (RAJ; KIM; MCQUILLEN, 2010; COLIN et al., 2017).

4.3 Aplicação do modelo proposto de obtenção de unidades para simulação do ciclo de uma bolha do fluido HFE-7100

O fluido de trabalho HFE-7100 é um líquido dielétrico que tem atraído grande atenção da comunidade científica para aplicações de resfriamento de circuitos eletrônicos por possuir várias vantagens: baixa temperatura de saturação, potencial de destruição da camada de ozônio nulo, baixo potencial de aquecimento global e baixo ângulo de contato (EL-GENK; BOSTANCI, 2003).

Figura 55 – Resultados de tensão superficial versus parâmetro κ utilizando os dados de Gong e Cheng (2017)

Fonte: Próprio autor

As simulações foram realizadas para duas pressões de saturação: 2 bar e 1 bar. Nestas pressões, as temperaturas reduzidas são $T_r = 0,7604$ e $T_r = 0,7126$. Pressões de saturação inferiores a 1 bar foram também testadas no modelo numérico mas as simulações tornaram-se instáveis para $T_r < 0,7$. Isso pode ser explicado provavelmente devido à maior intensidade das correntes espúrias na interface.

A Tabela 3 apresenta as propriedades termofísicas do fluido HFE-7100, obtidas por meio do *software* EES®, a serem utilizadas para as referidas pressões. O parâmetro a da equação de estado de Peng-Robinson é escolhido como $a = \frac{1}{49}$, de modo a aumentar a espessura da interface e, dessa forma, aumentar a estabilidade da simulação (LI; LUO; LI, 2013). Os parâmetros b e R são os mesmos da seção anterior. O fator acêntrico do fluido é $\omega_{EE} = 0,4358$. O ajuste da consistência termodinâmica é realizado considerando-se $\sigma_{MRT} = 0,119$. As mesmas condições de contorno da primeira seção (simulações do ciclo de uma bolha) são consideradas nas simulações desta seção.

Considerando os dados anteriores, a temperatura crítica em unidades de *lattice* é igual a $T_c = 0,0365$. Pela regra de construção de Maxwell, as densidades das fases são

Figura 56 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ para distintos valores do parâmetro κ : -0,75; 0; 0,75

Fonte: Próprio autor

Tabela 3 – Propriedades termofísicas do fluido HFE-7100 no sistema internacional para as distintas pressões de saturação de 2 bar e 1 bar

Propriedade termofísica	P = 2 bar	P = 1 bar
$\rho_{l,SI} \text{ (kg/m}^3\text{)}$	1353	1420
$\rho_{v,SI} \text{ (kg/m}^3\text{)}$	18,53	9,521
$\nu_{l,SI} \text{ (m}^2\text{/s)}$	$2,31 \times 10^{-7}$	$2,77 \times 10^{-7}$
$\nu_{v,SI} \text{ (m}^2\text{/s)}$	$1,15 \times 10^{-7}$	$2,08 \times 10^{-7}$
$\alpha_{l,SI} \text{ (m}^2\text{/s)}$	$3,45 \times 10^{-8}$	$3,67 \times 10^{-8}$
$\alpha_{v,SI} \text{ (m}^2\text{/s)}$	$5,44 \times 10^{-7}$	$9,75 \times 10^{-7}$
$c_{p,l,SI} \text{ (J/kg} \cdot \text{K)}$	1231	1188
$c_{p,v,SI} \text{ (J/kg} \cdot \text{K)}$	976,1	925,2
$c_{v,l,SI} \text{ (J/kg} \cdot \text{K)}$	1227	1186
$c_{v,v,SI} \text{ (J/kg} \cdot \text{K)}$	925,5	882,2
$\gamma_{SI} \text{ (N/m)}$	$7,67 \times 10^{-3}$	$9,6 \times 10^{-3}$

Fonte: EES® (*Engineering Equation Solver*)

Figura 57 – Resultados do fluxo de calor adimensional versus superaquecimento da superfície adimensional para $T_r = 0,90$ para distintos valores da aceleração gravitacional: $g_{MLB} = 1,5 \times 10^{-5}$; $g_{MLB} = 3,0 \times 10^{-5}$; $g_{MLB} = 6,0 \times 10^{-5}$

Fonte: Próprio autor

$\rho_{l,MLB} = 7,697$ e $\rho_{v,MLB} = 0,106$ (para $T_r = 0,7604$) e $\rho_{l,MLB} = 8,093$ e $\rho_{v,MLB} = 0,054$ (para $T_r = 0,7126$). Para $T_r = 0,7604$, a razão de densidades, em unidades de *lattice*, é $\frac{\rho_{l,MLB}}{\rho_{v,MLB}} \approx 73$ ao passo que a razão de densidades, em unidades do sistema internacional, é 73. Para $T_r = 0,7126$, a razão de densidades, em unidades de *lattice*, é $\frac{\rho_{l,MLB}}{\rho_{v,MLB}} \approx 150$ ao passo que a razão de densidades, em unidades do sistema internacional, é 149. A comparação dos resultados de razão de densidades comprova que a equação de Peng-Robinson descreve corretamente o fluido HFE-7100. A tensão superficial em unidades de *lattice* é determinada por meio de simulações da gota estática imersa no vapor e pela aplicação da Equação de Young-Laplace. A Figura 58 apresenta os resultados da tensão superficial para distintos valores do parâmetro κ , considerando as pressões de saturação mencionadas anteriormente.

Em relação à definição dos calores específicos, uma vez conhecido o número de Jakob calculado no sistema internacional (obtido por ensaio experimental apropriado), $Ja_{l,SI} = \frac{c_{p,l,SI}\Delta T}{h_{lv,SI}}$, pode-se obter uma relação entre o calor específico e o superaquecimento em unidades de *lattice* dada por $c_{p,l,MLB}\Delta T_{MLB} = Ja_{l,SI}h_{lv,MLB}$. Desta forma, define-se um dos parâmetros e o outro pode ser calculado a partir da relação apresentada.

Figura 58 – Resultados da tensão superficial versus parâmetro κ para as propriedades do fluido HFE-7100 para distintas pressões de saturação: (a) $P = 2$ bar; (b) $P = 1$ bar

Fonte: Próprio autor

Tabela 4 – Parâmetros de simulação em unidades de *lattice* do fluido HFE-7100 para $P = 2$ bar

Parâmetro	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-4s}$	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-5}$	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-6}$	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-7}$
$L_{0,MLB}$	7,654	76,54	765,4	7654
g_{MLB}	$2,271 \times 10^{-4}$	$2,271 \times 10^{-6}$	$2,271 \times 10^{-8}$	$2,271 \times 10^{-10}$
$\nu_{l,MLB}$	$1,111 \times 10^{-3}$	$3,515 \times 10^{-3}$	$1,111 \times 10^{-2}$	$3,51 \times 10^{-2}$
τ_l	0,5033	0,5105	0,5333	0,6054
$\nu_{v,MLB}$	$5,533 \times 10^{-3}$	$1,75 \times 10^{-2}$	$5,53 \times 10^{-2}$	$1,75 \times 10^{-1}$
$\alpha_{l,MLB}$	$1,66 \times 10^{-4}$	$5,25 \times 10^{-4}$	$1,66 \times 10^{-3}$	$5,249 \times 10^{-3}$
$\alpha_{v,MLB}$	$2,618 \times 10^{-3}$	$8,277 \times 10^{-3}$	$2,618 \times 10^{-2}$	$8,28 \times 10^{-2}$
Δt_{SI}	$4,81 \times 10^{-5}$	$1,522 \times 10^{-6}$	$4,8 \times 10^{-8}$	$1,522 \times 10^{-9}$
$N_{it,MLB}$	20783	657209	$2,078 \times 10^7$	$6,572 \times 10^8$

Fonte: Próprio autor

As Tabelas 4 e 5 apresenta os principais parâmetros de simulação obtidos para distintos valores da discretização espacial, Δx_{SI} , para as pressões de saturação consideradas, obtidas a partir do modelo apresentado no capítulo anterior. Com base nos resultados apresentados, nota-se claramente que a discretização espacial mínima, para garantir a estabilidade do método resulta em uma malha computacional proibitiva, com base nas escalas de comprimento obtidas: $L_{0,MLB} = 7654$ e $L_{0,MLB} = 8328$, respectivamente. Dessa forma, a proposta de modelo de obtenção dos parâmetros de simulação em unidades de *lattice* exigirá um elevado custo computacional, considerando o *software* utilizado. Resultados numéricos podem ser obtidos por meio da utilização de uma linguagem de programação compilada combinada com simulações em paralelo.

Tabela 5 – Parâmetros de simulação em unidades de *lattice* do fluido HFE-7100 para $P = 1$ bar

Parâmetro	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-4}$	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-5}$	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-6}$	$\Delta x_{SI} = 1 \times 10^{-7}$
$L_{0,MLB}$	8,328	83,28	832,8	8328
g_{MLB}	$2,317 \times 10^{-4}$	$2,317 \times 10^{-6}$	$2,317 \times 10^{-8}$	$2,317 \times 10^{-10}$
$\nu_{l,MLB}$	$1,346 \times 10^{-3}$	$4,257 \times 10^{-3}$	$1,346 \times 10^{-2}$	$4,26 \times 10^{-2}$
τ_l	0,504	0,5128	0,5404	0,6277
$\nu_{v,MLB}$	$1,011 \times 10^{-2}$	$3,2 \times 10^{-2}$	$1,011 \times 10^{-1}$	$3,2 \times 10^{-1}$
$\alpha_{l,MLB}$	$1,784 \times 10^{-4}$	$5,641 \times 10^{-4}$	$1,784 \times 10^{-3}$	$5,641 \times 10^{-3}$
$\alpha_{v,MLB}$	$4,739 \times 10^{-3}$	$1,499 \times 10^{-2}$	$4,739 \times 10^{-2}$	$1,499 \times 10^{-1}$
Δt_{SI}	$4,86 \times 10^{-5}$	$1,537 \times 10^{-6}$	$4,86 \times 10^{-8}$	$1,537 \times 10^{-9}$
$N_{it,MLB}$	20575	650626	$2,057 \times 10^7$	$6,506 \times 10^8$

Fonte: Próprio autor

4.3.1 Simulação do ciclo de uma bolha utilizando as propriedades do fluido HFE-7100 por uma metodologia simplificada

Os parâmetros obtidos na seção anterior, para a simulação do ciclo de uma bolha para o fluido HFE-7100, resultaram em uma malha com custo computacional proibitivo. Assim, propõe-se a definição dos parâmetros em unidades de *lattice* por uma metodologia simplificada, que considera alguma flexibilidade na definição da aceleração da gravidade em unidades de *lattice* e da malha computacional. Neste caso, ao contrário do que foi feito na seção anterior, a aceleração de gravidade é imposta, e não calculada. Similarmente, a viscosidade cinemática do líquido é imposta e a viscosidade da fase vapor é calculada com base na razão de viscosidades.

Para ambas temperaturas reduzidas, a aceleração gravitacional é escolhida como $g_{MLB} = 1 \times 10^{-6}$. A partir da definição das propriedades termofísicas em unidades do sistema internacional e da aceleração da gravidade, os demais parâmetros são calculados. A obtenção da discretização espacial, Δx_{SI} , o avanço temporal, Δt_{SI} e a correspondente aceleração gravitacional em unidades de *lattice* é realizada por meio da Equação 3.46. O valor obtido é comparado com o resultado imposto. A referida flexibilidade na definição da aceleração da gravidade diz respeito ao fato do valor imposto e calculado não serem iguais, como apresentado na seção anterior.

Para $T_r = 0,7604$, a razão das viscosidades cinemáticas das fases no sistema internacional é $\frac{\nu_{l,SI}}{\nu_{v,SI}} = 0,2015$. Em unidades de *lattice*, de modo a garantir a mesma razão de viscosidades, a viscosidade cinemática do líquido foi escolhida igual a $\nu_{l,MLB} = 0,05$ e a viscosidade cinemática do vapor foi então calculada: $\nu_{v,MLB} = 0,2482$. As difusividades térmicas das fases foram calculadas por meio dos respectivos números de Prandtl das fases, sendo que esses foram obtidos considerando os parâmetros conhecidos no sistema internacional de unidades: $\alpha_{l,MLB} = \frac{\nu_{l,MLB}}{Pr_l} = 0,0075$ e $\alpha_{v,MLB} = \frac{\nu_{v,MLB}}{Pr_v} = 0,1178$. A tensão

Tabela 6 – Parâmetros de simulação em unidades de *lattice* do fluido HFE-7100 para $P = 2$ bar

Parâmetro	$P = 2bar$	$P = 1bar$
$L_{0,MLB}$	115,3	126,8
τ_l	0,65	0,62
Δt_{SI}	$9,53 \times 10^{-6}$	$6,231 \times 10^{-6}$
$N_{it,MLB}$	104931	160482
$g_{calc,MLB}$	$1,34 \times 10^{-4}$	$5,8 \times 10^{-5}$

Fonte: Próprio autor

superficial, obtida pela simulação da gota estática, é $\gamma_{MLB} = 0,101$. Para $T_r = 0,7126$, a razão das viscosidades cinemáticas das fases é $\frac{\nu_{l,SI}}{\nu_{v,SI}} = 0,133$. A viscosidade cinemática do líquido foi atribuída como $\nu_{l,MLB} = 0,04$ e a viscosidade cinemática do vapor foi calculada igual $\nu_{v,MLB} = 0,3007$. As difusividades térmicas das fases são $\alpha_{l,MLB} = 0,0053$ e $\alpha_{v,MLB} = 0,1406$. A tensão superficial, obtida pela simulação da gota estática, é $\gamma_{MLB} = 0,1292$. Para os parâmetros apresentados, calcula-se a aceleração gravitacional correspondente. Estes resultados são apresentados na Tabela 6.

Dos resultados apresentados na Tabela 6, nota-se que a aceleração gravitacional calculada é distinta da estimada. Apesar disso, as simulações são realizadas considerando a aceleração gravitacional imposta ($g_{MLB} = 1 \times 10^{-6}$), de modo a obter resultados preliminares para as simulações com as propriedades termofísicas do fluido HFE-7100. Considerando os resultados para $L_{0,MLB}$, uma malha computacional mais fina foi definida ambas temperaturas reduzidas: 600x600.

Em relação aos demais parâmetros, o calor específico à volume constante e à pressão constante do líquido foi escolhido igual a 7 para ambas temperaturas reduzidas. Este valor foi obtido por experimentação numérica. O calor específico à volume constante do vapor foi então calculado considerando a mesma razão em unidades do sistema internacional, ou seja, $\frac{c_{v,l,SI}}{c_{v,v,SI}}$. Desta forma, tem-se $c_{v,v,MLB} = 5,28$ para $T_r = 0,7604$ e $c_{v,v,MLB} = 5,2069$ para $T_r = 0,7126$.

Por fim, o superaquecimento da superfície é obtido pela definição do número de Jakob: $Ja = \frac{c_{p,l}\Delta T}{h_{lv}}$, assumindo a aproximação $c_{p,MLB} \approx c_{v,MLB}$. Considerando $Ja_{SI} = 1$, tem-se que o superaquecimento da superfície é $\Delta T_{MLB} = 0,0329$ para $T_r = 0,7604$ e $\Delta T_{MLB} = 0,0355$ para $T_r = 0,7126$.

Os resultados dos campos de densidade para ambas temperaturas são apresentados na Figura 59. Nota-se que, do ponto de vista qualitativo, os resultados são coerentes: o diâmetro e o período de desprendimento são menores para $T_r = 0,7126$ em comparação com $T_r = 0,7604$. Apesar dos resultados coerentes do ponto de vista teórico, reforça-se aqui que os resultados apresentados não correspondem exatamente aos que deveriam ser

Figura 59 – campos de densidade obtido para a simulação com as propriedades termofísicas do fluido HFE-7100 para as temperaturas reduzidas (a) $T_r = 0,7604$; (b) $T_r = 0,7126$

Fonte: Próprio autor

utilizados, devido ao elevado custo computacional requerido para simulação utilizando os parâmetros calculados por meio do modelo proposto neste trabalho (apresentado na seção anterior).

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho foram realizadas simulações da formação de bolhas em superfícies aquecidas com o Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais. O modelo utilizado foi obtido pela combinação dos modelos de Li, Luo e Li (2013) e Li e Luo (2013), de modo a garantir a consistência termodinâmica e o ajuste da tensão superficial de forma independente da razão de densidades. A Equação da energia foi resolvida pelo Método de Runge-Kutta de 4ª ordem, associada à discretização espacial em diferenças finitas.

Inicialmente foram realizadas simulações do ciclo de uma bolha para $T_r = 0,86$ considerando dados da literatura. O modelo foi utilizado para análises paramétricas. Em relação às simulações realizadas para o ciclo de uma bolha:

- Os resultados numéricos de diâmetro e período de desprendimento foram comparados com resultados de correlações empíricas, mostrando resultados satisfatórios.
- Uma comparação de modelos que empregam os operadores BGK e MRT revelaram que o esquema utilizado para o operador BGK influencia os resultados numéricos para $T_r = 0,76$. Conclui-se então que o modelo com o operador MRT deve ser utilizado para temperaturas reduzidas menores que $T_r = 0,86$.
- As análises paramétricas realizadas também demonstraram resultados qualitativamente corretos.

Posteriormente foram realizadas simulações da curva de ebulição para $T_r = 0,90$ e $T_r = 0,86$. Uma análise qualitativa dos resultados foi realizada e uma boa acordância foi observada. Uma análise de distintos parâmetros foi realizada de modo a avaliar a capacidade do modelo em reproduzir fenômenos físicos de forma adequada qualitativamente. Em relação à simulação das curvas de ebulição, as seguintes conclusões qualitativas podem ser realizadas:

- Variando-se o ângulo de contato, nota-se que para o mesmo superaquecimento da superfície, em comparação com a superfície hidrofóbica ($G_s = 0,75$), a superfície hidrofílica ($G_s = -0,75$) resulta um menor coeficiente de transferência de calor durante a ebulição nucleada. Por outro lado, o fluxo crítico é maior para superfície hidrofílica.
- O efeito da redução da tensão superficial é aumentar o fluxo de calor (para um mesmo superaquecimento), similar ao efeito da adição de agentes surfactantes. Nota-se também que o fluxo crítico ocorre para um maior superaquecimento.

- O efeito do aumento da aceleração gravitacional é de aumentar o fluxo de calor crítico.

Em relação ao modelo proposto para a obtenção dos parâmetros de simulação em unidades de *lattice*, pode-se concluir:

- A aplicação do modelo de obtenção dos parâmetro em unidades de *lattice* para o fluido HFE 7100 mostrou-se computacionalmente custoso para a ferramenta computacional utilizada.
- Foi possível, de forma simplificada, resultados numéricos do diâmetro e período de desprendimento para o fluido HFE 7100, cujos resultados mostraram-se qualitativamente coerentes.

5.1 Sugestões para trabalhos futuros

Como autocrítica ao presente trabalho ressalta-se a dificuldade da aplicação do Método de *Lattice* Boltzmann dos pseudopotenciais para simulações da formação de bolhas em superfícies aquecidas para reprodução de condições experimentais do fluido HFE 7100. A aplicação do modelo de definição de parâmetros em unidades de *lattice* com base em parâmetros do sistema internacional mostrou-se proibitiva do ponto de vista computacional com o *software* MATLAB®. Evidentemente, o modelo pode ser testado para outros fluidos.

Pode-se indicar, como uma direção para trabalhos futuros, a extensão do modelo bidimensional para um modelo tridimensional em uma linguagem de programação compilada, que possibilite a simulação com os parâmetros em unidades de *lattice* e a posterior comparação com dados experimentais do fluido HFE 7100. Neste contexto pode-se considerar o trabalho recente de [Fei et al. \(2019\)](#), que propôs modelos para os esquemas *D3Q19* e *D3Q27*.

Outra sugestão para trabalhos futuros é a utilização do Método de *Lattice* Boltzmann da Energia Livre (*Free energy*) para o estudo da simulação da formação de bolhas em superfícies aquecidas com validação experimental. Considerando a literatura aberta, um ponto de partida pode ser o modelo bidimensional desenvolvido por [Sun, Li e Yang \(2013\)](#) ou o modelo tridimensional de [Sun \(2019\)](#).

REFERÊNCIAS

- ALVARIÑO, P. F. et al. Experimental investigation of the chf of hfe-7100 under pool boiling conditions on differently roughened surfaces. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 139, p. 269–279, 2019.
- ANDERSON, D. M.; MCFADDEN, G. B.; WHEELER, A. A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. **Annual Reviews in Fluid Mechanics**, v. 30, p. 139–65, 1998.
- BATCHELOR, G. K. **An Introduction to Fluid Dynamics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. 615 p.
- BERENSON, P. J. Film boiling heat transfer from a horizontal surface. **Journal of Heat Transfer**, v. 83, p. 351–358, 1961.
- BHATNAGAR, P.; GROSS, E.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. **Physical Review**, v. 94, n. 3, p. 511–525, 1954.
- BLUNDELL, S. J.; BLUNDELL, K. M. **Concepts in Thermal Physics**. [S.l.]: Oxford University Press, 2006. 464 p.
- BOURDON, B. et al. Wettability influence on the onset temperature of pool boiling: Experimental evidence onto ultra-smooth surfaces. **Advances in Colloid and Interface Science**, Elsevier, v. 221, p. 34–40, 2015.
- BRENNEN, C. E. **Cavitation and bubble dynamics**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1993. 294 p.
- CAIAZZO, A. Analysis of lattice boltzmann initialization routines. **Journal of Statistical Physics**, v. 121, p. 37–48, 2005.
- CARNAHAN, N. F.; STARLING, K. E. Equation of state for nonattracting rigid spheres. **The Journal of Chemical Physics**, v. 51, n. 2, p. 635–636, 1969.
- CERCIGNANI, C. **The Boltzmann equation and its applications**. [S.l.]: Springer, 1988. 466 p.
- CHANG, X.; HUANG, H.; LU, X. Thermal lattice boltzmann study of three-dimensional bubble growth in quiescent liquid. **Computers and Fluids**, v. 159, p. 232–242, 2017.
- CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. **The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1970. 448 p.
- CHEN, L. et al. A critical review of the pseudopotential multiphase lattice boltzmann model: Methods and applications. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 76, p. 210–236, 2014.
- CHOPARD, B.; FALCONE, J. L.; LATT, J. The lattice boltzmann advection-diffusion model revisited. **The European Physical Journal Special Topics**, v. 171, p. 245–249, 2009.

- COLIN, C. et al. Nucleate pool boiling in microgravity: Recent progress and future prospects. **Comptes Rendus Mecanique**, IOP Publishing, v. 345, p. 21–34, 2017.
- CZELUSNIAK, L. E. et al. Force approach for the pseudopotential lattice boltzmann method. **Physical Review E**, v. 102, p. 033307, 2020.
- EL-GENK, M. S.; BOSTANCI, H. Saturation boiling of hfe-7100 from a copper surface, simulating a microelectronic chip. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 46, p. 1841–1854, 2003.
- ELGHANAM, R. I. et al. Experimental study of nucleate boiling heat transfer enhancement by using surfactant. **Ain Shams Engineering Journal**, IOP Publishing, v. 2, p. 195–209, 2011.
- FANG, W. et al. Lattice boltzmann modeling of pool boiling with large liquid-gas density ratio. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 114, p. 172–183, 2017.
- FEI, L. et al. Modeling realistic multiphase flows using a non-orthogonal multiple-relaxation-time lattice boltzmann method. **Physics of Fluids**, Elsevier, v. 31, p. 042105, 2019.
- FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the navier-stokes equation. **Physical Review Letters**, v. 56, n. 14, p. 1505–1508, 1986.
- FRITZ, W. Maximum volume of vapour bubbles. **Physik Zeitschr**, v. 36, p. 379–384, 1935.
- GELLER, S. et al. Benchmark computations based on lattice-boltzmann, finite element and finite volume methods for laminar flows. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 888–897, 2006.
- GINZBOURG, I.; ADLER, P. Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice boltzmann model. **Journal de Physique II**, v. 4, n. 2, p. 191–214, 1994.
- GOMBOSI, T. I. **Gaskinetic theory**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1994. 311 p.
- GONG, S.; CHENG, P. A lattice boltzmann method for simulation of liquid-vapor phase-change heat transfer. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 55, p. 4923–4927, 2012.
- _____. Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice boltzmann model for phase transitions and multiphase flows. **Computers & Fluids**, v. 53, p. 93–104, 2012.
- _____. Lattice boltzmann simulation of periodic bubble nucleation, growth and departure from a heated surface in pool boiling. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 64, p. 122–132, 2013.
- _____. Numerical investigation of saturated flow boiling in microchannels by the lattice boltzmann method. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications: An International Journal of Computation and Methodology**, v. 65, p. 644–661, 2014.
- _____. Lattice boltzmann simulations for surface wettability effects in saturated pool boiling heat transfer. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 85, p. 635–646, 2015.

_____. Numerical simulation of pool boiling heat transfer on smooth surfaces with mixed wettability by lattice boltzmann method. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 80, p. 206–216, 2015.

_____. Two-dimensional mesoscale simulations of saturated pool boiling from rough surfaces. part ii: Bubble interactions above multi-cavities. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 100, p. 938–948, 2016.

_____. Direct numerical simulations of pool boiling curves including heater's thermal responses and the effect of vapor phase's thermal conductivity. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 87, p. 61–71, 2017.

GONG, S.; CHENG, P.; QUAN, X. Two-dimensional mesoscale simulations of saturated pool boiling from rough surfaces. part i: Bubble nucleation in a single cavity at low superheats. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 100, p. 927–937, 2016.

GONG, W. et al. A modified phase change pseudopotential lattice boltzmann model. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 125, p. 323–329, 2018.

GUNSTENSEN, A. K. et al. Lattice boltzmann model of immiscible fluids. **Physical Review A**, v. 43, n. 8, p. 4320–4327, 1991.

GUO, Z.; SHU, C. **Lattice Boltzmann Method and its Applications in Engineering**. [S.l.]: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2013. 419 p.

GUO, Z. L.; ZHENG, C. G.; SHI, B. C. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice boltzmann method. **Physical Review E**, v. 65, n. 4, p. 1–6, 2002.

GUZELLA, M. S. et al. Simulation of boiling heat transfer at different reduced temperatures with an improved pseudopotential lattice boltzmann method. **Symmetry**, v. 12(8), p. 1–24, 2020.

HAZI, G.; MARKUS, A. On the bubble departure diameter and release frequency based on numerical simulation results. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 52, p. 1472–1480, 2009.

HE, X.; DOOLEN, G. D. Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice boltzmann models for multiphase flows. **Journal of Statistical Physics**, v. 107, p. 309–328, 2002.

HE, X.; SHAN, X.; DOOLEN, G. D. Discrete boltzmann equation model for nonideal gases. **Physical Review E**, v. 57, n. 1, p. 56–57, 1998.

HE, X. Y.; CHEN, S. Y.; ZHANG, R. Y. A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh-taylor instability. **Journal of Computational Physics**, v. 152, n. 2, p. 642–663, 1999.

HSU, H. et al. A numerical investigation of the effect of surface wettability on the boiling curve. **PLoS ONE**, v. 12(1), p. 0187175, 2017.

HUANG, H. B.; KRAFCZYK, M.; LU, X. Forcing term in single-phase and shan-chen-type multiphase lattice boltzmann models. **Physical Review E**, v. 84, n. 4, p. 1–15, 2011.

KANDLIKAR, S. G. A theoretical model to predict pool boiling chf incorporating effects of contact angle and orientation. **Journal of Heat Transfer**, v. 123, n. 6, p. 1071–1079, 2001.

KIM, S. H. et al. The role of surface energy in heterogeneous bubble growth on ideal surface. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 108, p. 1901–1909, 2017.

KIRBY, B. J. **Micro- and nanoscale fluid mechanics: transport in microfluidic devices**. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.

KRÜGER, T. et al. **The Lattice Boltzmann Method - Principles and Practice**. [S.l.]: Springer, 2017. 694 p.

KUO, K. K. **Principles of Combustion**. [S.l.]: John Wiley and Sons Ins, 1986. 760 p.

KUPERSHTOKH, A. L.; MEDVEDEV, D.; KARPOV, D. On equations of state in a lattice boltzmann method. **Computers and Mathematics with Applications**, v. 58, p. 965–974, 2009.

LADD, A. J. C.; VERBERG, R. Lattice-boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. **Journal of Statistical Physics**, v. 104, n. 516, p. 1191–1251, 2001.

LEE, T.; LIN, C. A stable discretization of the lattice boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. **Journal of Computational Physics**, v. 1, p. 16–47, 2005.

LI, Q. et al. Lattice boltzmann modeling of boiling heat transfer: The boiling curve and the effects of wettability. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 85, p. 787–796, 2015.

LI, Q.; LUO, K. H. Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice boltzmann modeling of multiphase flows. **Physical Review E**, v. 88, p. 053307, 2013.

LI, Q. et al. Lattice boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. **Progress in Energy and Combustion Science**, Elsevier, v. 52, p. 62–105, 2016.

LI, Q.; LUO, K. H.; LI, X. J. Forcing scheme in pseudopotential lattice boltzmann model for multiphase flows. **Physical Review E**, v. 86, p. 016709, 2012.

_____. Lattice boltzmann modeling of multiphase flows at large density ration with an improved pseudopotential model. **Physical Review E**, v. 87, p. 053301, 2013.

LI, Q.; ZHOU, P.; YAN, H. J. Improved thermal lattice boltzmann model for simulation of liquid-vapor phase change. **Physical Review E**, APS, v. 96, n. 6, p. 063303, 2017.

LI, W. X. et al. Enhancement of nucleate boiling by combining the effects of surface structure and mixed wettability: A lattice boltzmann study. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, v. 180, p. 115849, 2020.

LUO, L. Unified theory of lattice boltzmann models for nonideal gases. **Physical Review Letters**, v. 81, n. 8, p. 1618–1621, 1998.

MEI, R. et al. Consistent initial conditions for lattice boltzmann simulations. **Computers & Fluids**, v. 35, p. 855–862, 2006.

MOHAMAD, A. A. **Lattice Boltzmann Method - Fundamentals and Engineering Applications with Computer Codes**. [S.l.]: Springer, 2011. 195 p.

NUKIYAMA, S. Maximum and minimum values of heat q transmitted from metal to boiling water under atmospheric pressure. **Journal of the Society of Mechanical Engineering of Japan**, v. 37, n. 53-54, p. 367–374, 1934.

PATTISON, M. J. et al. Progress in lattice boltzmann methods for magnetohydrodynamic flows relevant to fusion applications. **Fusion Engineering and Design**, v. 83, p. 557–572, 2008.

POLYANIN, A. D. **Handbook of Linear Partial Differential Equations for engineers and scientists**. [S.l.]: Chapman & Hall/CRC, 2002. 785 p.

QIAN, Y. H.; D'HUMIERES, D.; LALLEMAN, P. Lattice bgk models for navier-stokes equation. **Europhysics Letters**, v. 17, n. 6, p. 479–484, 1992.

QIAN, Y. H.; ORSZAG, S. A. Lattice bgk models for the navier-stokes equation: Nonlinear deviation in compressible regimes. **Europhysics Letters**, v. 21, n. 3, p. 255–259, 1993.

RAJ, R.; KIM, J.; MCQUILLEN, J. Gravity scaling parameter for pool boiling heat transfer. **Jornal of Heat Transfer**, IOP Publishing, v. 132, n. 9, p. 091502, 2010.

RAPAPORT, D. C. **The Art of Molecular Dynamics Simulation**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2004. 548 p.

RIBATSKI, G. **Análise teórica e experimental da ebulição nucleada de refrigerantes halogenados**. 2002. Tese de doutorado — Escola de Engenharia de São Carlos (Universidade de São Paulo), 2002.

ROHSENOW, W. M. A method of correlating heat transfer data for surface boiling liquids. **Transactions of ASME**, v. 74, p. 969–976, 1952.

RUTHERFORD, A. **Vectors, Tensors, and the Basic Equations of Fluid Mechanics**. [S.l.]: Dover Publications, 1962. 286 p.

SHAN, X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice boltzmann models. **Physical Review E**, v. 73, n. 4, p. 1–4, 2008.

_____. Pressure tensor calculation in a class of nonideal gas lattice boltzmann models. **Physical Review E**, v. 77, n. 6, p. 1–15, 2008.

SHAN, X.; CHEN, H. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. **Physical Review E**, v. 47, n.3, p. 1815–1820, 1993.

_____. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice boltzmann equation. **Physical Review E**, v. 49, n.4, p. 2941–2948, 1994.

SKRIPOV, V. P. **Metastable liquids**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1974. 272 p.

SON, G.; DHIR, V. K. Dynamics and heat transfer associated with a single bubble during nucleate boiling on a horizontal surface. **Jornal of Heat Transfer**, IOP Publishing, v. 121, p. 623–631, 1999.

SUN, T. A numerical study on dynamics behaviors of multi bubbles merger during nucleate boiling by lattice boltzmann method. **International Journal of Multiphase Flow**, Elsevier, v. 118, p. 128–140, 2019.

SUN, T.; LI, W.; YANG, S. Numerical simulation of bubble growth and departure during flow boiling period by lattice boltzmann method. **International Journal of Heat and Fluid Flow**, Elsevier, v. 44, p. 120–129, 2013.

SWIFT, M. R.; OSBORN, W. R.; YEOMANS, J. M. Lattice boltzmann simulation of nonideal fluids. **Physical Review Letters**, v. 75, n. 5, p. 830–833, 1995.

TAROKH, A.; MOHAMAD, A. A.; JIANG, L. Simulation of conjugate heat transfer using the lattice boltzmann method. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, v. 63, pt. 3, p. 159–178, 2013.

WANG, J.; WANG, M.; LI, Z. A lattice boltzmann algorithm for fluid–solid conjugate heat transfer. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 46, p. 228–234, 2007.

WOLF-GLADROW, D. A. **Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models: An Introduction**. [S.l.]: Springer Verlag, 2000. 302 p.

YU, Y. et al. Boiling heat transfer on hydrophilic-hydrophobic mixed surfaces: A 3d lattice boltzmann study. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, v. 142, p. 846–854, 2018.

YUAN, P.; SCHAEFER, L. Equations of state in a lattice boltzmann model. **Physics of Fluids**, v. 18, p. 101–112, 2006.

ZHANG, C.; CHENG, P. Mesoscale simulations of boiling curves and boiling hysteresis under constant wall temperature and constant heat flux conditions. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 110, p. 319–329, 2017.

ZHANG, R.; CHEN, H. Lattice boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows. **Physical Review E**, v. 67, p. 066711, 2003.

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

ZUBER, N. On the stability of boiling heat transfer. **Transactions of ASME**, v. 80, n. 3, p. 711–720, 1958.

ZUBER, N. **Hydrodynamics aspects of boiling heat transfer**. 1959. 196 f. Tese (Doctor of Philosophy in Engineering) — Research Laboratory, University of California, California, 1959. Disponível em: <<https://www.osti.gov/servlets/purl/4175511/>>. Acesso em: 15 nov. 2020.

_____. Nucleate boiling. the region of isolated bubbles and the similarity with natural convection. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 6, p. 53–78, 1963.