

Estudo da aplicação do método
de Boltzmann em rede do
pseudopotencial em simulações
bifásicas gás-líquido

Luiz Eduardo Czelusniak

Orientador: Prof. Dr. Luben Cabezas Gómez

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS**

Luiz Eduardo Czelusniak

**Estudo da aplicação do método de Boltzmann em rede do
pseudopotencial em simulações bifásicas gás-líquido**

São Carlos

2022

Luiz Eduardo Czelusniak

Estudo da aplicação do método de Boltzmann em rede do pseudopotencial em simulações bifásicas gás-líquido

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

Área de concentração: Térmica e Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Luben Cabezas Gómez

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

São Carlos

2022

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).

C998 e	Czelusniak, Luiz Eduardo Estudo da aplicação do método de Boltzmann em rede do pseudopotencial em simulações bifásicas gás-líquido / Luiz Eduardo Czelusniak; orientador Luben Cabezas Gómez. São Carlos, 2022. Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica e Área de Concentração em Termociências e Mecânica dos Fluidos -- Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo, 2022. 1. Método de Boltzmann em rede. 2. Método do pseudopotencial. 3. Ebulição . 4. Simulação bifásica. I. Título.
-----------	--

Eduardo Graziosi Silva - CRB - 8/8907

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **LUIZ EDUARDO CZELUSNIAK**.

Título da tese: "Estudo da aplicação do método de Boltzmann em rede do pseudopotencial em simulações bifásicas gás-líquido".

Data da defesa: 03/06/2022.

Comissão Julgadora

Resultado

Prof. Associado **Luben Cabezas Gómez**

(Orientador)

(Escola de Engenharia de São Carlos – EESC/USP)

Aprovado

Prof. Dr. **Leonardo Kleber Castelano**

(Universidade Federal de São Carlos/UFSCar)

Aprovado

Prof. Dr. **Alexys Bruno Alfonso**

(Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"/UNESP-Bauru)

Aprovado

Prof. Associado **José Antonio Rabi**

(Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos/FZEA-USP)

Aprovado

Prof. Dr. **Carsten Alexander Johannes Heinrich Wolf Wagner**

(North Dakota State University)

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 meus pais e irmãos, pelo amor e carinho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP). Este projeto de doutorado foi conduzido com o apoio financeiro da Fapesp por meio de uma bolsa de doutorado direto (processo 2018/09041-5). É importante destacar também que esta tese se insere dentro do projeto temático financiado pela FAPESP (projeto temático - processo 2016/09509-1) sobre processos de transferência de calor com mudança de fase de elevado desempenho aplicados ao aproveitamento de energia solar. Os resultados produzidos ao longo deste trabalho estão inseridos no contexto deste projeto. As opiniões, hipóteses e conclusões ou recomendações expressas neste material são de responsabilidade do autor e não necessariamente refletem a visão da FAPESP.

Aos meus pais, Luiz e Eliane, por me darem apoio e suporte nas minhas escolhas profissionais.

Aos meus colegas de laboratório. Ao Vinícius com quem tenho uma amizade de longa data. Ao Matheus pela amizade e conselhos dados ao longo deste projeto. E também ao Alfredo e Ivan, que mesmo com pouco tempo de colaboração, compartilharam valiosos conhecimentos e boa companhia.

Ao meu orientador Prof. Dr. Luben Cabezas Gómez, pela oportunidade, pela confiança e pelos ensinamentos dados ao longo de todo o trabalho. Também sou grato ao Prof. Luben Cabezas Gómez por todo o esforço em proporcionar aos seus alunos as condições adequadas para que uma pesquisa de qualidade possa ser desenvolvida.

Um agradecimento especial também ao Prof. Dr. Alexander J. Wagner da Universidade Estadual da Dakota do Norte, por ter dedicado seu tempo colaborando com o nosso trabalho e dando valiosas contribuições. Inicialmente havia a intenção de realizar um estágio de pesquisa no exterior (BEPE) com sua supervisão, porém devido à pandemia isto não foi possível. Mesmo assim, o Prof. Wagner se dispôs a manter uma parceria com o nosso grupo do Brasil através de reuniões virtuais e desta parceria saíram diversos resultados. Eu sou muito grato pela colaboração com o Prof. Wagner que agregou muito ao nosso trabalho.

Agradeço à Tássia e à sua família, pelo apoio e companhia durante esse tempo. E também a todos os meus amigos pelos bons momentos compartilhados durante a minha estadia em São Carlos. Por fim, agradeço a todos que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

RESUMO

CZELUSNIAK, L. E. **Estudo da aplicação do método de Boltzmann em rede do pseudopotencial em simulações bifásicas gás-líquido**. 2022. 202p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2022.

Neste trabalho é realizado um estudo fundamental do método de Boltzmann em rede do pseudopotencial (MBR-P) aplicado em simulações bifásicas do tipo gás-líquido com e sem mudança de fase. O intuito é promover o desenvolvimento do método e contribuir para a sua futura aplicação em simulações de fenômenos de ebulição realistas. Para a realização deste estudo, são identificados pontos-chaves relacionados ao método que necessitam de mais esclarecimentos na literatura como, por exemplo: as formas de discretização, o papel das equações de estado e os mecanismos físicos relacionados à mudança de fase. Um amplo estudo dos fundamentos do MBR-P e atuais aplicações é apresentado. A partir de uma análise teórica são discutidas estratégias de discretização do método. Duas abordagens são desenvolvidas, uma baseada na força de interação e outra no tensor de pressão. Diversos testes *benchmarks* são utilizados na validação dessas abordagens. Descobriu-se que a abordagem da força é consistente para simulações bifásicas enquanto a do tensor de pressão apresentou algumas inconsistências, ainda necessitando de novos estudos. Posteriormente, apresentou-se um estudo sobre o papel da equação de estado na acurácia e estabilidade do MBR-P. Avaliou-se o efeito do aumento da espessura da interface e também testou-se um procedimento de modificação da equação de estado, proposto recentemente na literatura. Descobriu-se que este último, apesar de aumentar a acurácia do método em alguns testes, reduz drasticamente a estabilidade do método em testes dinâmicos. Isto motivou o desenvolvimento de um procedimento próprio que foi capaz de apresentar bons resultados nos testes de consistência termodinâmica e elevada estabilidade. Por fim, estudou-se os mecanismos de mudança de fase do método. Para um sistema bifásico simples, com transferência de calor de uma superfície aquecida para o líquido, conseguiu-se prever em quais condições o sistema entra em ebulição e forma uma nova fase de vapor. Este processo está diretamente ligado à equação de estado utilizada no modelo que determina quais estados termodinâmicos são estáveis ou instáveis. Também descobriu-se que a magnitude do campo gravitacional pode afetar a temperatura de ebulição do sistema devido à alteração no campo de pressões.

Palavras-chave: Método de Boltzmann em rede. Método do pseudopotencial. Ebulição. Simulação bifásica.

ABSTRACT

CZELUSNIAK, L. E. **Study of the lattice Boltzmann method applied to gas-liquid two-phase numerical simulations.** 2022. 202p. Thesis (Doctor) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2022.

In this work a fundamental study of the pseudopotential lattice Boltzmann method (LBM-P) applied in two-phase gas-liquid simulations with and without phase change is carried out. The aim is to promote the development of the method and contribute to its future application in simulations of realistic boiling phenomena. In order to carry out this study, key points related to the method requiring further clarification in the literature are identified, such as: discretization forms, the role of state equations, and physical mechanisms related to phase change. A comprehensive study of MBR-P fundamentals and current applications is presented. Based on a theoretical analysis, discretization strategies of the method are discussed. Two approaches are developed, one based on the interaction force and the other on the pressure tensor. Several *benchmarks* tests are used to validate these approaches. It was found that the force approach is consistent for two-phase simulations while the pressure tensor approach showed some inconsistencies, still needing further studies. Subsequently, a study was presented on the role of the state equations in the accuracy and stability of the LBM-P. The effect of increasing the interface thickness was evaluated and a state equation modification procedure recently proposed in the literature was tested. It was found that the latter, drastically reduces the stability of the method in dynamic tests, despite increasing the accuracy. This motivated the development of a novel procedure able to present good results in thermodynamic consistency tests and high stability. Finally, the phase change mechanisms of the method were studied. For a simple two-phase system, with heat transfer from a heated surface to the liquid, it was possible to predict under which conditions the system boils and forms a new vapor phase. This process is directly linked to the state equation used in the model that determines which thermodynamic states are stable or unstable. It was also found that the magnitude of the gravitational field can affect the boiling temperature of the system due to changes in the pressure field.

Keywords: Lattice Boltzmann method. Pseudopotential method. Boiling. Multiphase simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Conjunto de nove velocidades para simulações hidrodinâmicas em duas dimensões. Oito velocidades possuem as mesmas direções dos vetores que conectam o nó central aos nós adjacentes. Adicionalmente, há a velocidade nula.	45
Figura 2 – Ilustração de um recipiente contendo água em diferentes estados termodinâmicos: (a) líquido comprimido; (b) líquido saturado; (c) mistura de líquido e vapor saturado.	51
Figura 3 – Ilustração de um diagrama $T - v$ para uma substância pura com linhas de transição entre as fases líquido e vapor.	52
Figura 4 – Gráfico que relaciona o fluxo de calor em função da diferença de temperatura (entre a superfície aquecida e a temperatura de saturação do fluido) para os três regimes de ebulição em piscina: nucleada; transição; e em filme.	68
Figura 5 – Simulação dos três regimes de ebulição em piscina com o método do pseudopotencial: (a) nucleada; (b) transição; (c) em filme.	69
Figura 6 – Padrões de escoamentos adiabáticos para macrocanais horizontais. . . .	72
Figura 7 – Padrões de escoamentos adiabáticos para microcanais horizontais: (a) bolhas, (b) bolhas, (c) pistonado, (d) agitante, (e) agitante, (f) anular, (g) anular.	73
Figura 8 – Padrões de escoamentos para ebulição convectiva em um canal horizontal.	73
Figura 9 – Simulação de escoamento com mudança de fase em canal bidimensional com diferentes números de Reynolds: (a) $Re = 0.27$; (b) $Re = 0.396$; (c) $Re = 0.468$	74
Figura 10 – Simulação de escoamento pistonado com mudança de fase em canal. . .	75
Figura 11 – Esquema do modelo físico de canal usado por Wang, Lou e Li (2020). .	76
Figura 12 – Simulação de nucleação de bolha em um canal com temperatura constante no aquecedor.	77
Figura 13 – Representação da caixa de fluido. Três paredes sólidas são fixas enquanto que a parede superior se move horizontalmente com velocidade U_w . . .	80
Figura 14 – Resultado da simulação da caixa de fluido para um tempo $t^* = tU_w/L = 200$ considerando os números de Reynolds: (a) $Re = 60$; (b) $Re = 600$	84
Figura 15 – Algoritmo geral de implementação do MBR.	85
Figura 16 – Escoamento ao redor de um conjunto de cilindros para dois números de Reynolds.	87

Figura 17 – Esquema representando a condição de contorno periódica aplicada às funções de distribuição. As funções que se propagam para fora da fronteira são as mesmas que adentram ao sistema na fronteira oposta.	88
Figura 18 – Esquematização do princípio do <i>Bounce-Back</i> . No caso de uma parede estática, considera-se que as partículas que se propagam em direção a parede colidem e retornam com velocidades espelhadas.	90
Figura 19 – Esquematização da gota de líquido caindo num meio de vapor sob a ação de um campo gravitacional g	93
Figura 20 – (a) Esquematização de duas fases separadas por uma interface plana. (b) Perfil de densidade difuso.	95
Figura 21 – Perfil de densidades obtido a partir da Equação (4.23).	96
Figura 22 – Esquema da condição inicial do teste de impacto contra uma parede. Uma gota estática é suspensa no vapor. Devido a ação da força gravitacional, a gota será acelerada em direção a parede sólida.	98
Figura 23 – Esquema da condição inicial do teste de impacto contra um filme líquido.	99
Figura 24 – Ilustração da condição inicial dos campos de densidade e velocidade utilizados no teste de oscilação suave de uma gás ideal.	100
Figura 25 – Comparação entre os resultados numéricos (obtidos com o MBR) e analíticos para o teste da oscilação suave de um gás ideal: (a) densidade do fluido ao longo do tempo na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido ao longo do tempo na mesma posição.	102
Figura 26 – Esquema do sistema físico usado para representar o canal.	103
Figura 27 – Curva de coexistência teórica calculada para diferentes valores de ϵ e a	116
Figura 28 – (a) Curva de coexistência numérica simulada para $(a, \epsilon) = (1/4, 1.94)$ e $(1/16, 1.99)$. (b) Comparação entre o método da força proposto e os métodos propostos por Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) e Kharmiani, Niazmand e Passandideh-Fard (2019).	117
Figura 29 – Comparação entre as espessuras de interface para diferentes valores do parâmetro a e temperaturas reduzidas. A densidade adimensional é dada por $\rho^* = (\rho - \rho_g)/(\rho_l - \rho_g)$	119
Figura 30 – Perfil de densidades teórico para uma interface plana. Adotou-se $a = 1/4$, $\epsilon = 1.94$ e $T_r = 0.7$	120
Figura 31 – (a) Tensão superficial para $a = 1/4$ e (b) para $a = 1/16$ considerando diferentes valores de A_3	121
Figura 32 – Oscilação de uma gota elíptica para um fluido modelado pela E-CS a $T_r = 0.7$. Os parâmetros usados para calcular a força foram $\epsilon = 1.94$ e $A_3 = 0.667$	125

Figura 33 – Comparação entre solução numérica e analítica para a oscilação de uma gota. Simulações utilizaram a E-CS com $T_r = 0.7$ e $\epsilon = 1.94$ para diferentes valores de tensão superficial.	125
Figura 34 – Imagens de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$. Simulações foram realizadas para $\epsilon = 1.94$, $A_3 = 0.67$ e $T_r = 0.37$, resultando numa razão de densidades de aproximadamente 2408. Os números adimensionais são $Re \approx 373$ e $We \approx 4.5$	127
Figura 35 – Imagens de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$. Simulações foram realizadas para $\epsilon = 1.94$, $A_3 = 0.167$ e $T_r = 0.37$, resultando numa razão de densidades de aproximadamente 1775. Os números adimensionais são $Re \approx 376$ e $We \approx 16.7$	128
Figura 36 – Comparação da solução numérica do MBR com o modelo do Swift e a solução analítica para: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido na mesma posição.	135
Figura 37 – Comparação da solução numérica do MBR com o modelo do Holdych e a solução analítica para: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido na mesma posição.	136
Figura 38 – Comparação entre solução numérica do MBR com o modelo proposto neste trabalho e a solução analítica para: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido na mesma posição.	136
Figura 39 – Comparação entre solução do MBR com o modelo proposto neste trabalho e a solução analítica para um caso com transferência de calor. São mostrados os campos de: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) temperatura do fluido na mesma posição.	138
Figura 40 – (a) Curva de coexistência numérica simulada para o MBR-P-P, e os métodos propostos por Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) e Li, Luo e Li (2013). (b) Erros relativos da densidade do vapor em comparação com a curva de Maxwell para cada método.	139
Figura 41 – Formato das gotas para diferentes τ com o MBR-P-P.	140
Figura 42 – Formato das gotas para diferentes τ o MBR-P-F.	141
Figura 43 – Ilustração das diferentes regiões de uma equação de estado genérica para uma determinada temperatura.	148
Figura 44 – Curva pressão-densidade para a E- <i>Smooth</i>	150
Figura 45 – Ilustração de como foi construída a E- <i>Smooth</i> com velocidade do som no vapor aumentada.	151
Figura 46 – Tensão superficial numérica (Num.) e teórica (Teo.) para diferentes temperaturas (T_r) considerando: (a) equação C-S e (b) equação Smooth.	154

Figura 47 – Densidades de coexistência do vapor para interfaces curvas de bolhas/gotas para os diferentes métodos a $T_r = 0.5$	155
Figura 48 – Capturas de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$ usando as equações de estado C-S, <i>Smooth</i> e de Peng para $T_r = 0.6$, $\nu_r = 5$, $We = 39.3$ e $Re = 112.5$	159
Figura 49 – Capturas de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$ usando as equações de estado C-S, <i>Smooth</i> e de Peng para $T_r = 0.6$, $\nu_r = 15$, $We = 69.9$ e $Re = 300$	160
Figura 50 – Capturas de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$ usando as equações de estado <i>Mod. Smooth</i> e de Peng para $T_r = 0.6$, $\nu_r = 15$, $We = 69.9$ e $Re = 300$	161
Figura 51 – Mapa de estabilidade para diferentes equações de estado com relação a temperatura reduzida T_r e razão de viscosidade ν_r para $Re = 300$	162
Figura 52 – Raio da gota ao longo do tempo para o teste da oscilação da gota. O raio médio é definido como $R_m = \sqrt{R_{min}R_{max}}$	168
Figura 53 – Comparação entre MBR-P e DF-P para o teste da gota oscilando.	168
Figura 54 – Imagens da evaporação de uma gota em diferentes instantes de tempo. Resultado obtido com o FD-P usando $\Delta x = 1/2$	169
Figura 55 – Comparação entre MBR-P e DF-P para o teste da gota evaporando.	170
Figura 56 – Esquema do sistema físico utilizado para o estudo termodinâmico.	173
Figura 57 – Ilustração da relação pressão-densidade dada pela E-CS para uma determinada temperatura fixa.	175
Figura 58 – Perfil de pressão para um exemplo com $h_v = h_l = 80$, $g = 1.5 \times 10^{-5}$, $q'/T_c = 2.5 \times 10^{-5}$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.	176
Figura 59 – Relação pressão-temperatura para o mesmo exemplo da Figura 58. Linhas de instabilidade termodinâmica também foram plotadas.	177
Figura 60 – Temperatura de ebulição como uma função da aceleração da gravidade para um sistema com: $h_v = h_l = 80$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.	178
Figura 61 – Temperatura de ebulição como uma função da aceleração da gravidade para um sistema com: $h_v = 20$, $h_l = 80$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.	179
Figura 62 – Comparação entre os Perfis de pressão analítico e numérico para um exemplo com $h_v = h_l = 80$, $g = 1.5 \times 10^{-5}$, $q'/T_c = 2.5 \times 10^{-5}$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.	181
Figura 63 – Perfil de pressão para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9109$ e $T_{cold}/T_c = 0.5891$	181

Figura 64 – Perfil de pressão para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9109$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$	182
Figura 65 – Perfil de pressão com $t = 2500$ para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9246$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$	183
Figura 66 – Perfil de densidade com $t = 2500$ para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9246$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$	184
Figura 67 – Perfil de densidade com $t = 47500$ para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9246$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$	184
Figura 68 – escoamento de uma bolha em diferentes instantes de tempo. Os pa- râmetros de simulação são: $Re = 80$, $We = 97$ sem a adição da força $F_x = 8\rho\nu_l U_{max}/L_y^2$. A condição convectiva é representada por “C” e a de Neumann nula por “N”.	186
Figura 69 – escoamento de uma bolha em diferentes instantes de tempo. Os pa- râmetros de simulação são: $Re = 80$, $We = 97$ com a adição da força $F_x = 8\rho\nu_l U_{max}/L_y^2$. A condição convectiva é representada por “C” e a de Neumann nula por “N”.	186
Figura 70 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e ângulo de contato $\theta = 90^\circ$, com a condição convectiva. . . .	188
Figura 71 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e ângulo de contato $\theta = 90^\circ$, com a condição convectiva modificada.	188
Figura 72 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e ângulo de contato $\theta = 90^\circ$, com a condição de Neumann nula.	189
Figura 73 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e superfície hidrofílica, com a condição convectiva modificada.	190
Figura 74 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e superfície hidrofílica, com a condição de Neumann nula. . . .	190

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Resultados para diferentes propriedades (tensão superficial e densidades das fases) obtidos em simulações de gotas estáticas com raio $R = 50$ a uma temperatura reduzida $T_r = 0.7$ em função da escolha dos parâmetros a e A_3 . Também apresentou-se os valores das densidades termodinamicamente consistentes para as fases vapor e líquido no caso de uma gota estática, ρ_v^t e ρ_l^t	123
Tabela 2 – Densidades de saturação e tensão superficial obtidas para uma gota estática a uma temperatura $T_r = 0.7$ usando a E-CS. Utilizou-se $a = 1/4$ e $\epsilon = 1.94$	124
Tabela 3 – Resultados do erro relativo $E_v(T_r)$ para diferentes temperaturas reduzidas T_r e para os métodos discutidos ao longo do texto. Para o esquema de Li <i>et al.</i> variou-se o parâmetro a da E-CS e para o método de Peng <i>et al.</i> variou-se o parâmetro r_θ	146
Tabela 4 – Parâmetros selecionados para atingir a espessura de interface W desejada para uma temperatura $T_r = 0.5$. O parâmetro a foi usado na E-CS com esquema de Li <i>et al.</i> , r_θ no método de Peng <i>et al.</i> , α e α_n na <i>E-Smooth</i>	146
Tabela 5 – Resultados do erro relativo $E_v(T_r)$ para a <i>E-Smooth</i> com as duas abordagens discutidas no texto. As duas abordagens usam $a = 0.5$ na região do líquido. A notação α indica que foi utilizado $a = 0.5$ na região do vapor e α^n indica $a = 2$ na região do vapor.	150
Tabela 6 – Erros relativos para a densidade do vapor em porcentagem (%) para gotas circulares ($R = 50$).	156
Tabela 7 – Máxima magnitude das correntes espúrias em simulações de gotas circulares com $R = 50$	157
Tabela 8 – Parâmetros usados nas simulações dinâmicas: Número de Reynolds $Re = U/\nu_l$; Weber $We = \rho_l U^2 D/\gamma$; temperatura reduzida T_r ; razão de viscosidade ν_r ; e espessura da interface W	157
Tabela 9 – Parâmetros das equações de estado (r_θ , a , e α^n) e tensão (γ_θ , γ_a , e γ_α) para as equações de Peng, C-S e <i>Smooth</i> , respectivamente, para $T_r = 0.6, 0.5$ e espessuras de interfaces $W = 3.5$ e 3.1	158

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BGK	Bhatnagar, Gross, Krook
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CS	Carnahan-Starling
ECE	Equação de conservação de energia
EMBR	Equação do método de Boltzmann em rede
E-CS	Equação de estado de Carnahan-Starling
E-PR	Equação de estado de Peng-Robinson
FCF	Fluxo crítico de calor
GPU	<i>Graphics processing unit</i>
MBR	Método de Boltzmann em rede
MBR-P	Método de Boltzmann em rede do pseudopotencial
MBR-P-F	Abordagem de força do MBR-P
MBR-P-P	Abordagem de pressão do MBR-P
MRT	<i>Multiple relaxation time</i>
PR	Peng-Robinson

LISTA DE SÍMBOLOS

Latinos

a	Parâmetro de atração molecular da equação de estado
A	Coefficiente genérico
A_c	Área da seção transversal de um canal
b	Parâmetro relacionado à dimensão molecular da equação de estado
B	Coefficiente genérico
c	Velocidade discreta da partícula
c_v	Calor específico a volume constante
c_s	Velocidade do som na rede
C	Coefficiente genérico
C	Termo fonte para controle de tensão superficial
D	Diâmetro
e	Energia específica, sendo a soma da energia interna com a cinética
E	Erro numérico
f	Função de distribuição de partículas
F	Campo vetorial de força volumétrica
F'	Termo do esquema de força do método de Boltzmann em rede
\mathcal{F}	Representação de uma função genérica
G	Parâmetro auxiliar da densidade efetiva
g	Aceleração da gravidade
h	Altura
$H^{(n)}$	Polinômio de Hermite tensorial de ordem n
k	Parâmetro de controle da tensão superficial em modelos de interface difusa

$k_{1,2,3}$	Coeficientes da força de interação
L	Símbolo genérico para comprimento
m_p	Massa de partículas num determinado volume
M	Momento de uma função com relação ao espaço de velocidades
\mathbf{M}	Matriz de transformação no espaço de momentos
Ma	Número de Mach
n_p	Número de partículas num determinado volume
N	Símbolo genérico para número de nós numa determinada direção do domínio computacional
O	Ordem segundo notação O-grande
p	Símbolo genérico para se referir a pressão, sem especificar se é hidrodinâmica ou termodinâmica
\mathbf{p}	Tensor de pressões
\dot{q}	Fluxo de calor
\mathbf{Q}	Tensor do termo fonte para tensão superficial no método do pseudopotencial
R	Raio
R_g	Constante específica do gás
S	Símbolo para termo fonte genérico no método de Boltzmann em rede
Re	Número de Reynolds
t	Instante de Tempo
T	Temperatura
\mathbf{u}	Velocidade vetorial macroscópica
U	Símbolo genérico para velocidade escalar
v	Volume específico
v_s	Velocidade do som do fluido
\mathbf{v}	Velocidade vetorial da partícula

V	Volume
$w(\boldsymbol{v})$	Função peso para a expansão de Hermite
w_i	Pesos da quadratura relacionados ao conjunto de velocidades
W	Espessura da interface
We	Número de Weber
\boldsymbol{x}	Coordenada espacial
z	Função auxiliar para solução do problema da interface plana

Gregos

α	Difusividade térmica
γ	Tensão superficial
δ	Delta de Kronecker
ϵ	Parâmetro relacionado a curva de saturação do método do pseudopotencial
θ	Símbolo genérico para ângulos
ρ	Densidade
κ	Condutividade térmica
Λ	Matriz de relaxação
μ	Viscosidade dinâmica ou potencial químico
ν	Viscosidade cinemática ou decaimento da solução oscilatória
ν_r	Razão de viscosidades entre a fase vapor e líquido
$\boldsymbol{\sigma}$	Tensor de tensões
τ	Tempo de relaxação
$\boldsymbol{\tau}$	Tensor de tensões viscosas
ϕ	Termo fonte para equação de energia baseada no método de Boltzmann em rede
Φ	Função de distribuição para temperatura
ψ	Densidade efetiva ou potencial de interação

ω Frequência de relaxação ou frequências em geral

Ω Operador de colisão

Subscritos

c Referente ao ponto crítico da substância

EOS Referente à equação de estado, *Equation of State*

g Gravitacional

h Hidráulico

i Componente i da discretização no espaço de velocidades

l Referente à fase líquida

sat Referente ao valor de saturação

v Referente à fase vapor

$\alpha\beta\dots\omega$ Notação indicial relacionada às coordenadas do espaço euclidiano

Sobrescritos

eq Referente ao valor de equilíbrio

K Referente ao trabalho de Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009)

$Li,1$ Referente ao trabalho de Li *et al.* (2012)

$Li,2$ Referente ao trabalho de Li, Luo e Li (2013)

$Li,3$ Referente ao trabalho de Li e Luo (2013)

neq Referente ao valor de não-equilíbrio

sat Referente ao valor de saturação

SC Referente ao trabalho de Shan e Chen (1993)

Z Referente ao trabalho de Zhang e Chen (2003)

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	31
2	FUNDAMENTOS DO MÉTODO DE BOLTZMANN EM REDE	35
2.1	Teoria cinética dos gases	35
2.1.1	Função de distribuição	36
2.1.2	Função de distribuição de equilíbrio - Distribuição de Maxwell-Boltzmann	37
2.1.3	Equação de Boltzmann	39
2.1.4	Comportamento macroscópico da equação de transporte de Boltzmann	40
2.2	O método de Boltzmann em rede	42
2.2.1	Discretização da equação de transporte de Boltzmann	42
2.2.2	Conjuntos de velocidades	44
2.2.3	Esquema de força	45
2.2.4	Operador de colisão de múltiplos tempos de relaxação	47
2.2.5	Análise do MBR com operador BGK	48
2.3	O Método do Pseudopotencial	50
2.3.1	Definições Termodinâmicas	50
2.3.2	Modelos de interface difusa	52
2.3.3	O tensor de pressões do método do pseudopotencial	55
2.3.4	Primeiros trabalhos	58
2.3.5	Consistência termodinâmica	59
2.3.6	Tensão superficial	62
2.3.7	Conservação de energia	63
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	67
3.1	Ebulição em piscina	67
3.1.1	Conceitos sobre ebulição em piscina	67
3.1.2	Simulações de ebulição em piscina com o MBR-P	69
3.2	Ebulição convectiva em canais	71
3.2.1	Conceitos relacionados a ebulição convectiva em canais	71
3.2.2	Simulações de ebulição convectiva com o MBR-P	73
4	METODOLOGIA	79
4.1	Implementação do MBR	79
4.2	Algoritmo de solução do MBR	83
4.3	Unidades de rede	84
4.4	Condições de contorno	87

4.4.1	Condição periódica	87
4.4.2	<i>Bounce-Back</i>	89
4.5	Casos Teste	91
4.5.1	Equações de Estado	91
4.5.2	Interface plana	94
4.5.3	Gota estática	96
4.5.4	Oscilação suave de uma gota	97
4.5.5	Colisão de uma gota contra uma parede	97
4.5.6	Colisão de uma gota contra um filme líquido	99
4.5.7	Oscilação suave de um gás ideal	100
4.5.8	Escoamento no interior de um canal com mudança de fase	103
5	RESULTADOS: ABORDAGENS DE FORÇA E PRESSÃO	107
5.1	Desenvolvimento Teórico	107
5.1.1	Discretizando os gradientes do pseudopotencial	107
5.1.2	Formas de Implementar o Tensor de Pressão na EMBR	109
5.2	Abordagem da Força: Desenvolvimento Teórico	110
5.2.1	Teoria	110
5.2.2	Implementação	113
5.3	Abordagem de Força: Testes de Validação	116
5.3.1	Escolha dos Parâmetros	116
5.3.2	Teste de Interface Plana	117
5.3.3	Teste da Gota Estática	118
5.3.4	Testes Dinâmicos: Oscilação de uma gota	124
5.3.5	Testes Dinâmicos: Impacto de uma gota	126
5.4	Abordagem da Pressão: Desenvolvimento Teórico	128
5.4.1	Análise do esquema de pressão	128
5.4.2	Abordagem de pressão melhorada	132
5.5	Abordagem da Pressão: Testes de Validação	134
5.5.1	Teste da oscilação suave de um gás ideal	134
5.5.2	Teste da Interface Plana	139
5.5.3	Teste da Gota Estática	140
6	RESULTADOS: EQUAÇÃO DE ESTADO	143
6.1	Análise da curva de coexistência do método do pseudopotencial	144
6.1.1	Equações de estado e acurácia numérica	145
6.1.2	Nova equação de estado	147
6.1.3	Nova equação de estado com velocidade do som no vapor aumentada	150
6.2	Testes estáticos para interfaces curvas	151
6.2.1	Lei de Laplace	152

6.2.2	Densidades de coexistência	154
6.2.3	Correntes espúrias	156
6.3	Testes Dinâmicos	156
6.3.1	Impacto da gota com $Re = 112.5$ e $Re = 300$	157
6.3.2	Limites de estabilidade	160
6.3.3	Resumo dos resultados dinâmicos	162
6.4	Diferenças finitas para o método do pseudopotencial	163
6.4.1	Equações governantes	163
6.4.2	Discretização no espaço e no tempo	164
6.4.3	Teste dinâmico: oscilação suave de uma gota	167
6.4.4	Teste dinâmico: Evaporação de uma gota	169
7	RESULTADOS: ESTUDO FUNDAMENTAL DE EBULIÇÃO NO	
	MBR-P	171
7.1	Estudo fundamental de ebulição e efeito da força gravitacional . . .	171
7.1.1	Força gravitacional na literatura do método do pseudopotencial	171
7.1.2	Estudo termodinâmico	173
7.1.2.1	Perfis de densidade, pressão e temperatura	174
7.1.2.2	Condições termodinâmicas para a formação de uma nova fase	176
7.1.3	Validação da solução analítica com o MBR-P	180
7.1.4	Avaliação da mudança de fase com o MBR-P	180
7.2	Simulações de escoamentos em canais com mudança de fase	185
7.2.1	Escoamento de uma bolha sem transferência de calor	185
7.2.2	Escoamento em canal com transferência de calor	187
8	CONCLUSÃO	191
8.1	Sugestões para trabalhos futuros	192
	REFERÊNCIAS	195

1 INTRODUÇÃO

Os processos de ebulição, que envolvem a transformação de uma substância do estado líquido para o gasoso numa interface sólido-líquido, são de grande importância prática na engenharia (ÇENGEL, 2003; MAHMOUD; KARAYIANNIS, 2021). Este fenômeno físico pode ser utilizado para remover uma grande quantidade de calor de uma superfície aquecida. Há diversas formas de se empregar este fenômeno com fins de refrigeração, algumas dessas formas são: ebulição em piscina, ebulição convectiva no interior de macro e microcanais, e através da utilização de jatos e *sprays* (MUDAWAR, 2013; MAHMOUD; KARAYIANNIS, 2021).

A ebulição em piscina ocorre quando não há a presença de um escoamento externo. Os principais mecanismos de transferência de calor são: a convecção natural enquanto ainda há uma baixa formação e interação entre bolhas, microconvecção devido ao crescimento das bolhas, vaporização da microcamada de líquido presa embaixo da bolha, vaporização do líquido superaquecido ao redor da bolha, a condução transiente de calor quando o líquido recobre a superfície após o desprendimento da bolha e também a convecção resultante da agitação do líquido causada pela movimentação das bolhas (MAHMOUD; KARAYIANNIS, 2021).

Na ebulição convectiva em macro e microcanais há também a presença de um escoamento forçado, que geralmente é resultado da presença de uma bomba no sistema que força a circulação do fluido. Muito esforço vem sendo empregado na literatura para permitir uma transição de pesquisa de laboratório para aplicações comerciais. As possíveis aplicações deste fenômeno envolvem refrigeração de *hardware* de computadores, pás de turbinas e paredes de reatores de fusão nuclear, além de permitir o desenvolvimento de sistemas de refrigeração miniaturizados que poupariam fluido refrigerante (MUDAWAR, 2011; KARAYIANNIS; MAHMOUD, 2017).

Dada a sua eficiência, há um grande interesse no emprego de ebulição convectiva em problemas práticos. Porém, estas aplicações esbarram em dificuldades técnicas. Para um fluxo de calor suficientemente elevado, o regime de mudança de fase do dispositivo pode passar para a ebulição em filme, em que há a completa secagem da parede. Neste regime, há uma drástica queda na eficiência de transferência de calor e com isso a temperatura da parede do dispositivo sofre uma grande elevação, podendo danificar severamente o equipamento. Este fenômeno em que ocorre a secagem e grande elevação da temperatura se chama fluxo crítico de calor (FCC) e constitui no máximo fluxo de calor que um determinado dispositivo consegue transferir (TIBIRICA; CZELUSNIAK; RIBATSKI, 2015). Além disso, escoamentos multifásicos podem sofrer com instabilidades de origem térmica e hidrodinâmica (KAKAÇ; BON, 2008; GRZYBOWSKI; MOSDORF, 2012). Estas

instabilidades podem fazer com que a velocidade de escoamento oscile bastante, inclusive precipitando o ponto de completa secagem da parede, reduzindo assim o FCC de maneira inesperada em projeto. Desta forma, se faz necessário um grande conhecimento sobre os fenômenos físicos envolvidos no processo de mudança de fase, de forma a permitir a sua aplicação satisfatória em sistemas de engenharia.

Uma maneira de se estudar este fenômeno é através da utilização de métodos numéricos. A mecânica dos fluidos computacional (CFD do inglês *Computational Fluid Dynamics*) é a área de pesquisa que se dedica ao estudo dos mais variados fenômenos físicos envolvendo fluidos com o emprego de métodos numéricos. De maneira geral, estes métodos são baseados em discretizações das equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia derivadas a partir da hipótese de meio contínuo. Recentemente o método de Boltzmann em rede (MBR), que segue outra abordagem em comparação com os métodos tradicionais, vem ganhando destaque na literatura (PERUMAL; DASS, 2015). Este é baseado na equação de transporte de Boltzmann em que o fluido é modelado como um grande conjunto de partículas fictícias. Sob certas condições a solução desta equação se aproxima bem das equações de Navier-Stokes, o que permite o emprego deste método para simular escoamentos que antes eram realizados apenas por métodos tradicionais. A grande vantagem do MBR é a sua simplicidade computacional e o fato de ser muito apropriado para implementações em paralelo utilizando unidades gráficas de processamento (GPU) (KRAUSE; GENGENBACH; HEUVELINE, 2010; FIETZ *et al.*, 2012).

Uma extensão muito popular do MBR para sistemas multifásicos é o método do pseudopotencial (MBR-P). Este esquema numérico permite a simulação de escoamentos multifásicos apenas com a adição de uma força apropriada na equações governantes (CHEN *et al.*, 2014; LI *et al.*, 2016). Esta é chamada de força fluido-fluido porque ela replica o efeito de interações das partículas que compõem o fluido. A vantagem deste método é o fato de se manter a simplicidade e eficiência do esquema numérico baseado no MBR. Os métodos tradicionais desenvolvidos para simulação de sistemas multifásicos costumam ser computacionalmente complexos, pois muitos envolvem o acompanhamento e modelamento especial da interface líquido-vapor. No MBR-P a interface surge naturalmente da força de interação, dando um grande ganho de eficiência. Isto fez com que houvesse um grande interesse na literatura por esta abordagem (HUANG; SUKOP; LU, 2015, p. 9). Apesar de muito esforço sendo empregado, os trabalhos envolvendo o MBR-P são qualitativos, com os autores modelando um fluido fictício em que as propriedades são convenientemente escolhidas para manter o método estável. Isto faz com que as condições simuladas estejam muito longe de uma instalação real.

Faz-se necessário uma ampla análise da literatura para que se identifique possíveis deficiências no método que justifiquem os autores adotarem condições semelhantes em suas simulações e que estão longe de representar fluidos reais em condições experimentais.

Recentemente, Guzella (2021) publicou uma tese que tentou simular a ebulição em piscina do fluido HFE-7100 em condições semelhantes a de experimentos laboratoriais. Porém, ao se tentar reproduzir estas condições com o método do pseudopotencial, as simulações teriam um custo computacional elevado. Como estavam sendo utilizados códigos seriais implementados em Matlab, os custos computacionais inviabilizaram estas simulações.

Muitos sistemas bifásicos reais em condições encontradas em aplicações estão em temperaturas razoavelmente abaixo da temperatura crítica e possuem altas razões de densidade. Uma mistura líquido-vapor saturada de água em pressão ambiente possui uma razão de densidades próxima a 1000. A mistura líquido-vapor de HFE-7100 saturada entre 1 e 2 bar de pressão possui razão de densidades entre 150 e 73 (GUZELLA, 2021). Diversos autores relatam deficiências do MBR-P em simular tais condições. Alguns autores relatam problemas de estabilidade quando o método é acoplado com uma equação de energia para resolver problemas térmicos (FANG *et al.*, 2017; PASIECZYNSKI; CHEN, 2020).

Fang *et al.* (2017) tentaram diversas estratégias para conseguir simular ebulição em piscina com altas razões de densidade, tendo sido alcançada uma razão máxima próxima a 200 com certas alterações na equação de estado que aumentaram a espessura da interface. Outros autores relataram erros numéricos e problemas de inconsistência. Lycett-Brown e Luo (2015) mostraram um desvio nas densidades do vapor com relação a regra de Maxwell para altas razões de densidade. Este desvio foi amenizado com alterações na equação de estado que aumentaram a espessura da interface. Huang, Yin e Killough (2019) mostraram que o método do pseudopotencial pode apresentar grandes inconsistências na densidade do vapor a baixas temperaturas (e altas razões de densidade) em testes com interfaces curvas.

Os fatos aqui relatados evidenciam que o MBR-P é um esquema numérico muito promissor dada a sua simplicidade e eficiência computacional. Porém, ainda é muito incipiente e necessita de diversos aprimoramentos para que possa ser utilizado em simulações realistas. Desta forma, o objetivo com este trabalho é a realização de um estudo fundamental do MBR-P. A intenção é ampliar a compreensão que se tem dos mecanismos de funcionamento do método. Entender melhor as suas deficiências e propor correções que permitam ampliar a sua utilização. Com isso, deseja-se fazer com que o método esteja num nível maior de desenvolvimento e mais próximo de ser utilizado para modelar problemas reais de engenharia. Os objetivos específicos e suas motivações são descritas a seguir:

- Como já foi comentado, o método sofre com problemas relacionados a consistência física (HUANG; YIN; KILLOUGH, 2019), acurácia (LYCETT-BROWN; LUO, 2015) e estabilidade (FANG *et al.*, 2017). Em diversos métodos numéricos, estes fatores estão intimamente ligados ao procedimento de discretização. O uso de diferentes *stencils* pode afetar tanto a estabilidade, quanto a acurácia. Desta forma, será realizado um estudo sobre o processo de discretização do MBR-P, visando a identificação das melhores estratégias para este procedimento.

- Comentou-se que alguns autores conseguiram amenizar deficiências do MBR-P através de ajustes na equação de estado utilizada no método. Apesar da aparente importância desta equação, poucos trabalhos se dedicaram a estudar os seus efeitos sobre os resultados do método de maneira mais detalhada. Desta forma, entre os objetivos deste trabalho está a realização de um estudo abrangente sobre como a equação de estado pode afetar os erros numéricos e a estabilidade do MBR-P.
- Desde a proposição do MBR-P, diversos trabalhos vem sendo publicados com simulações de ebulição em piscina e canais, mesmo que ainda muito qualitativos. Porém, pouco se estudou e discutiu na literatura a respeito dos mecanismos físicos do método que permitem a simulação de processos de mudança de fase. Estes mecanismos, podem revelar possíveis inconsistências e deixar mais claro quais os caminhos para simulações mais realistas. Assim, será realizado um estudo fundamental de ebulição com o MBR-P, com foco na identificação dos mecanismos por trás da mudança de fase no método.

2 FUNDAMENTOS DO MÉTODO DE BOLTZMANN EM REDE

Neste capítulo serão apresentados alguns conceitos da teoria cinética dos gases, do método de Boltzmann em rede e do método do pseudopotencial. A equação fundamental do MBR pode ser interpretada como uma forma discretizada da equação de transporte de Boltzmann, sendo que esta advém da teoria cinética dos gases. Desta forma, com o intuito de embasar a presente exposição a respeito do MBR, optou-se por anteriormente apresentar alguns fundamentos físicos.

2.1 Teoria cinética dos gases

A abordagem mais comum em engenharia para descrição física de um fluido é a utilização da mecânica do contínuo. Para uma quantidade de matéria são aplicadas a lei de conservação da massa, as equações de Navier-Stokes e a primeira lei da termodinâmica. Também são necessárias relações adicionais como as equações de estado. Esta abordagem é denominada macroscópica pois a única referência à microestrutura da matéria é a hipótese de que esta corresponde a um meio contínuo. As relações entre as diversas propriedades termodinâmicas são obtidas empiricamente através das equações de estado para cada sistema em particular, em função de sua composição.

Uma outra abordagem é considerar que um fluido é constituído por um grande número de partículas e definir como estas partículas interagem entre si. A partir desta consideração há dois caminhos para a descrição do fluido. O primeiro envolve a descrição de cada partícula individualmente; porém, devido ao grande número de equações, a modelagem fica restrita a fenômenos de escalas de tempo e espaço reduzidas. O outro caminho passa pela modelagem estatística de um grande conjunto de partículas e definição de como a dinâmica destas evolui com o tempo devido às interações intermoleculares. É neste campo que a teoria cinética está situada.

Nas próximas seções, serão apresentados alguns conceitos fundamentais da teoria cinética dos gases, mais especificamente, da teoria relacionada à dinâmica de gases rarefeitos. Esta consideração implica que as partículas que constituem o gás descrevem trajetórias em que, na maior parte do tempo e das distâncias espaciais percorridas, há a ausência de interações intermoleculares. Estas interações são chamadas de colisões e ficam restritas a intervalos muito curtos de tempo e a uma fração muito pequena da trajetória total das partículas. O fato das colisões serem consideradas raras implica também que a maioria destas envolvem apenas duas partículas o que facilita a descrição matemática. Outra hipótese simplificadora que envolve os resultados que serão apresentados é a consideração de que o gás é monoatômico. Isto implica na energia associada à translação das moléculas ser o único modo de armazenar energia da matéria que constitui o gás.

2.1.1 Função de distribuição

Na teoria cinética, a função de distribuição é uma ferramenta que auxilia na descrição estatística de um grande conjunto de partículas. As variáveis independentes desta função são o tempo, as coordenadas espaciais, e as velocidades das partículas (comumente chamado de espaço de velocidades). O seu significado físico pode ser compreendido a partir da seguinte definição (GOMBOSI, 1994): Para uma determinada região do espaço que ocupa um volume V , em um instante de tempo t especificado, a função de distribuição $f = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ permite saber a massa $m_p(t)$ de partículas que possuem velocidades entre os intervalos $(v'_x \leq v_x \leq v'_x + \Delta v_x)$, $(v'_y \leq v_y \leq v'_y + \Delta v_y)$ e $(v'_z \leq v_z \leq v'_z + \Delta v_z)$ através da Equação (2.1).

$$\int_V \int_{v'_x}^{v'_x + \Delta v_x} \int_{v'_y}^{v'_y + \Delta v_y} \int_{v'_z}^{v'_z + \Delta v_z} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z dV = m_p(t). \quad (2.1)$$

Como o tratamento matemático está sendo desenvolvido em cima da hipótese de gás monoatômico (que implica em todas as partículas terem a mesma massa) pode-se normalizar a função f para se obter tanto a massa $m_p(t)$ quanto o número de partículas $n_p(t)$ através da Equação (2.1). O segundo caso pode ser convertido no primeiro apenas pela multiplicação da massa molecular.

A partir da função de distribuição é possível obter uma propriedade hidrodinâmica muito utilizada na mecânica dos fluidos que é a densidade. Esta propriedade é definida como o limite da razão entre a massa e o volume de uma quantidade de matéria quando este volume tende a zero: $\lim_{V \rightarrow 0} \Delta m / \Delta V$. Também é necessário que este volume tenda a um ponto, ou seja, se l_V é a maior distância entre dois pontos que constituem este volume então l_V precisa tender a zero. A massa total das partículas de um gás em um determinado volume pode ser obtida alterando os limites de integração da Equação (2.1) para englobar todas as velocidades possíveis. Combinando as definições de densidade e de função de distribuição, obtém-se:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) dv_x dv_y dv_z = \rho(t, \mathbf{x}). \quad (2.2)$$

De acordo com a definição acima, no sistema internacional de unidades (SI), a função de distribuição possui unidades $[f] = kg \cdot s^3 \cdot m^{-6}$. É possível descrever a Equação (2.2) afirmando que a densidade é igual à integral da função de distribuição em todo o espaço de velocidades. A partir deste ponto, por simplificação, serão omitidos os intervalos de integração e usada a notação curta $\int d^3v = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dv_x dv_y dv_z$ para se referir às integrações em todo o espaço de velocidades.

Outra aplicação muito importante da função f é na obtenção de médias em relação a velocidade das partículas. Por exemplo, em um determinado volume, a velocidade média das partículas de um fluido $\mathbf{u}(t)$ pode ser definida como a somatória da velocidade de cada partícula multiplicada por sua massa, dividindo esta soma pela massa total de

todas as moléculas. A velocidade média local do fluido $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ é calculada pela definição anterior simplesmente fazendo o limite do volume tender a zero: $V \rightarrow 0$. Ao longo do texto, $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ será referido apenas como velocidade do fluido ou velocidade macroscópica. O mesmo conceito se aplica à velocidade quadrática média do fluido, que está relacionada à energia específica média $e(t, \mathbf{x})$. Estas grandezas podem ser obtidas a partir da função de distribuição por meio das seguintes operações:

$$\int \mathbf{v}(t, \mathbf{x}) f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3v = \rho(t, \mathbf{x}) \mathbf{u}(t, \mathbf{x}), \quad (2.3a)$$

$$\frac{1}{2} \int |\mathbf{v}(t, \mathbf{x})|^2 f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3v = \rho(t, \mathbf{x}) e(t, \mathbf{x}). \quad (2.3b)$$

As médias apresentadas nas Equações (2.2), (2.3a) e (2.3b) estão relacionadas ao conceito de momento de uma função de distribuição, que são integrais no espaço de velocidades do produto de um tensor pela própria função. Estes tensores são obtidos a partir do campo de velocidades, o tensor de ordem 0 é igual a 1, o tensor de ordem 2 é dado por v_α , enquanto que o de ordem 3 é igual a $v_\alpha v_\beta$. A ordem de cada momento está relacionada à ordem do tensor. O momento de ordem 0 ($M^{(0)}$), que é obtido a partir da integração de $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ no espaço de velocidades, corresponde à densidade. O momento de ordem 1 ($M_\alpha^{(1)}$) é obtido através da integração de $v_\alpha f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ e corresponde à densidade de quantidade de movimento linear em cada direção $\rho(t, \mathbf{x}) u_\alpha(t, \mathbf{x})$. A partir da integração de $v_\alpha v_\beta f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ obtém-se o momento de ordem dois ($M_{\alpha\beta}^{(2)}$). A metade do traço deste tensor resulta na densidade de energia $\rho(t, \mathbf{x}) e(t, \mathbf{x})$. A importância dos momentos se deve ao fato de estarem relacionados a grandezas físicas importantes como densidade, velocidade e energia. Mais detalhes a respeito da função de distribuição podem ser vistos em Gombosi (1994) e Kremer (2005).

2.1.2 Função de distribuição de equilíbrio - Distribuição de Maxwell-Boltzmann

Em 1859, James Clerk Maxwell deduziu uma expressão para a função de distribuição de um gás, aprisionado em um recipiente, em condição de equilíbrio termodinâmico (GOMBOSI, 1994). Maxwell obteve seu resultado a partir de cinco hipóteses. Na primeira, supõe-se que o gás é composto por um número indefinido de pequenas esferas rígidas que colidem entre si, sendo estas colisões perfeitamente elásticas. Também considerou que, em qualquer localidade espacial, a distribuição de moléculas é independente do tempo. A terceira hipótese afirma que, após uma colisão, as direções das velocidades das partículas são distribuídas com igual probabilidade entre todos os ângulos sólidos. Além disso, considerou que, após um grande número de colisões, as componentes ortogonais da velocidade são estatisticamente independentes. E por fim, supõe que a função de distribuição é espacialmente uniforme e isotrópica; portanto, não depende da orientação da velocidade das partículas, mas apenas de sua magnitude.

O resultado obtido por Maxwell é expresso a seguir:

$$f^{eq}(\mathbf{v}) = \rho \left(\frac{1}{2\pi R_g T} \right)^{3/2} e^{-|\mathbf{v}|^2/(2R_g T)}. \quad (2.4)$$

A velocidade \mathbf{v} na Equação (2.4) é medida em relação ao referencial do recipiente. Nota-se a dependência em relação à densidade ρ e à temperatura do fluido T . Esta função é conhecida como função de distribuição de equilíbrio. No SI, as unidades das variáveis que compõem a Equação (2.4) são: $[R_g] = J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$, $[T] = K$, $[\mathbf{v}] = m \cdot s^{-1}$ e $[\rho] = kg \cdot m^{-3}$. Desta forma, $[R_g T] = m^2 \cdot s^{-2}$, o expoente $|\mathbf{v}|^2/(2R_g T)$ é adimensional e $[f^{eq}] = kg \cdot s^3 \cdot m^{-6}$.

Posteriormente, Ludwig Boltzmann desenvolveu uma equação (que leva o seu nome) que descreve como a função de distribuição evolui no tempo a partir da dinâmica de colisões das partículas que compõem um gás monoatômico rarefeito. A partir de um procedimento mais rigoroso que o desenvolvido por Maxwell, Boltzmann deduziu que, em uma condição de equilíbrio, a equação de transporte de Boltzmann fornece o resultado obtido na Equação (2.4). Este procedimento é conhecido como teorema H de Boltzmann e sua dedução pode ser encontrada em Chapman e Cowling (1952). Desta forma, esta função ficou conhecida como distribuição de Maxwell-Boltzmann.

Note-se que o conceito de equilíbrio, Equação (2.4), implica nas grandezas hidrodinâmicas serem uniformes e estáticas (não variam ao longo do tempo). Um conceito muito utilizado em diversos modelos físicos de fenômenos dinâmicos é o de equilíbrio local. Neste caso, considera-se que as grandezas físicas não são uniformes e que as propriedades do fluido estão evoluindo ao longo do tempo. Porém, localmente a matéria pode ser modelada como se estivesse em uma condição de equilíbrio. Esta hipótese, sugere a seguinte equação:

$$f^{eq}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \rho(t, \mathbf{x}) \left(\frac{1}{2\pi R_g T(t, \mathbf{x})} \right)^{3/2} e^{-|\mathbf{v} - \mathbf{u}(t, \mathbf{x})|^2/(2R_g T(t, \mathbf{x}))}. \quad (2.5)$$

Agora, as grandezas físicas do fluido são funções do tempo e do espaço, $\rho = \rho(t, \mathbf{x})$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t, \mathbf{x})$ e $T = T(t, \mathbf{x})$. Outra diferença é a presença da velocidade média \mathbf{u} do fluido. Na distribuição de equilíbrio original, \mathbf{v} representava a velocidade da partícula com relação ao recipiente, que também poderia possuir uma determinada velocidade. Naquele caso, a velocidade média do fluido é equivalente a velocidade do recipiente. Neste caso, subtraiu-se \mathbf{u} para manter a consistência. Os momentos da Equação (2.5) são dados por:

$$\int f^{eq}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3v = \rho(t, \mathbf{x}), \quad (2.6a)$$

$$\int v_\alpha(t, \mathbf{x}) f^{eq}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3v = \rho(t, \mathbf{x}) u_\alpha(t, \mathbf{x}), \quad (2.6b)$$

$$\int v_\alpha(t, \mathbf{x}) v_\beta(t, \mathbf{x}) f^{eq}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d^3v = \rho(t, \mathbf{x}) u_\alpha(t, \mathbf{x}) u_\beta(t, \mathbf{x}) + \rho(t, \mathbf{x}) R_g T(t, \mathbf{x}) \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.6c)$$

No MBR, a função de equilíbrio local desempenhará um papel muito importante. Por simplificação, a Equação (2.5) será referida como função de distribuição de equilíbrio ou apenas função de equilíbrio no decorrer do texto.

2.1.3 Equação de Boltzmann

A seguinte descrição da equação de transporte de Boltzmann é baseada em Krüger *et al.* (2017). Esta equação descreve a evolução da função de distribuição ao longo do tempo, sendo esta função dependente das variáveis tempo t , do vetor posição \mathbf{x} e do vetor velocidade \mathbf{v} . A derivada total da função distribuição com relação ao tempo é dada por:

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) \left(\frac{dt}{dt} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial x_\alpha} \right) \left(\frac{dx_\alpha}{dt} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial v_\alpha} \right) \left(\frac{dv_\alpha}{dt} \right). \quad (2.7)$$

No lado direito da equação, aparecem os termos $dt/dt = 1$, a velocidade do fluido $dx_\alpha/dt = v_\alpha$, e da segunda lei de Newton $dv_\alpha/dt = F_\alpha/\rho$, sendo F_α a força de campo específica. Identificando $df/dt = \Omega(f)$, pode-se reescrever a equação acima na forma:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f}{\partial x_\alpha} + \frac{F_\alpha}{\rho} \frac{\partial f}{\partial v_\alpha} = \Omega(f). \quad (2.8)$$

A Equação (2.8) é conhecida como equação de transporte de Boltzmann. O termo do lado direito da equação é denominado de termo ou operador de colisão, que corresponde ao efeito que as colisões entre as partículas possuem na evolução da função de distribuição. A expressão do termo de colisão deduzida por Boltzmann pode ser encontrada em Chapman e Cowling (1952). Segundo Kremer (2005), um modelo simplificado do operador de colisão, que permite simular um fluido com comportamento macroscópico similar ao da equação de Navier-Stokes, é o modelo de Bhatnagar, Gross e Krook (1954). Este também é chamado apenas de operador BGK e é dado pela expressão:

$$\Omega(f, f^{eq}) = -\frac{f - f^{eq}}{\tau}. \quad (2.9)$$

Neste caso, o operador depende da função de distribuição de equilíbrio, Equação (2.5), e também de um parâmetro τ denominado de tempo de relaxação.

Um requisito necessário para que um modelo possa ser utilizado como termo de colisão de maneira consistente é o respeito aos princípios de conservação de massa, quantidade de movimento linear e energia nas colisões, além da equação de transporte de Boltzmann resultante respeitar o teorema H (KREMER, 2005). No caso do modelo BGK, a conservação dos momentos é imediata, pois a função de equilíbrio é construída de forma a respeitar essa conservação. Ainda de acordo com Kremer (2005), o modelo BGK permite a recuperação das equações de Navier-Stokes e conservação de energia desejadas; porém, os coeficientes de transporte obtidos não correspondem aos mesmos que são obtidos através do termo de colisão original de Boltzmann.

Este fato não representa necessariamente um problema, pois muitas vezes em simulações numéricas deseja-se apenas ajustar os parâmetros de forma que os coeficientes de transporte do fluido correspondam aos valores desejados. Um outro ponto relacionado ao operador BGK é que ele não respeita o teorema H . Isto não inviabiliza a utilização

deste operador, mas significa que para alguns casos o método pode não convergir para o equilíbrio local. Do ponto de vista numérico, isso significa que o modelo pode não ser estável para determinadas condições e, de fato, uma das limitações do modelo BGK no contexto do MBR é a sua estabilidade reduzida em comparação com outros modelos.

2.1.4 Comportamento macroscópico da equação de transporte de Boltzmann

Os momentos da função de distribuição fornecem grandezas macroscópicas importantes na descrição física da dinâmica dos fluidos, como, por exemplo, a densidade, a velocidade e a energia específica. A equação de transporte de Boltzmann, por sua vez, descreve a evolução da função f ao longo do tempo para um determinado sistema. Assim, ao tomar-se os momentos da equação de Boltzmann, serão obtidas equações em função das grandezas hidrodinâmicas (KRÜGER *et al.*, 2017).

A equação da continuidade em termos das propriedades médias do fluido pode ser obtida diretamente através da integração da equação de Boltzmann no espaço de velocidades:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f d^3v + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \int v_\alpha f d^3v + \frac{F_\alpha}{\rho} \int \frac{\partial f}{\partial v_\alpha} d^3v = \int \Omega(f) d^3v, \quad (2.10a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} = 0. \quad (2.10b)$$

De maneira similar, as equações de conservação de quantidade de movimento em cada direção podem ser obtidas através do momento de ordem 1 da equação de Boltzmann:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int v_\alpha f d^3v + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int v_\alpha v_\beta f d^3v + \frac{F_\beta}{\rho} \int v_\alpha \frac{\partial f}{\partial v_\beta} d^3v = \int v_\alpha \Omega(f) d^3v, \quad (2.11a)$$

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + F_\alpha. \quad (2.11b)$$

Esta equação depende do tensor de tensões desconhecido:

$$\sigma_{\alpha\beta} = - \int (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) f d^3v. \quad (2.12)$$

Por fim, multiplicando-se a equação de Boltzmann por $|\mathbf{v}|^2/2$ e realizando a integração no espaço de velocidades, obtém-se a equação de conservação de energia:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \frac{|\mathbf{v}|^2}{2} f d^3v + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int \frac{|\mathbf{v}|^2}{2} v_\beta f d^3v + \frac{F_\beta}{\rho} \int \frac{|\mathbf{v}|^2}{2} \frac{\partial f}{\partial v_\beta} d^3v = \int \frac{|\mathbf{v}|^2}{2} \Omega(f) d^3v, \quad (2.13a)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta e)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial(u_\alpha \sigma_{\alpha\beta})}{\partial x_\beta} + F_\beta u_\beta - \frac{\partial q_\beta}{\partial x_\beta}. \quad (2.13b)$$

Esta equação depende do vetor fluxo de calor dado por:

$$q_\beta = - \frac{1}{2} \int (v_\alpha - u_\alpha)(v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) f d^3v. \quad (2.14)$$

Nas equações de conservação de quantidade de movimento e energia, observa-se que o tensor de tensões e o vetor fluxo de calor dependem de momentos desconhecidos da função distribuição que não são dados pelas Equações (2.2), (2.3a) e (2.3b). Uma maneira de relacionar esses tensores com as grandezas macroscópicas é empregando-se a expansão de Chapman-Enskog. Os dois autores desenvolveram procedimentos similares de forma independente. O método desenvolvido por Enskog, assim como descrito em Chapman e Cowling (1952), é um método de aproximações sucessivas. A equação de Boltzmann pode ser expressa no formato $\mathcal{F}(f) = 0$ enquanto f é escrita como uma soma infinita:

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} + f^{(2)} + \dots, \quad (2.15)$$

sendo $f^{(0)}$ igual a f^{eq} . No método, divide-se a equação de Boltzmann num conjunto de equações em que a r -ésima equação opera apenas os r primeiros termos da expansão de f :

$$\mathcal{F}(f) = \mathcal{F}^{(0)}(f^{(0)}) + \mathcal{F}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) + \mathcal{F}^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) + \dots \quad (2.16)$$

Enskog criou uma maneira de dividir as equações de forma que cada uma satisfaça as condições apresentadas:

$$\mathcal{F}^{(0)}(f^{(0)}) = 0 \quad \mathcal{F}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) = 0 \quad \mathcal{F}^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) = 0 \quad \dots \quad (2.17)$$

Dessa forma, a soma de todas as funções assegura $\mathcal{F}(f) = 0$ enquanto que cada equação contém apenas uma variável desconhecida quando todas as equações precedentes forem resolvidas. Este método permite aproximar os momentos desconhecidos, Equações (2.12) e (2.14), em função das propriedades físicas conhecidas como densidade, velocidade e energia específica. Determinando a perturbação de primeira ordem $f^{(1)}$ de forma explícita e usando $f = f^{(0)} + f^{(1)}$ para aproximar o tensor de tensões e o vetor fluxo de calor, encontra-se o seguinte resultado para o operador BGK:

$$\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta} + \mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right) + \mu_b \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma}, \quad (2.18a)$$

$$q_\beta = -\kappa \partial_\beta T, \quad (2.18b)$$

$$p = \rho R_g T, \quad \mu = \rho R_g T \tau, \quad \mu_b = 0, \quad \kappa = \frac{5}{2} R_g p \tau. \quad (2.18c)$$

Observa-se que numa escala macroscópica a equação de Boltzmann descreve o comportamento de um fluido Newtoniano, ou seja, um fluido com tensor de tensões viscosas isotrópico e dependente das taxas de deformações lineares. Além disso, o fluido obedece à equação de estado para gás ideal $p = \rho R_g T$. Na Equação (2.18a), μ_b é denominada viscosidade volumétrica. Na mecânica dos fluidos é muito utilizada a hipótese de Stokes que fixa $\mu_b = 0$, resultado equivalente ao encontrado pela análise de Chapman-Enskog. Observa-se também que a viscosidade do fluido depende do tempo de relaxação τ .

2.2 O método de Boltzmann em rede

A seguir, são apresentados diversos desenvolvimentos referentes ao método de Boltzmann em rede. Parte-se da visão que o método deriva da discretização da equação de transporte de Boltzmann.

2.2.1 Discretização da equação de transporte de Boltzmann

O processo de discretização de uma equação diferencial envolve a substituição da função avaliada continuamente em relação as suas variáveis por uma função avaliada em um conjunto finito de pontos, chamado malha computacional. Também, deve-se substituir as operações de diferenciação e integração por operações algébricas que serão aproximações numéricas das primeiras. Dessa forma, obtém-se as equações discretas que poderão ser resolvidas computacionalmente. No campo da mecânica dos fluidos, geralmente, as funções que compõe as equações diferenciais (Eq. continuidade, Navier-Stokes, ...) dependem das variáveis tempo t e coordenadas espaciais \mathbf{x} . Porém, a função de distribuição depende, além das variáveis já mencionadas, da velocidade das partículas \mathbf{v} . Isto torna o processo de discretização da equação de transporte de Boltzmann, Equação (2.8), particularmente mais complexo. O procedimento de discretização no espaço de velocidades apresentado nesta seção é baseado no trabalho de Shan e He (1998).

No operador BGK, Equação (2.9), a função de distribuição de equilíbrio desempenha papel fundamental na recuperação das equações de conservação. Mais precisamente, isso ocorre devido aos momentos desta função, relacionados à densidade, à quantidade de movimento e à energia. Dado que o maior interesse é na recuperação dos momentos do que no valor da função em si, pode-se tentar construir uma versão simplificada desta função que possua os mesmos momentos e uma possibilidade é utilizar a expressão a seguir:

$$f^{eq}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = w(\mathbf{v}) \left(\rho + v_\alpha \rho u_\alpha + \frac{1}{2} (v_\alpha v_\beta - \delta_{\alpha\beta}) (\rho u_\alpha u_\beta + \rho (R_g T - 1) \delta_{\alpha\beta}) \right). \quad (2.19)$$

A função acima é uma expansão em polinômios de Hermite da função de equilíbrio original. Os polinômios de Hermite de ordem 0 ($H^{(0)}$), 1 ($H_\alpha^{(1)}$) e 2 ($H_{\alpha\beta}^{(2)}$) são dados por 1, v_α e $(v_\alpha v_\beta - \delta_{\alpha\beta})$ respectivamente. Uma propriedade importante destes polinômios é a ortogonalidade com relação a função peso $w(\mathbf{v}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-v^2/2}$. Para mais detalhes refira-se a Krüger *et al.* (2017). Esta propriedade garante a recuperação dos momentos, Equações (2.6a), (2.6b) e (2.6c), de maneira exata.

Para discretizar a equação de transporte de Boltzmann é necessário substituir as integrações dos cálculos dos momentos da função de equilíbrio por operações algébricas. Isto pode ser feito com o auxílio da quadratura de Gauss-Hermite. Para conferir detalhes desta quadratura, o leitor pode consultar Atkinson (1989). Neste texto não será mostrado o procedimento de aplicação da quadratura. Ao invés disso, será apenas apresentada a

forma discreta da Equação (2.19) que é dada por:

$$f_i^{eq}(t, \mathbf{x}) = w_i \left(\rho + \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} \rho u_\alpha + \frac{(c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \rho u_\alpha u_\beta \right). \quad (2.20)$$

A principal diferença entre as Equações (2.19) e (2.20) é que a primeira função é avaliada continuamente em relação a \mathbf{v} enquanto que na segunda tem-se um conjunto finito de funções f_i^{eq} , cada uma avaliada em relação a uma velocidade \mathbf{c}_i . Dessa forma, o índice i relaciona cada função a sua respectiva velocidade. Os parâmetros w_i são os pesos da quadratura necessários para realizar as integrações numéricas enquanto que c_s^2 é uma constante denominada de velocidade do som na rede. Este coeficiente é utilizado para normalizar as velocidades da quadratura \mathbf{c}_i para valores mais convenientes. O motivo de ser chamado de velocidade do som ficará claro mais adiante. Com isso, os momentos são calculados por operações algébricas:

$$\sum_i f_i^{eq} = \rho, \quad (2.21a)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} f_i^{eq} = \rho u_\alpha, \quad (2.21b)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{eq} = \rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.21c)$$

Note-se que o momento de ordem 2 é diferente do original, Equação (2.6c). No lugar do termo $R_g T$ agora tem-se a constante c_s^2 . Isto ocorre pois na definição da Equação (2.20) foi utilizada a hipótese de escoamento isotérmico. Muitos escoamentos ocorrem a baixas velocidades e se aproximam da condição ideal de escoamento incompressível, em que a equação de conservação de quantidade de movimento torna-se independente da equação de conservação de energia. Desta forma, a temperatura do fluido não é relevante do ponto de vista puramente hidrodinâmico e o MBR com a hipótese de escoamento isotérmico continua sendo útil para a simulação de diversos fenômenos. Isto será mostrado mais adiante, quando será analisado o comportamento macroscópico do MBR. Nos casos em que esta hipótese se mostrar limitadora, outras estratégias serão adotadas. A versão discreta da equação de transporte de Boltzmann no espaço de velocidades pode ser definida como:

$$\partial_t f_i + c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i = \Omega(f_i, f_i^{eq}). \quad (2.22)$$

Dessa forma, no MBR, emprega-se f_i , que são as funções de distribuições avaliadas nas velocidades \mathbf{c}_i . As grandezas macroscópicas podem ser obtidas a partir das f_i , por meio das seguintes operações:

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (2.23a)$$

$$\rho u_\alpha = \sum_i c_{i\alpha} f_i. \quad (2.23b)$$

No MBR, com a função de equilíbrio isotérmica apresentada, não é possível recuperar a energia interna do fluido a partir dos momentos da função distribuição. Note-se que a Equação (2.22) ainda é avaliada continuamente em relação às variáveis t e \mathbf{x} . Dellar (2001) discretizou a equação de Boltzmann nas coordenadas tempo e espaço, utilizando uma integração no tempo ao longo de uma linha característica e a regra do trapézio com acurácia de segunda ordem para aproximar a integral. Dessa maneira, em combinação com a metodologia para discretização no espaço de velocidades, obtém-se o esquema numérico conhecido como equação do método de Boltzmann em rede (EMBR):

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - f_i(t, \mathbf{x}) = \Omega(f_i, f_i^{eq}) \Delta t. \quad (2.24)$$

2.2.2 Conjuntos de velocidades

Como visto na seção anterior, pode-se discretizar a função de equilíbrio para um conjunto de velocidades de forma a recuperar os momentos mais importantes da função contínua (densidade, momento e energia) através de integrações numéricas. São estas configurações de velocidades que recebem a denominação de rede na literatura. Um ponto importante dentro do MBR é qual conjunto discreto de velocidades utilizar. Na Seção (2.1.4) mostrou-se que o momento de ordem 1 da equação de Boltzmann permite a obtenção das equações de Navier-Stokes. Em particular, procura-se conjuntos tais que a integração numérica nestes pontos permita a obtenção das equações de Navier-Stokes sem a introdução de erros significativos.

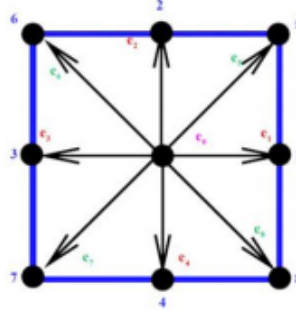
Segundo Krüger *et al.* (2017), as condições necessárias para que uma rede possa ser utilizada para resolução de problemas hidrodinâmicos são as velocidades, os pesos da quadratura e a velocidade do som isotérmica satisfazerem as seguintes equações:

$$\begin{aligned} \sum_i w_i &= 1, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} &= 0, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta}, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} &= 0, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}), \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} c_{i\nu} &= 0, \end{aligned} \quad (2.25)$$

sendo que os pesos w_i da quadratura devem ser valores positivos. De acordo com Krüger *et al.* (2017, p. 86) é conveniente que as componentes $c_{i\alpha}$ possuam como magnitude múltiplos de $\Delta x / \Delta t$, sendo Δx e Δt os espaçamentos espacial e temporal da malha adotada. Isto garante que $f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$ na Equação (2.24) represente o valor da função distribuição num determinado nó do domínio computacional.

Koelman (1991) apresentou um conjunto de 9 velocidades que permite a resolução satisfatória de problemas hidrodinâmicos em duas dimensões. Esse conjunto extensivamente utilizado na literatura é apresentado na Figura 1. Este sistema é conhecido como D2Q9,

Figura 1 – Conjunto de nove velocidades para simulações hidrodinâmicas em duas dimensões. Oito velocidades possuem as mesmas direções dos vetores que conectam o nó central aos nós adjacentes. Adicionalmente, há a velocidade nula.



Fonte: Elaborado por Bettaibi, Kuznik e Sediki (2016)

pois são nove velocidades utilizadas em 2 dimensões, sendo oito velocidades nas direções das flechas apresentadas na Figura 1 e também a velocidade nula. Na configuração adotada, a função de distribuição é dividida em 9 componentes sendo que cada índice i associa uma função a uma velocidade discreta. As velocidades discretas para este caso são dadas por:

$$\begin{aligned} c_0 &= (0, 0), \\ c_{1,3}, c_{2,4} &= \left(\pm \frac{\Delta x}{\Delta t}, 0 \right), \left(0, \pm \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), \\ c_{5,6,7,8} &= \left(\pm \frac{\Delta x}{\Delta t}, \pm \frac{\Delta x}{\Delta t} \right). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Para estes valores de velocidades, as Equações (2.25) fornecem os seguintes pesos e velocidade do som para a rede D2Q9:

$$w_0 = \frac{4}{9}, \quad w_{1,2,3,4} = \frac{1}{9}, \quad w_{5,6,7,8} = \frac{1}{36}, \quad c_s^2 = \frac{1}{3} \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2}. \quad (2.27)$$

2.2.3 Esquema de força

Na equação de transporte de Boltzmann, Equação (2.8), o efeito do campo de forças aparece no último termo do lado esquerdo. De maneira similar ao realizado com a função de equilíbrio, este termo pode ser substituído por uma expansão de Hermite discreta. Esta expansão pode ser escrita de maneira genérica:

$$T_i = w_i \left(M^{(0)} + \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} M_\alpha^{(1)} + \frac{(c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} M_{\alpha\beta}^{(2)} \right). \quad (2.28)$$

Os momentos discretos desta expressão são calculados de maneira a serem exatamente iguais aos momentos contínuos do respectivo termo da Equação (2.28):

$$M^{(0)} = \frac{F_\beta}{\rho} \int \frac{\partial f}{\partial v_\beta} d^D v = 0, \quad (2.29a)$$

$$M_\alpha^{(1)} = \frac{F_\beta}{\rho} \int v_\alpha \frac{\partial f}{\partial v_\beta} d^D v = -F_\alpha, \quad (2.29b)$$

$$M_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{F_\gamma}{\rho} \int (v_\alpha v_\beta - \delta_{\alpha\beta}) \frac{\partial f}{\partial v_\gamma} d^D v = -(F_\alpha u_\beta + F_\beta u_\alpha). \quad (2.29c)$$

Os detalhes das operações acima foram omitidos mas, para se chegar a estes resultados basta utilizar integração por partes e o fato de que a função de distribuição é nula nas bordas, ou seja, para $v_\alpha \rightarrow \infty$ tem-se $f \rightarrow 0$. Escrevendo $F'_i = -T_i$ obtém-se o seguinte termo de força:

$$F'_i = w_i \left(\frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} F_\alpha + \frac{(c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} (F_\alpha u_\beta + F_\beta u_\alpha) \right). \quad (2.30)$$

Assim, a equação de transporte de Boltzmann discreta no espaço de velocidades com efeito de um campo de força externo é escrita como:

$$\partial_t f_i + c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i = \Omega(f_i, f_i^{eq}) + F'_i. \quad (2.31)$$

Esta equação pode ser discretizada em relação ao tempo e às coordenadas espaciais de maneira similar à descrita na Seção (2.2.1). É realizada uma integração em relação a uma linha característica. Os termos do lado esquerdo são integrados diretamente enquanto, para os do lado direito, é realizada uma aproximação numérica pela regra do trapézio. O método obtido é uma aproximação de segunda ordem da equação contínua porém, o esquema numérico não é mais explícito. Para resolver este problema e obter novamente um método explícito, é realizada uma mudança de variáveis, obtendo-se o esquema numérico final:

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - f_i(t, \mathbf{x}) = \Omega(f_i, f_i^{eq}) \Delta t + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau} \right) F'_i \Delta t. \quad (2.32)$$

A mudança de variáveis faz com que as propriedades hidrodinâmicas dependam da força de campo. Os novos momentos são dados por:

$$\rho = \sum_i f_i, \quad (2.33a)$$

$$\rho u_\alpha = \sum_i c_{i\alpha} f_i + \frac{\Delta t}{2} F_\alpha. \quad (2.33b)$$

Ao todo, o procedimento numérico necessário para incluir os efeitos de uma força externa na EMBR é chamado de esquema de força. O procedimento apresentado nesta seção deve-se ao trabalho de Guo, Zheng e Shi (2002). Por simplificação, este será apenas chamado de esquema de Guo *et al.* ao longo do texto.

2.2.4 Operador de colisão de múltiplos tempos de relaxação

A rede D2Q9 é composta de um conjunto de nove velocidades \mathbf{c}_i , sendo que para cada uma têm-se as funções de distribuição f_i e f_i^{eq} associadas. Assim, pode-se construir nove combinações linearmente independentes com cada uma dessas funções. Os momentos discretos, Equações (2.21a), (2.21b) e (2.21c), nada mais são que combinações lineares das funções de distribuição. Dessa forma, a rede D2Q9 permite o cálculo de nove momentos linearmente independentes dados pelos polinômios de Hermite discretos:

$$M^{(0)} = \sum_i f_i, \quad (2.34a)$$

$$M_\alpha^{(1)} = \sum_i c_{i\alpha} f_i, \quad (2.34b)$$

$$M_{\alpha\beta}^{(2)} = \sum_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) f_i, \quad (2.34c)$$

$$M_x^{(3)} = \sum_i (c_{ix} c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}) f_i, \quad (2.34d)$$

$$M_y^{(3)} = \sum_i (c_{iy} c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}) f_i, \quad (2.34e)$$

$$M^{(4)} = \sum_i (c_{ix}^2 c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}^2 + c_s^4) f_i. \quad (2.34f)$$

O operador de colisão de BGK, Equação (2.9), pode ser reescrito em função das expansões de Hermite discretas de f_i e f_i^{eq} :

$$\begin{aligned} \Omega(f_i, f_i^{eq}) = -w_i & \left[\frac{M^{(0)} - M^{eq(0)}}{\tau} + \frac{c_{i\alpha} M_\alpha^{(1)} - M_\alpha^{eq(1)}}{c_s^2 \tau} + \frac{c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)} - M_{\alpha\beta}^{eq(2)}}{\tau} \right. \\ & + \frac{c_{ix} c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}}{2c_s^6} \frac{M_x^{(3)} - M_x^{eq(3)}}{\tau} + \frac{c_{iy} c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}}{2c_s^6} \frac{M_y^{(3)} - M_y^{eq(3)}}{\tau} \\ & \left. + \frac{c_{ix}^2 c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}^2 + c_s^4}{4c_s^8} \frac{M^{(4)} - M^{eq(4)}}{\tau} \right], \end{aligned} \quad (2.35)$$

sendo os tensores \mathbf{M}^{eq} os análogos dos momentos de f_i , porém calculados em relação à função de equilíbrio. Escrever o operador BGK na forma de uma expansão fornece uma nova visão para o termo de colisão. Este operador pode ser construído como uma expansão de Hermite em que cada coeficiente da expansão é composto de momentos da função de distribuição relaxados com base em um parâmetro τ . A partir da generalização deste procedimento surge o operador de múltiplos tempos de relaxação (MRT de *multiple relaxation time*). Para evitar expressões longas como a Equação (2.35), o formalismo do operador MRT será apresentado em notação matricial. Sendo \mathbf{f} o vetor que contém as nove componentes discretas da função de distribuição, \mathbf{f}^{eq} o correspondente para a função de equilíbrio, \mathbf{M} a matriz que converte as funções de distribuição em nove momentos

linearmente independentes e \mathbf{S} a matriz que contém os tempos de relaxação, o operador MRT é dado pela expressão:

$$\Omega(\mathbf{f}, \mathbf{f}^{eq}) = -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{M}(\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}). \quad (2.36)$$

A matriz \mathbf{M} não precisa necessariamente ser construída com base nos polinômios de Hermite. O mais comum na literatura é o uso do procedimento de Gram-Schmidt para se obter um conjunto de vetores ortogonais. Os coeficientes da matriz \mathbf{M} neste caso podem ser encontrados em Krüger *et al.* (2017, p. 421). Para o caso em que há a presença de um campo de forças externas, a EMBR-MRT é escrita no seguinte formato:

$$\begin{aligned} f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i\Delta t) - f_i = & -(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{M})_{ij}(f_j - f_j^{eq})\Delta t \\ & + \left(\mathbf{M}^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{\mathbf{\Lambda}\Delta t}{2} \right) \mathbf{M} \right)_{ij} F'_j \Delta t. \end{aligned} \quad (2.37)$$

2.2.5 Análise do MBR com operador BGK

Na Seção (2.1.4) discutiu-se como os momentos fazem uma ponte entre a equação de Boltzmann e as equações de conservação. A diferença entre o MBR para a equação de Boltzmann é que o primeiro consiste em um método numérico e, para obter as equações macroscópicas resultantes, deve-se realizar uma expansão em série de Taylor dos seus termos. Também, os momentos são calculados por operações algébricas, alterando assim a maneira de se obter as equações de conservação. Expandindo-se a Equação (2.24) em série de Taylor desprezando-se os termos de ordem $O(\Delta t^2)$ e realizando-se algumas manipulações, chega-se ao seguinte resultado:

$$(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)f_i = \Omega(f_i, f_i^{eq}) + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) F_i - \frac{\Delta t}{2}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha) \left(\Omega(f_i, f_i^{eq}) + \left(1 - \frac{\Delta t}{2\tau}\right) F_i \right). \quad (2.38)$$

Esta equação se diferencia da Equação (2.31) pela presença do último termo do lado direito. Calculando-se o momento numérico de ordem zero da equação acima, obtém-se:

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma(\rho u_\gamma) = 0, \quad (2.39)$$

o que resulta na equação de conservação da massa, Equação (2.39). Com o momento de ordem 1, encontra-se a equação de conservação de quantidade de movimento. De maneira similar à Equação (2.11b), o tensor de tensões dependerá de um momento desconhecido de f_i . Para relacionar este momento com as grandezas hidrodinâmicas conhecidas, utiliza-se a análise de Chapman-Enskog com uma aproximação $f_i \approx f_i^{(0)} + f_i^{(1)}$. Os desenvolvimentos serão omitidos e apenas o resultado final é apresentado neste texto. Porém, para mais detalhes o leitor deve consultar Krüger *et al.* (2017).

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\beta p \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta[\mu(\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)] + F_\beta, \quad (2.40a)$$

$$p = \rho c_s^2, \quad (2.40b)$$

$$\mu = \rho c_s^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right), \quad (2.40c)$$

$$\mu_b = \frac{2}{3} \mu. \quad (2.40d)$$

Desta forma, é possível relacionar a propriedade macroscópica viscosidade com o tempo de relaxação, assim como na forma contínua da equação de transporte de Boltzmann. A diferença entre as viscosidades das Equações (2.18c) e (2.40c) se dá por conta dos erros de discretização. Porém, este fato não resulta em nenhuma limitação para o método pois deve-se apenas corrigir o parâmetro τ de maneira a ajustar a viscosidade desejada. Outra diferença da Equação (2.40a) com a obtida pela teoria cinética, Equação (2.11b), é a diferença nas viscosidades volumétricas. Segundo Dellar (2001), isto se deve ao fato de se ter utilizado a hipótese de escoamento isotérmico. A partir da Equação (2.40b) pode-se calcular a velocidade do som isotérmica:

$$\text{velocidade do som} = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T=cte}} = c_s, \quad (2.41)$$

justificando assim a denominação atribuída ao parâmetro c_s .

Agora, será feita uma discussão sobre o que representa o MBR e de que forma ele pode ser utilizado como um método de simulação de fluidos. Considere a intenção de modelar o comportamento físico de um gás ideal isotérmico. Pode-se a partir da mecânica do contínuo utilizar as equações de Navier-Stokes e a equação de estado de um gás ideal $p = \rho c_s^2$. Uma outra rota, seria utilizar a equação de transporte de Boltzmann que modela o fluido como um conjunto de partículas. A partir da análise descrita nesta seção, conclui-se que esta segunda abordagem é similar a primeira. Desta forma, o MBR pode ser utilizado como um *solver* de Navier-Stokes para gases ideais.

A hipótese de gás isotérmico é muito limitadora pois, ao ser comprimido, um gás pode mudar de temperatura. Além disso, muitos fluidos não se comportam como gases ideais. A água, por exemplo, é bem modelada como um fluido incompressível. Entretanto, para escoamentos com velocidades muito inferiores a do som, o fluido mesmo sendo um gás ideal se aproxima do limite de incompressibilidade (WHITE, 2018, p. 163).

Outras condições são necessárias para que se respeite o limite de incompressibilidade, por exemplo, a densidade do ar na atmosfera pode variar com a altitude devido ao efeito da força gravitacional. Porém, respeitados certos limites, um escoamento incompressível pode ser simulado mesmo utilizando as equações que modelam um gás ideal. Por isso, o MBR pode ser utilizado como um *solver* das equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis como, por exemplo, a água em estado líquido. Isto não significa que se esteja modelando as partículas que compõem a água. Apenas significa que, sob certas condições, a equação de Boltzmann, originalmente desenvolvida para modelar o comportamento das

partículas que compõem um gás ideal, pode fornecer uma solução que aproxima bem o escoamento de água.

Como visto, a EMBR com o termo de colisão de BGK em conjunto com a função de equilíbrio discreta pode ser usada para simular escoamentos incompressíveis, ao se escolher números de Mach muito pequenos $Ma \ll 1$. Latt (2007) realizou uma análise dos erros da EMBR para a resolução da equação incompressível de Navier-Stokes. O autor dividiu os erros do esquema numérico em três categorias. Os erros devido à discretização no tempo, devido à discretização no espaço e os erros devido à compressibilidade do método. Concluiu-se que os erros devido à compressibilidade escalam como $E_{Ma} = O(\Delta t^2 / \Delta x^2)$. Dessa forma, o erro total possui o seguinte formato:

$$E = E_{\Delta x} + E_{\Delta t} + E_{Ma} = O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2) + O(\Delta t^2 / \Delta x^2). \quad (2.42)$$

Latt (2007) também afirma que o parâmetro de relaxação τ é proporcional a $\Delta x^2 / \Delta t$. Dessa maneira, mantendo-se τ constante em uma simulação, garante-se que Δt varie em uma taxa proporcional a Δx^2 . Segundo o autor, esta é uma estratégia adequada pois garante que os erros devido à discretização decaiam a uma taxa de segunda ordem quando a resolução da malha é aumentada.

A análise realizada nesta seção partiu de uma expansão de Taylor da EMBR em que os termos de ordem $O(\Delta t^2)$ foram desprezados. Posteriormente, utilizou-se de uma aproximação $f_i \approx f_i^{(0)} + f_i^{(1)}$, com $f_i^{(1)}$ dado por Chapman-Enskog, para se obter as equações macroscópicas. Este procedimento é comumente chamado na literatura de análise de segunda ordem. Quando o MBR é combinado com algum modelo de interface difusa para simular sistemas multifásicos, erros de ordem superior costumam ser relevantes. Em especial, deve-se atentar aos erros espaciais produzidos pelo esquema de força. Estes erros são obtidos através de uma análise de terceira ordem, em que apenas os erros de ordem $O(\Delta t^3)$ são desprezados na expansão de Taylor e os momentos das equações macroscópicas são calculados com $f_i \approx f_i^{(0)} + f_i^{(1)} + f_i^{(2)}$. O erro espacial de terceira ordem do esquema de força de Guo *et al.* é dado pela expressão (LYCETT-BROWN; LUO, 2015):

$$E_{\alpha}^{3rd} = \frac{c_s^2 \Delta t^2}{12} \partial_{\beta} [(\partial_{\gamma} F_{\gamma}) \delta_{\alpha\beta} + \partial_{\alpha} F_{\beta} + \partial_{\beta} F_{\alpha}]. \quad (2.43)$$

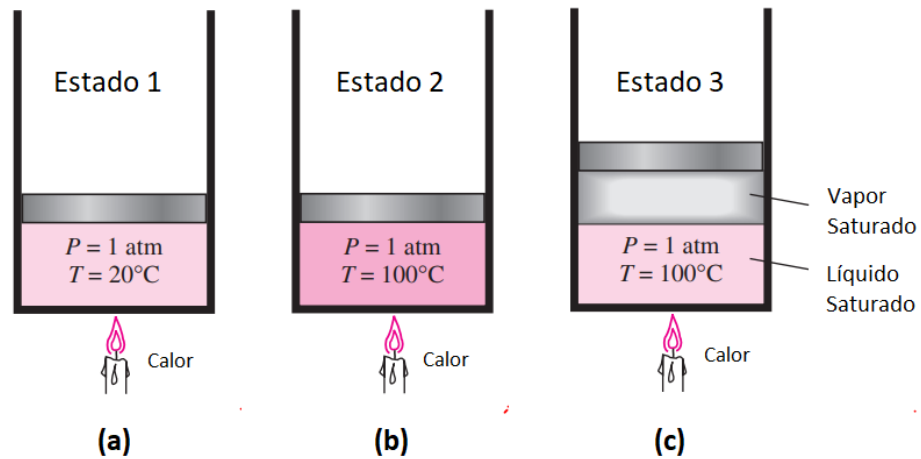
Este termo deve ser adicionado no lado direito da Equação (2.40a).

2.3 O Método do Pseudopotencial

2.3.1 Definições Termodinâmicas

Nesta subseção serão descritos alguns conceitos relacionados a processos de mudança de fase. Mais especificamente, serão abordadas as definições de líquido comprimido, líquido saturado, vapor saturado, vapor superaquecido, temperatura e pressão de saturação. Basicamente será resumida aqui a descrição realizada por Çengel e Boles (2006, p. 114).

Figura 2 – Ilustração de um recipiente contendo água em diferentes estados termodinâmicos: (a) líquido comprimido; (b) líquido saturado; (c) mistura de líquido e vapor saturado.



Fonte: Elaborado por Çengel e Boles (2006, p. 114).

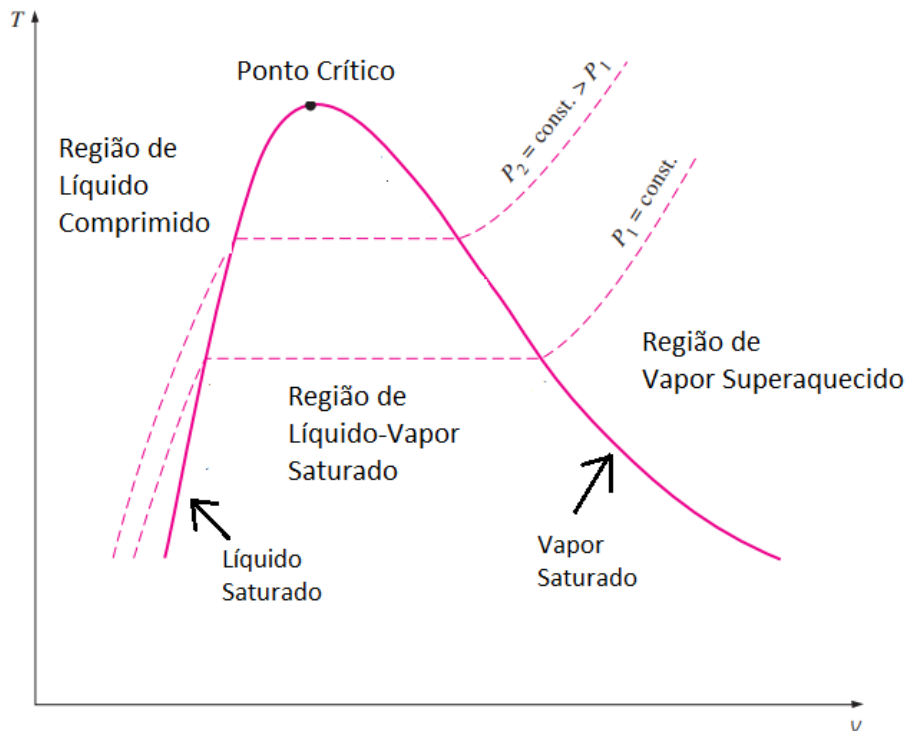
Na Figura 2 apresentou-se um recipiente contendo água no seu interior. A água está confinada por meio de um pistão que se move livremente e o recipiente está aberto para a atmosfera. Como a massa do pistão é desprezível e ele pode se movimentar livremente, a pressão em todos os sistemas é a mesma, igual a 1 atm. Na Figura 2.(a) a temperatura da água é 20°C. Neste estado, a água encontra-se na sua fase líquida e mais calor pode ser fornecido ao sistema sem que ocorra a formação de vapor. Neste caso, a água está no estado de líquido comprimido. Na Figura 2.(b) a água está a 100°C e qualquer energia fornecida ao sistema fará com que ocorra a formação de vapor. Neste caso, a água encontra-se no estado de líquido saturado.

A partir deste momento, com o fornecimento de energia ao sistema, observa-se que a temperatura continua a 100°C, porém ocorre a formação de vapor. Neste caso, líquido e vapor saturado estão em equilíbrio, caso representado na Figura 2.c. Após todo o líquido ser convertido em vapor, a sua temperatura volta a subir com o fornecimento de energia, para esta mesma pressão e a uma temperatura acima de 100°C, este vapor é denominado de vapor superaquecido.

Observa-se que a água a 1 atm entra em ebulição a 100°C. Esta é a temperatura de saturação T_{sat} da água a esta pressão. Da mesma forma, para cada temperatura, há uma pressão de saturação p_{sat} . Quando o fluido atinge a condição de saturação (T_{sat} e p_{sat}), líquido e vapor podem coexistir em equilíbrio. Neste caso, atribui-se as denominações líquido saturado ρ_l^{sat} e vapor saturado ρ_v^{sat} para cada uma das fases. A relação entre essas diferentes propriedades pode ser mostrada num diagrama, como ilustrado na Figura 3.

A uma temperatura suficientemente alta (acima do ponto crítico) a transição

Figura 3 – Ilustração de um diagrama $T - v$ para uma substância pura com linhas de transição entre as fases líquido e vapor.



Fonte: Elaborado por Çengel e Boles (2006, p. 120).

líquido-vapor deixa de ocorrer e o fluido é denominado de supercrítico. A descrição aqui apresentada, trata-se de uma simplificação do fenômeno de ebulição. Na realidade, é possível que um líquido a pressão de saturação p_{sat} atinja temperaturas acima de T_{sat} configurando um líquido metaestável. Da mesma forma, o vapor pode atingir temperatura abaixo de T_{sat} , sendo denominado neste caso de vapor metaestável. Geralmente, para que estas condições sejam alcançadas, é necessário que se evite perturbações hidrodinâmicas e térmicas no fluido, que induziriam a uma mudança abrupta de fase. Dado o conhecimento da equação de estado que modela um determinado fluido, as densidades de saturação para cada temperatura podem ser calculadas através da regra de áreas iguais Maxwell (BEJAN, 2016, p. 233), cuja equação será mostrada mais adiante. Esta será chamada apenas de regra de Maxwell ao longo do texto.

2.3.2 Modelos de interface difusa

Na teoria clássica de modelos bifásicos, a interface é definida como sendo uma superfície (de espessura infinitesimalmente pequena) que divide duas fases, à qual é atribuída uma tensão superficial. Neste caso, algumas propriedades do fluido como densidade e pressão apresentam uma descontinuidade ao se atravessar de uma fase para a outra. Uma outra abordagem consiste em considerar que a interface possui uma determinada

espessura finita (ainda pequena) e as propriedades do fluido variam continuamente entre as diferentes fases. Esta é conhecida como abordagem de interface difusa. Um conjunto de equações de conservação macroscópicas bastantes utilizadas na modelagem por meio de interface difusa são baseadas na teoria de capilaridade de gases ideais. Uma linha do tempo do desenvolvimento desta teoria foi apresentada por Gorban e Karlin (2017). Uma exposição sobre as equações básicas desta teoria e alguns resultados decorrentes destas equações foi realizada por Anderson e McFadden (1996).

Como esta teoria é bastante complexa, neste trabalho limitou-se à apresentação das equações de massa e quantidade de movimento para um caso isotérmico. Estas equações são dadas a seguir (ANDERSON; MCFADDEN, 1996):

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho u_\gamma) = 0, \quad (2.44a)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha p + \partial_\beta \sigma_{\alpha\beta}^C - \rho g_\alpha + \mu \left(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{3} \partial_\gamma u_\gamma \delta_{\alpha\beta} \right), \quad (2.44b)$$

$$\sigma_{\alpha\beta}^C = \left(\frac{k}{2} (\partial_\gamma \rho) (\partial_\gamma \rho) + k \rho \partial_\gamma \partial_\gamma \rho \right) \delta_{\alpha\beta} - k (\partial_\alpha \rho) (\partial_\beta \rho). \quad (2.44c)$$

Da Equação (2.44c) decorre que $\partial_\beta \sigma_{\alpha\beta}^C = k \rho \partial_\alpha (\partial_\gamma \partial_\gamma \rho)$, sendo k uma constante e $\sigma_{\alpha\beta}^C$ um tensor de capilaridade proposto por Korteweg (1901).

Estas equações são as mesmas utilizadas no método da energia livre (SWIFT; OSBORN; YEOMANS, 1995). Neste método, a pressão termodinâmica é dada por uma equação de estado $p = p_{EOS}$ e os termos $\partial_\alpha p_{EOS}$ e $\partial_\beta \sigma_{\alpha\beta}^C$ são unidos para compor um único tensor de pressão:

$$\partial_\beta p_{\alpha\beta} = \partial_\beta p_{EOS} \delta_{\alpha\beta} - \partial_\beta \sigma_{\alpha\beta}^C, \quad (2.45)$$

e assim o tensor de pressão total se torna:

$$p_{\alpha\beta} = \left(p_{EOS} - \frac{k}{2} (\partial_\gamma \rho) (\partial_\gamma \rho) - k \rho \partial_\gamma \partial_\gamma \rho \right) \delta_{\alpha\beta} + k (\partial_\alpha \rho) (\partial_\beta \rho). \quad (2.46)$$

A utilização deste conjunto de equações permite a modelagem de um sistema bifásico de um componente, em que as propriedades do fluido variam continuamente entre uma fase e outra. Porém, durante a modelagem de um sistema deste tipo, deseja-se ser capaz de controlar as densidades das fases e a tensão superficial. A seguir, será mostrado quais densidades de fase resultam da aplicação deste modelo. Será utilizado o procedimento descrito por Krüger *et al.* (2017, p.673).

Considere um sistema em que há duas fases separadas por uma interface plana. A direção x será definida como sendo perpendicular à interface, enquanto y e z são paralelas à interface. As variações das propriedades ocorrem apenas ao longo de x em que há a transição de uma fase para outra, enquanto todas as derivadas com relação às coordenadas y e z são nulas. Desprezando-se a influência da força gravitacional e considerando que no

equilíbrio o fluido está em repouso, a equação de conservação de quantidade de movimento na direção x se torna:

$$0 = -\partial_\beta p_{x\beta} = -\partial_x p_{xx} - \partial_y p_{xy} - \partial_z p_{xz} = -\partial_x p_{xx}. \quad (2.47)$$

Ou seja, a componente do tensor de pressão p_{xx} deve ser constante ao longo do eixo x . Por simplificação, define-se $p_{xx} = p_b$, sendo p_b chamada de pressão do *bulk*. Utilizando a Equação (2.46), pode-se escrever:

$$p_b = p_{EOS} + \frac{k}{2}(d_x \rho)(d_x \rho) - k\rho d_x^2 \rho. \quad (2.48)$$

As derivadas parciais foram substituídas por derivadas totais porque ρ é apenas uma função de x neste problema.

A seguir será utilizada a hipótese de que ρ é uma função estritamente crescente (ou decrescente) com relação a x . Isto implica que a função é também bijetora, ou seja, para cada valor de x há apenas um único valor de ρ e vice-versa, o que garante que a função pode ser invertida. Outra implicação é que qualquer função z que dependa de x , $z = \mathcal{F}_1(x)$, pode ser também escrita como uma função da densidade $z = \mathcal{F}_2(\rho)$. Definiu-se então a função $z = (d_x \rho)^2$. Esta é uma função da variável x mas, pelas hipóteses acima, também pode ser expressa em função de ρ . Assim, pode-se escrever:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{d\rho} \frac{d\rho}{dx} = 2 \frac{d\rho}{dx} \frac{d^2 \rho}{dx^2} \quad \rightarrow \quad \frac{dz}{d\rho} = 2 \frac{d^2 \rho}{dx^2}. \quad (2.49)$$

Inserindo este resultado na Equação (2.48), obtém-se:

$$\frac{2(p_{EOS} - p_b)}{k\rho} = \frac{dz}{d\rho} - \frac{z}{\rho}. \quad (2.50)$$

Multiplicando-se os dois lados da equação por $1/\rho$:

$$\frac{1}{\rho} \frac{dz}{d\rho} - \frac{z}{\rho^2} = \frac{d(z/\rho)}{d\rho} = \frac{2(p_{EOS} - p_b)}{k\rho^2}. \quad (2.51)$$

Integrando-se a expressão acima, obtém-se:

$$z(\rho) = \rho \left(\int \frac{2(p_{EOS} - p_b)}{k\rho^2} d\rho + C \right), \quad (2.52)$$

sendo C uma constante de integração. A função $z = (d_x \rho)^2$ é igual a zero nas bordas, porque em cada fase a densidade é constante e igual à densidade do vapor ρ_v ou do líquido ρ_l . Os gradientes ocorrem apenas na interface. Aplicando-se estas condições de contorno, obtém-se a seguinte relação:

$$\int_{\rho_v}^{\rho_l} (p_{EOS} - p_b) \frac{d\rho}{\rho^2} = 0. \quad (2.53)$$

Esta relação é equivalente a regra de Maxwell. Isto significa, que as densidades de fase no caso de interface plana são consistentes termodinamicamente.

A tensão superficial em modelos de interface difusa é definida pela seguinte expressão (ROWLINSON; WIDOM, 1982), no caso de interfaces planas:

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} (p_{xx} - p_{yy}) dn, \quad (2.54)$$

em que x é uma coordenada normal a interface e y tangencial. Aplicando esta operação para o tensor de pressões da Equação (2.46) chegasse no seguinte resultado:

$$\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{d^2 \rho}{dx^2} dx. \quad (2.55)$$

Como pode-se observar o parâmetro k pode ser utilizado para se controlar o valor da tensão superficial neste modelo.

2.3.3 O tensor de pressões do método do pseudopotencial

O método de Boltzmann em rede do pseudopotencial (MBR-P) tem origem quando Shan e Chen (1993) propuseram uma força de interação que permitia a simulação de sistemas bifásicos de um componente. Ao analisar o tensor de pressão resultante do método, observou-se que este era diferente daquele dado pela Equação (2.46). Estas diferenças implicam em uma inconsistência física do método; porém, devido a sua simplicidade e grande facilidade de implementação, este tornou-se em um dos procedimentos mais utilizados da literatura. De maneira geral, no MBR-P o tensor de pressão assume o seguinte formato:

$$\begin{aligned} p_{\alpha\beta} = & (c_s^2 \rho + G\psi^2 + C_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + C_2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi) \delta_{\alpha\beta} \\ & + C_3 G(\partial_\alpha \psi)(\partial_\beta \psi) + C_4 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Os coeficientes $C_{1,2,3,4}$ são arbitrários. No trabalho original, Shan e Chen (1993) estavam modelando as interações não locais entre partículas que compõem um fluido, com o intuito de simular sistemas multicomponentes e fluidos com equações de estado não-ideais. Os autores denominaram a função ψ de densidade efetiva e definiram um potencial de interação que dependia de ψ e G . O parâmetro G era usado para controlar a magnitude deste potencial de interação. Posteriormente, com modificações no método realizadas por outros autores, ψ e G perderam o sentido físico original. Atualmente na literatura, ψ é denominada densidade efetiva (KRÜGER *et al.*, 2017, p. 369), enquanto alguns autores chamam de potencial de interação (LI *et al.*, 2012) e outros também denominam de pseudopotencial (SBRAGAGLIA *et al.*, 2007). De maneira geral, esta será uma função dependente da densidade e da temperatura do fluido $\psi = \psi(\rho, T)$. Além disso, G se tornou apenas um parâmetro auxiliar cujo papel ficará claro mais adiante.

Para um sistema isotérmico com perfil de densidades uniforme (ausência de gradientes), o tensor é reduzido em $p_{\alpha\beta} = (c_s^2 \rho + G\psi^2) \delta_{\alpha\beta}$. Para este caso, o termo $c_s^2 \rho + G\psi^2$ terá o papel da equação de estado do sistema, o que motiva a seguinte definição para a

densidade efetiva (YUAN; SCHAEFER, 2006):

$$\psi = \sqrt{\frac{p_{EOS} - c_s^2 \rho}{G}}. \quad (2.57)$$

O termo p_{EOS} representa uma equação de estado qualquer, a qual deseja-se introduzir no sistema. O papel de G que é manter o termo dentro da raiz positivo quando $c_s^2 \rho > p_{EOS}$. Como geralmente os parâmetros da equação de estado são adotados de forma que $c_s^2 \rho > p_{EOS}$, na literatura simplesmente adota-se $G = -1$.

Como é o termo $-\partial_\beta p_{\alpha\beta}$ que aparece na equação de conservação de quantidade de movimento e não a pressão diretamente, tensores com diferentes formatos podem resultar no mesmo comportamento hidrodinâmico (SBRAGAGLIA *et al.*, 2007). A pressão também influencia a conservação de energia, o que dificulta mais a análise. Porém na literatura referente ao MBR-P, os autores levam apenas em consideração o efeito da equação de estado na conservação de energia. Desta forma, os outros termos do tensor de pressão são desprezados. Assim, ao longo deste texto, será dito que tensores de pressão que resultam no mesmo divergente ($\partial_\beta p_{\alpha\beta}$) são equivalentes. A seguinte identidade tensorial é apresentada:

$$\partial_\beta [\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi - (\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi) \delta_{\alpha\beta}] = \partial_\beta [(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) \delta_{\alpha\beta} - (\partial_\alpha \psi)(\partial_\beta \psi)]. \quad (2.58)$$

Aplicando esta equação no tensor, Equação (2.56), obtém-se as seguintes formas equivalentes:

$$p_{\alpha\beta} = (c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + A_2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi, \quad (2.59a)$$

$$p_{\alpha\beta} = (c_s^2 \rho + G\psi^2 + B_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + B_2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi) \delta_{\alpha\beta} + B_3 G(\partial_\alpha \psi)(\partial_\beta \psi), \quad (2.59b)$$

em que valem as relações $A_1 = C_1 + C_3 = B_1 + B_3$, $A_2 = C_2 + C_3 = B_2 + B_3$ e $A_3 = C_4 - C_3 = -B_3$. Como $C_{1,2,3,4}$ são arbitrários, então $A_{1,2,3}$ e $B_{1,2,3}$ também são. Portanto, não será mais feita menção aos coeficientes $C_{1,2,3,4}$ e as formas compactas, Equações (2.59a) e (2.59b), serão utilizadas no decorrer do texto.

Da mesma forma em que analisou-se as densidades das fases resultantes do tensor de Korteweg (1901), agora serão analisadas as densidades de equilíbrio referente ao tensor da Equação (2.59a). Considera-se duas fases separadas por uma interface plana, em que x é a coordenada na direção normal à interface. Também y e z são as coordenadas em direções tangenciais à interface. Como na análise anterior, considera-se todos os gradientes nas direções tangenciais à interface como sendo nulos. Assim, pode-se escrever:

$$p_{xx} = c_s^2 \rho + G\psi^2 + G \left[A_1 \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + (A_2 + A_3) \psi \frac{d^2\psi}{dx^2} \right], \quad (2.60a)$$

$$p_{yy} = p_{zz} = c_s^2 \rho + G\psi^2 + G \left[A_1 \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + A_2 \psi \frac{d^2\psi}{dx^2} \right], \quad (2.60b)$$

$$p_{xy} = p_{yx} = p_{xz} = p_{yz} = 0. \quad (2.60c)$$

Para o equilíbrio estático, a Equação (2.47) continua válida. Desta forma, p_{xx} é constante ao longo de x e pode-se definir $p_{xx} = p_b$. Usando a hipótese de que ψ é uma função estritamente crescente (ou decrescente) com relação a x , $d_x\psi(x) > 0$ para todo x (ou $d_x\psi(x) < 0$), pode-se definir $z(\psi) = (d_x\psi)^2$. Vale a seguinte relação:

$$\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{d\psi} \frac{d\psi}{dx} = 2 \frac{d\psi}{dx} \frac{d^2\psi}{dx^2} \quad \rightarrow \quad \frac{dz}{d\psi} = 2 \frac{d^2\psi}{dx^2}. \quad (2.61)$$

Substituindo estes resultados na Equação (2.60a), obtém-se:

$$\frac{2(p_b - p_{EOS})}{(A_2 + A_3)G\psi} = \frac{dz}{d\psi} - \epsilon \frac{z}{\psi}, \quad (2.62)$$

sendo $\epsilon = -2A_1/(A_2 + A_3)$ e $c_s^2\rho + G\psi^2 = p_{EOS}$. Multiplicando-se os dois lados da equação por $1/\psi^\epsilon$:

$$\frac{1}{\psi^\epsilon} \frac{dz}{d\psi} - \epsilon \frac{z}{\psi^{1+\epsilon}} = \frac{d(z/\psi^\epsilon)}{d\psi} = \frac{2(p_b - p_{EOS})}{(A_2 + A_3)G\psi^{1+\epsilon}}. \quad (2.63)$$

Integrando-se a expressão acima, obtém-se:

$$z(\psi) = \psi^\epsilon \left(\int \frac{2(p_b - p_{EOS})}{(A_2 + A_3)G\psi^{1+\epsilon}} d\psi + C \right), \quad (2.64)$$

sendo C uma constante de integração. De maneira similar à análise anterior, considera-se que $z = (d_x\psi)^2$ é igual a zero nas bordas. Esta função depende da temperatura e densidade, e estas são constantes nas bordas. Para a fase vapor ψ assume o valor ψ_v e para o líquido ψ_l . Aplicando-se estas condições de contorno, obtém-se a seguinte relação:

$$\int_{\psi_v}^{\psi_l} (p_b - p_{EOS}) \frac{d\psi}{\psi^{1+\epsilon}} = \int_{\rho_v}^{\rho_l} (p_b - p_{EOS}) \frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\epsilon}} d\rho = 0, \quad (2.65)$$

em que $\dot{\psi} = d\psi/d\rho$. Alguns autores chamam esta relação de condição de estabilidade mecânica (LI; LUO; LI, 2013). Na obtenção da expressão acima, considerou-se $(A_2 + A_3)$ como independente da integração em ψ ; e G como uma constante.

A pressão *bulk* (p_b) nas regiões de líquido e gás devem ser iguais, o que resulta nas duas equações:

$$p_b = c_s^2\rho_l + G[\psi(\rho_l)]^2 = p_{EOS}(\rho_l), \quad (2.66a)$$

$$p_b = c_s^2\rho_v + G[\psi(\rho_v)]^2 = p_{EOS}(\rho_v). \quad (2.66b)$$

Juntas, as Equações (2.65), (2.66a) e (2.66b) podem ser usadas para se resolver p_b , ρ_l e ρ_v . A regra de áreas iguais de Maxwell implica que um processo de mudança de fase termodinamicamente consistente deve obedecer à seguinte relação de densidades das fases líquido e gás:

$$\int_{\rho_v}^{\rho_l} (p_b - p_{EOS}) \frac{d\rho}{\rho^2} = 0, \quad (2.67)$$

que é equivalente a Equação (2.53), note-se que a inversão de $p_b - p_{EOS}$ por $p_{EOS} - p_b$ não faz diferença porque o resultado da integral é igual a zero. A consistência termodinâmica do método fica dependente da condição (LYCETT-BROWN; LUO, 2015):

$$\frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\epsilon}} d\rho \propto \frac{d\rho}{\rho^2}. \quad (2.68)$$

Observando a Equação (2.68), conclui-se que a equivalência das densidades das fases do método do pseudopotencial em comparação com um método consistente termodinamicamente depende da equação de estado escolhida para definir a densidade efetiva e também dos coeficientes do tensor de pressão que influenciam o parâmetro ϵ . Com relação à tensão superficial do método, a Equação (2.54) implica que esta depende do termo anisotrópico do tensor de pressões. Como este termo é multiplicado por um coeficiente A_3 , pode-se ajustá-lo de forma a se obter a tensão superficial desejada numa simulação.

2.3.4 Primeiros trabalhos

O método do pseudopotencial teve início quando Shan e Chen (1993) mostraram que mudança de fase ou coexistência entre duas fases poderiam ser obtidas ao se incorporar uma força de interação fluido-fluido na EMBR. A equação proposta pode ser escrita no seguinte formato:

$$F_\alpha^{SC}(t, \mathbf{x}) = -\frac{2G}{c_s^2 \Delta t} \psi(t, \mathbf{x}) \sum_i w_i c_{i\alpha} \psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t), \quad (2.69)$$

sendo w_i os pesos da função de equilíbrio, Equação (2.20) e $c_{i\alpha}$ as velocidades da rede. A densidade efetiva é dada pela Equação (2.57) e c_s é a velocidade do som na rede. A seguir será realizada uma análise teórica a respeito dessa força de interação.

Primeiramente, expande-se $\psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$ em série de Taylor:

$$\begin{aligned} \psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) &= \psi(t, \mathbf{x}) + \Delta t c_{i\alpha} \partial_\alpha \psi(t, \mathbf{x}) \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta \psi(t, \mathbf{x}) + \frac{\Delta t^3}{6} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\alpha \partial_\beta \partial_\gamma \psi(t, \mathbf{x}) + \dots \end{aligned} \quad (2.70)$$

Com base nessa expressão e nas relações apresentadas na Equação (2.25), pode-se calcular o momento $\sum_i w_i c_{i\alpha} \psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$:

$$\sum_i w_i c_{i\alpha} \psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = \Delta t c_s^2 \partial_\alpha \psi(t, \mathbf{x}) + \frac{\Delta t^3}{2} c_s^4 \partial_\alpha \partial_\gamma \partial_\gamma \psi(t, \mathbf{x}) + \dots, \quad (2.71)$$

e a forma contínua da força se escreve como:

$$F_\alpha^{SC}(t, \mathbf{x}) = -G \left(\partial_\alpha \psi^2(t, \mathbf{x}) + \Delta t^2 c_s^2 \psi(t, \mathbf{x}) \partial_\alpha \partial_\gamma \partial_\gamma \psi(t, \mathbf{x}) + \dots \right). \quad (2.72)$$

Esta força pode ser introduzida dentro do tensor de pressões de forma a permitir a utilização da teoria da Seção (2.3.3) para analisar o método de Shan-Chen. Para isto,

utiliza-se a relação $-\partial_\beta p_{\alpha\beta}^{SC} = -\partial_\alpha \rho c_s^2 + F_\alpha^{SC}$, desprezando-se termos de ordem superior na Equação (2.72). Assim, obtém-se a pressão equivalente:

$$p_{\alpha\beta}^{SC} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + \frac{c_s^2 \Delta t^2}{2} G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + c_s^2 \Delta t^2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} - c_s^2 \Delta t^2 G(\partial_\alpha \psi)(\partial_\beta \psi). \quad (2.73)$$

Também é necessário levar em consideração os erros de terceira ordem do esquema de força. Aqui considerou-se a utilização do esquema de Guo *et al.*, cujos erros de terceira ordem são apresentados na Equação (2.43). Por simplificação, utiliza-se $F_\alpha^{SC} \approx -2G\psi \partial_\alpha \psi$ na Equação (2.43). Dessa maneira, os erros de discretização assumem a forma:

$$E_\alpha^{3rd} = -\partial_\beta \left[\left(\frac{c_s^2 \Delta t^2}{6} G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + \frac{c_s^2 \Delta t^2}{6} G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + \frac{c_s^2 \Delta t^2}{3} G(\partial_\alpha \psi)(\partial_\beta \psi) + \frac{c_s^2 \Delta t^2}{3} G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi \right]. \quad (2.74)$$

Por fim, pode-se combinar os erros de discretização com o tensor da Equação (2.73). Para obter a forma final do tensor de pressão do método de Shan-Chen, também utilizou-se a Equação (2.58) para a realização de algumas manipulações e considerou-se que $c_s^2 = (\Delta x^2)/(3\Delta t^2)$ para a rede D2Q9. Assim, é obtida a forma correta do tensor de pressão do MBR-P usando a força de Shan-Chen com o esquema de força de Guo *et al.*:

$$p_{\alpha\beta}^{SC} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + \frac{\Delta x^2}{6} G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + \frac{\Delta x^2}{3} G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (2.75)$$

As limitações do termo de força de Shan-Chen ficam evidentes. Como comentado na subseção anterior, os coeficientes A_1 , A_2 e A_3 da Equação (2.59a) precisam ser livres para permitir o ajuste das densidades da fase e da tensão superficial. Neste caso, não há nenhum coeficiente livre, pois $A_1 = 0$, $A_2 = \Delta x^2/6$ e $A_3 = \Delta x^2/3$. Estes valores implicam em $\epsilon = 0$. Assim, a curva de saturação e a tensão superficial dependem apenas da equação de estado adotada para o cálculo da densidade efetiva. Desta forma, não há garantias de que os valores das densidades das fases e da tensão superficial fornecidas pelo método sejam as desejadas para a simulação. Por este fato, é importante que se possa fazer os ajustes destes valores através da escolha dos coeficientes A_1 , A_2 e A_3 . Outro ponto importante de se notar, é que alguns termos do tensor de pressão dependem da malha adotada, mais especificamente de Δx .

2.3.5 Consistência termodinâmica

Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) desenvolveram a primeira metodologia para ajustar a curva de saturação do método do pseudopotencial. O procedimento consistia na combinação linear de duas forças de interação, a de Shan e Chen (1993) e a de Zhang e Chen (2003). Ajustando os coeficientes que multiplicavam cada termo, os autores

conseguiram aproximar a consistência termodinâmica do método. No trabalho original, não foi apresentado nenhum estudo teórico. Porém, com a teoria apresentada na Seção (2.3.3) é possível explicar o mecanismo de funcionamento deste procedimento. Esta análise teórica será realizada a seguir.

Primeiro, a força de Shan-Chen na forma contínua dada pela Equação (2.72) será reescrita na forma da Equação (2.76a). O mesmo procedimento é aplicado na força de Zhang que pode ser escrito na forma da Equação (2.76b), desprezando-se termos de ordem superior.

$$F_{\alpha}^{SC} = -\partial_{\beta} \left[\left(G\psi^2 + \frac{c_s^2 \Delta t^2}{2} G(\partial_{\gamma}\psi)(\partial_{\gamma}\psi) + c_s^2 \Delta t^2 G\psi \partial_{\gamma}\partial_{\gamma}\psi \right) \delta_{\alpha\beta} - c_s^2 \Delta t^2 G(\partial_{\alpha}\psi)(\partial_{\beta}\psi) \right], \quad (2.76a)$$

$$F_{\alpha}^Z = -\partial_{\beta} \left[\left(G\psi^2 + c_s^2 \Delta t^2 G(\partial_{\gamma}\psi)(\partial_{\gamma}\psi) + c_s^2 \Delta t^2 G\psi \partial_{\gamma}\partial_{\gamma}\psi \right) \delta_{\alpha\beta} \right]. \quad (2.76b)$$

Como pode-se observar, as duas equações possuem coeficientes distintos multiplicando os termos que possuem derivadas da densidade efetiva. Dessa maneira, através de uma combinação linear dessas duas forças, pode-se almejar o controle do parâmetro ϵ que influencia a condição de consistência termodinâmica, Equação (2.68). Para isso, define-se a seguinte força F_{α}^K :

$$F_{\alpha}^K = F_{\alpha}^{SC} + \frac{2A_1}{\Delta x^2} (F_{\alpha}^Z - F_{\alpha}^{SC}). \quad (2.77)$$

Levando-se em consideração os erros de terceira ordem do esquema de força de Guo *et al.*, o tensor de pressão obtido é dado por:

$$p_{\alpha\beta}^K = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G(\partial_{\gamma}\psi)(\partial_{\gamma}\psi) + \left(\frac{2A_1}{3} + \frac{\Delta x^2}{6} \right) G\psi \partial_{\gamma}\partial_{\gamma}\psi \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{\Delta x^2}{3} - \frac{2A_1}{3} \right) G\psi \partial_{\alpha}\partial_{\beta}\psi. \quad (2.78)$$

O parâmetro A_1 é de livre escolha, enquanto que $A_2 = (2A_1/3 + \Delta x^2/6)$ e $A_3 = (\Delta x^2/3 - 2A_1/3)$. O parâmetro ϵ da Equação (2.65) é dado pela relação $\epsilon = -2A_1/(A_2 + A_3)$. Como $A_2 + A_3 = \Delta x^2/2$, obtém-se $A_1 = \epsilon \Delta x^2/4$. Dessa forma, escolhendo-se apropriadamente o valor desta variável, pode-se ajustar a curva de densidades.

Uma outra abordagem para corrigir a consistência termodinâmica do MBR-P foi adotada por Li *et al.* (2012). Ao investigar porque diferentes esquemas de força produziam resultados tão distintos nas densidades de mudança de fase, os autores descobriram que cada esquema introduzia um termo distinto no tensor de pressões. Com base nesta análise, os autores propuseram um esquema de força modificado que possuía um parâmetro livre para controlar as densidades de saturação.

$$F'_i = w_i \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} F_{\alpha} + \frac{(c_{i\alpha}c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} \left(F_{\alpha} u_{\beta} + F_{\beta} u_{\alpha} + \frac{A_1}{4G} \frac{F_{\alpha}^{SC} F_{\beta}^{SC}}{\psi^2} \right) \right], \quad (2.79)$$

sendo F_α^{SC} dado pela força de Shan-Chen. A força F_α representa a soma de F_α^{SC} com outras forças que podem estar presentes como, por exemplo, a gravitacional. A equação macroscópica de conservação de quantidade de movimento resultante com este esquema de força é dado por:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\beta(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} + F_\alpha - \partial_\beta \left(\frac{A_1 F_\alpha^{SC} F_\beta^{SC}}{4G \psi^2} \right) + E_\alpha^{3rd}. \quad (2.80)$$

em que $\tau_{\alpha\beta}$ é o tensor de tensões viscosas.

O termo adicionado pode ser reescrito usando a aproximação $F_\alpha^{SC} \approx -2G\psi\partial_\alpha\psi$:

$$\frac{A_1 F_\alpha^{SC} F_\beta^{SC}}{4G \psi^2} = A_1 G (\partial_\alpha \psi) (\partial_\beta \psi). \quad (2.81)$$

E o tensor de pressões total final é dado por:

$$p_{\alpha\beta}^{Li,1} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G (\partial_\gamma \psi) (\partial_\gamma \psi) + \left(\frac{\Delta x^2}{6} + A_1 \right) G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{\Delta x^2}{3} - A_1 \right) G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (2.82)$$

Assim como para o esquema de Kupershtokh *et al.*, o parâmetro A_1 é de livre escolha. Como $A_2 + A_3 = \Delta x^2/2$, obtém-se $A_1 = \epsilon \Delta x^2/4$.

Em um trabalho subsequente, Li, Luo e Li (2013) estenderam o seu esquema de força para serem implementados com o operador de colisão MRT. A EMBR com esquema de força e operador MRT é dada pela Equação (2.37). Definindo-se \mathbf{F}' como o vetor do esquema de força com componentes $[\mathbf{F}']_i = F'_i$, o esquema de Li *et al.* é dado por:

$$\mathbf{M}\mathbf{F}' = \begin{pmatrix} 0 \\ 6(u_x F_x + u_y F_y) + \frac{3A_1 |\mathbf{F}|^2}{G\psi^2(\tau_e - 0.5)} \\ -6(u_x F_x + u_y F_y) - \frac{3A_1 |\mathbf{F}|^2}{G\psi^2(\tau_\zeta - 0.5)} \\ F_x \\ -F_x \\ F_y \\ -F_y \\ 2(u_x F_x - u_y F_y) \\ u_x F_y + u_y F_x \end{pmatrix}. \quad (2.83)$$

Os parâmetros τ_e e τ_ζ são tempos de relaxação do operador MRT com ortogonalização de Gram-Schmidt. E o tensor de pressão resultante se torna:

$$p_{\alpha\beta}^{Li,2} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G (\partial_\gamma \psi) (\partial_\gamma \psi) + \frac{\Delta x^2}{6} G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + \frac{\Delta x^2}{3} G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (2.84)$$

Novamente, $A_1 = \epsilon \Delta x^2/4$. Através do controle deste parâmetro, pode-se ajustar a curva de saturação de tal modo que as densidades equivalem a de um método termodinamicamente consistente. Este resultado consistiu num grande avanço para o MBR-P pois permitiu a solução de uma grande deficiência que consistia no desvio das densidades de fase fornecidas pelo método com relação as densidades esperadas a partir da consistência termodinâmica.

2.3.6 Tensão superficial

Como já comentado previamente, a tensão superficial no MBR-P pode ser ajustada através do coeficiente A_3 que multiplica o termo anisotrópico do tensor de pressões. Os métodos apresentados até aqui possuíam valores de A_3 que não podiam ser ajustados livremente, mas dependiam da malha sendo utilizada. O primeiro trabalho a corrigir este problema foi desenvolvido por Li e Luo (2013). Seguindo a mesma ideia de adicionar termos convenientes no tensor de pressão, os autores propuseram o seguinte termo fonte para a EMBR com operador de colisão MRT:

$$\mathbf{f}^* - \mathbf{f} = -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Lambda}\mathbf{M}(\mathbf{f} - \mathbf{f}^{eq}) + \mathbf{M}^{-1}\left(1 - \frac{\mathbf{\Lambda}\Delta t}{2}\right)\mathbf{M}\mathbf{F}'\Delta t + \mathbf{C}\Delta t. \quad (2.85)$$

Sendo o vetor \mathbf{C} dado por:

$$\mathbf{C} = \mathbf{M}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1.5\omega_e(Q_{xx} + Q_{yy}) \\ -1.5\omega_\zeta(Q_{xx} + Q_{yy}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\omega_\nu(Q_{xx} - Q_{yy}) \\ -\omega_\nu Q_{xy} \end{pmatrix}. \quad (2.86)$$

Os parâmetros $\omega_e = 1/\tau_e$, $\omega_\zeta = 1/\tau_\zeta$ e $\omega_\nu = 1/\tau_\nu$ são os inversos dos tempos de relaxação do operador MRT.

O tensor $Q_{\alpha\beta}$ é calculado pela Equação (2.87a). A forma contínua dessa expressão é obtida a partir de uma expansão em série de Taylor e sua expressão é dada pela Equação (2.87b) com termos de ordem superior desprezados.

$$Q_{\alpha\beta}(t, \mathbf{x}) = \left(\frac{1}{c_s^2} - \frac{3A_3}{c_s^2\Delta x^2}\right) G\psi(t, \mathbf{x}) \sum_i w_i [\psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i\Delta t) - \psi(t, \mathbf{x})] c_{i\alpha}c_{i\beta}, \quad (2.87a)$$

$$Q_{\alpha\beta} = 2\left(\frac{\Delta x^2}{3} - A_3\right) G\left(\frac{1}{2}\psi\partial_\gamma\partial_\gamma\psi\delta_{\alpha\beta} + \psi\partial_\alpha\partial_\beta\psi\right). \quad (2.87b)$$

Em seguida, realizou-se uma análise de Chapman-Enskog na Equação (2.85) para se obter a equação de conservação de quantidade de movimento. Considerou-se que o esquema de força \mathbf{F}' empregado na Equação (2.85) é o mesmo da Equação (2.83) proposto por Li, Luo e Li (2013):

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = & -\partial_\beta(\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} + F_\alpha - \partial_\beta \left(\frac{A_1}{4G} \frac{F_\alpha^{SC} F_\beta^{SC}}{\psi^2} \right) + E_\alpha^{3rd} \\ & + \partial_\beta Q_{\alpha\beta} - \frac{3}{4} \partial_\beta (Q_{xx} + Q_{yy}) \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (2.88)$$

Substituindo a Equação (2.87b) na (2.88), obtém-se o tensor de pressão para este esquema numérico:

$$p_{\alpha\beta}^{Li,3} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + \left(\frac{\Delta x^2}{2} - A_3 \right) G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (2.89)$$

Como pode-se observar, este procedimento não altera a relação entre A_1 e ϵ dos modelos anteriores dada por $A_1 = \epsilon \Delta x^2 / 4$. Assim, o valor de A_3 pode ser ajustado livremente, sem alterar o ajuste da curva de saturação realizado previamente.

2.3.7 Conservação de energia

Simulações não isotérmicas com transferência de calor requerem a solução de uma equação para conservação de energia adicionalmente a conservação de massa e quantidade de movimento. Este tipo de situação é encontrada em simulações de ebulição em piscina ou em paredes aquecidas de canais. Quando a discretização da equação de transporte de Boltzmann foi realizada para obtenção da EMBR, comentou-se que a energia não era mais conservada devido à hipótese isotérmica que implicou numa pressão $p = c_s^2 \rho$. Com o método do pseudopotencial, esta equação de estado simplificada pode ser alterada por uma mais complexa que dependa da densidade e temperatura $p = p_{EOS}(\rho, T)$. Conectando este método com uma equação que resolva o campo de temperatura, é possível resolver problemas térmicos com o MBR-P.

O acoplamento entre o MBR e a equação de energia se dá através da equação de estado. Com o conhecimento dos campos de densidade, velocidade e temperatura, o MBR pode ser inteiramente resolvido para se obter os campos de densidade e velocidade no próximo instante de tempo. A informação referente ao campo de temperatura é utilizada para o cálculo da pressão pela equação de estado e esta é utilizada no cálculo do potencial de interação do MBR-P. A partir da equação de energia, obtém-se o campo de temperatura no próximo instante de tempo. Obtém-se, assim, a solução de todas as variáveis de interesse.

A equação de energia mais utilizada na literatura referente ao MBR-P foi adotada inicialmente por Hazi e Markus (2009):

$$\partial_t T = -u_\gamma \partial_\gamma T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\gamma (\kappa \partial_\gamma T) - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p_{EOS}}{\partial T} \right)_\rho \partial_\gamma u_\gamma. \quad (2.90)$$

Na expressão acima, c_v é o calor específico a volume constante e κ é a condutividade térmica do fluido. Li *et al.* (2015) discretizou esta equação usando um esquema de Runge-Kutta de quarta ordem no tempo. Por simplicidade, os autores denominaram o lado direito da equação acima de $K(T)$. A discretização no tempo foi feita da seguinte forma:

$$T^{h+\Delta t} = T^t + \frac{\Delta t}{6} (h_1 + 2h_2 + 2h_3 + h_4), \quad (2.91)$$

em que h_1, h_2, h_3 e h_4 são dados por:

$$\begin{aligned} h_1 &= K(T^t), & h_2 &= K\left(T^t + \frac{\Delta t}{2} \cdot h_1\right), \\ h_3 &= K\left(T^t + \frac{\Delta t}{2} \cdot h_2\right), & h_4 &= K\left(T^t + \Delta t \cdot h_3\right). \end{aligned} \quad (2.92)$$

As derivadas espaciais foram discretizadas usando os esquemas de diferenças finitas isotrópicos propostos por Lee e Lin (2005):

$$\partial_\alpha \mathcal{F}(\mathbf{x}) \approx \frac{1}{c_s^2 \Delta t} \sum_i w_i \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{x}_i \Delta t) c_{i\alpha}, \quad (2.93a)$$

$$\partial_\gamma \partial_\gamma \mathcal{F}(\mathbf{x}) \approx \frac{2}{c_s^2 \Delta t^2} \sum_i w_i [\mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - \mathcal{F}(\mathbf{x})]. \quad (2.93b)$$

Esta discretização é denominada de modelo híbrido, pois utiliza um método para resolver a conservação de massa e quantidade de movimento e outro método para energia. É importante notar que o lado direito da Equação (2.90) denominado de $K(T)$ por Li *et al.* (2015), na realidade não é apenas uma função da temperatura mas uma função de diversas variáveis $K(\rho, \mathbf{u}, T)$. Os autores limitaram-se a falar que as variáveis ρ e \mathbf{u} foram resolvidas pelo MBR. Porém, este método possui um único passo no tempo: dado o conhecimento das variáveis em t , calcula-se estas para $t + \Delta t$. Já o método Runge-Kutta necessita o conhecimento das variáveis em passos intermediários entre t e $t + \Delta t$. Os autores deste esquema híbrido não fizeram nenhum comentário de como estas variáveis foram obtidas. Nem os outros trabalhos na literatura, que fazem menção a este, esclarecem este ponto.

Um outro procedimento consiste na utilização de uma segunda EMBR porém, neste caso, uma nova função de distribuição é criada para representar a energia ou temperatura do fluido. Este procedimento foi aplicado no MBR-P por Gong e Cheng (2012). A equação utilizada é escrita como:

$$\Phi_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - \Phi_i(t, \mathbf{x}) = -\frac{\Delta t}{\tau_T} (\Phi_i(t, \mathbf{x}) - \Phi_i^{eq}(t, \mathbf{x})) + w_i \phi \Delta t, \quad (2.94)$$

com τ_T sendo o tempo de relaxação para temperatura. A função de equilíbrio $\Phi_i^{eq}(t, \mathbf{x})$ é escrita em termos da temperatura do fluido:

$$\Phi_i^{eq} = w_i T \left[1 + \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} u_\alpha + \frac{(c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} u_\alpha u_\beta \right]. \quad (2.95)$$

A temperatura T é calculada pelo momento de ordem zero:

$$T = \sum_i \Phi_i. \quad (2.96)$$

Por fim, o termo fonte ϕ está relacionado a energia usada para mudança de fase:

$$\phi = T \left[1 - \frac{1}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p_{EOS}}{\partial T} \right)_\rho \right] \partial_\gamma u_\gamma. \quad (2.97)$$

A equação de conservação de energia obtida com esse modelo assume a forma:

$$\partial_t T = -u_\gamma \partial_\gamma T + \partial_\gamma \left(\frac{\kappa}{\rho c_v} \partial_\gamma T \right) - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p_{EOS}}{\partial T} \right)_\rho \partial_\gamma u_\gamma. \quad (2.98)$$

Observa-se uma diferença entre as Equações (2.90) e (2.98) no termo difusivo. Li, Zhou e Yan (2017) criticaram o esquema numérico adotado por Gong e Cheng (2012), afirmando que a diferença no termo difusivo causa grandes divergências de simulações em relação a Equação (2.90) que é consistente fisicamente. Os autores (LI; ZHOU; YAN, 2017) propuseram então uma nova equação baseada no MBR-MRT para resolver a conservação de energia de forma consistente. Este modelo é um pouco mais complexo de se implementar em relação à discretização baseada em diferenças finitas e método Runge-Kutta. Alguns autores utilizaram a equação da energia como proposta originalmente por Gong e Cheng (2012) em seus estudos (SUN *et al.*, 2017; ZHOU; LIU; LIU, 2019; WANG; LOU; LI, 2020). Outros utilizaram algumas correções para evitar o erro no termo difusivo (FANG *et al.*, 2017; MU *et al.*, 2017).

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

No capítulo anterior foram apresentados os fundamentos do MBR-P. Já neste capítulo, serão mostrados os principais estudos sobre mudança de fase na literatura que utilizaram este método como ferramenta de simulação. Foram selecionados estudos que se encaixam em duas categorias. A primeira refere-se aos estudos de ebulição em piscina e a segunda categoria é a de estudos sobre mudança de fase no interior de canais. A maior parte dos trabalhos se encaixam no primeiro tipo, possivelmente porque estes sistemas requerem condições de contorno mais simples.

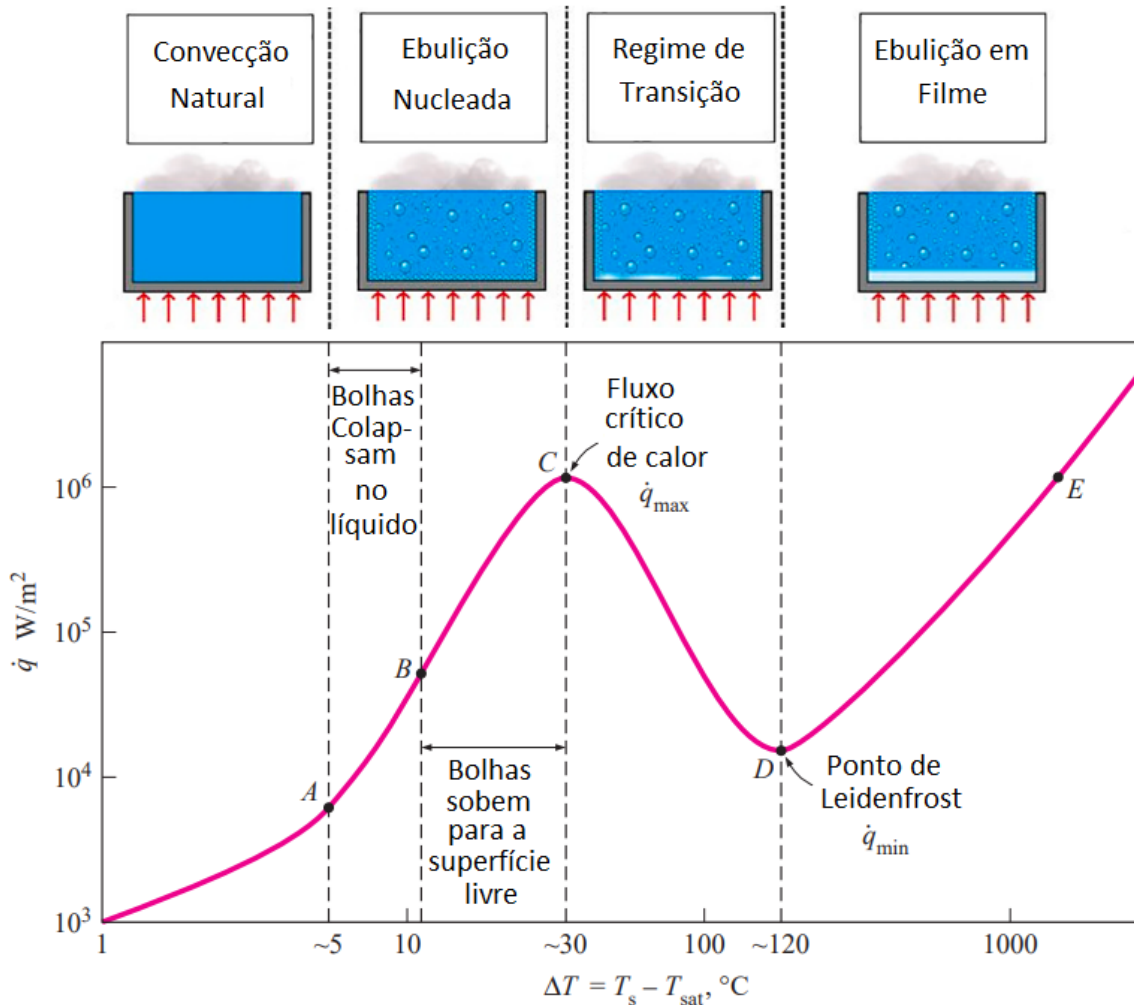
3.1 Ebulição em piscina

3.1.1 Conceitos sobre ebulição em piscina

A ebulição é um processo em que um fluido muda da fase líquida para a fase vapor devido à transferência de calor oriunda de uma superfície sólida (INCROPERA *et al.*, 2008, p. 394). Na ebulição em piscina, o processo de mudança de fase líquida para vapor ocorre numa superfície aquecida que está submersa num grande volume de líquido estagnado. Neste caso o movimento do fluido próximo a superfície ocorre devido à convecção natural e à agitação causada pelo crescimento, desprendimento e interações entre bolhas (INCROPERA *et al.*, 2008, p. 395). Nukiyama (1934) desenvolveu um experimento pioneiro em que uma corrente elétrica era aplicada em um fio metálico submerso em um recipiente de líquido estagnado. Na superfície superior, havia uma fronteira aberta com a atmosfera. Calculando o fluxo de calor \dot{q} fornecido ao fluido a partir da corrente elétrica aplicada no fio e medindo-se a diferença ΔT entre a temperatura do fio e a temperatura de saturação do fluido T_{sat} para a pressão dada, consegue-se reproduzir curvas como a ilustrada na Figura 4, conhecida como curva de ebulição.

Na curva de ebulição, são identificados três principais regimes: ebulição nucleada, regime de transição e ebulição em filme. Uma descrição detalhada destes regimes pode ser encontrada em Çengel (2003) e Incropera *et al.* (2008). A seguir, apresentou-se um pequeno resumo destes materiais. Na ebulição nucleada, observa-se a formação de bolhas isoladas nos sítios de nucleação que crescem e se desprendem da superfície. Nesta região da curva, o fluxo de calor cresce com o aumento da temperatura da superfície aquecida. Com este aumento de temperatura, mais bolhas começam a se formar e interagir entre si, e grupos de bolha podem coalescer para formar bolsões de vapor de maiores dimensões com relação a bolhas isoladas. Este fenômeno ocorre até que se atinja o máximo fluxo de calor que pode ser trocado com o fluido, chamado fluxo crítico de calor. Após este ponto na curva, inicia-se o regime de transição. Neste regime, observa-se que, em qualquer ponto da superfície, as condições oscilam entre a ebulição em filme e a ebulição nucleada.

Figura 4 – Gráfico que relaciona o fluxo de calor em função da diferença de temperatura (entre a superfície aquecida e a temperatura de saturação do fluido) para os três regimes de ebulição em piscina: nucleada; transição; e em filme.



Fonte: Modificado a partir de Çengel (2003) e Guichet, Almahmoud e Jouhara (2019).

Nesta região da curva, o fluxo de calor decresce com o aumento da temperatura. No ponto da curva denominado de ponto de Leidenfrost, o fluxo de calor atinge um mínimo local. Nesta condição, a superfície encontra-se completamente coberta por um filme de vapor. A transferência de calor ocorre predominantemente por condução de calor pelo filme de vapor e por radiação. Nesta região da curva, o fluxo de calor volta a crescer com o aumento da temperatura da superfície aquecida.

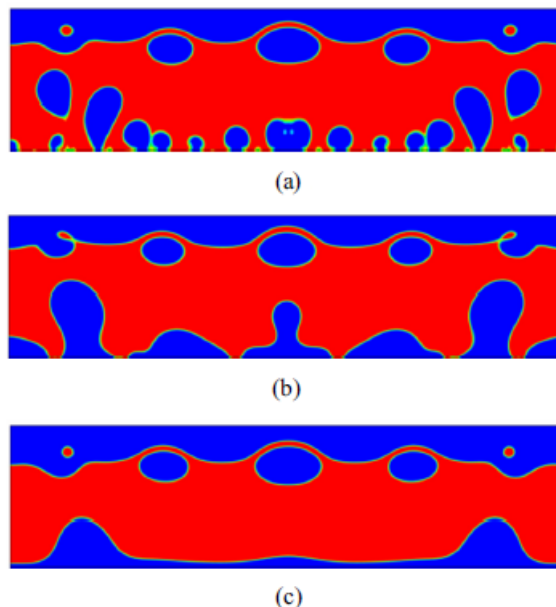
De acordo com Mahmoud e Karayiannis (2021) os principais mecanismos de transferência de calor no regime de ebulição nucleada são: (i) convecção natural para baixos fluxos de calor enquanto ainda há uma baixa formação e interação entre bolhas, (ii) microconvecção devido ao crescimento das bolhas, (iii) vaporização da microcamada

de líquido presa embaixo da bolha, (iv) vaporização do líquido superaquecido ao redor da bolha, (v) condução transiente de calor quando o líquido recobre a superfície após o desprendimento de alguma bolha e também devido à (vi) convecção resultante da agitação do líquido causada pela movimentação das bolhas.

3.1.2 Simulações de ebulição em piscina com o MBR-P

Li *et al.* (2015) afirmaram serem os primeiros autores a terem simulado os três regimes de ebulição (ebulição nucleada, de transição e em filme) com o método do pseudopotencial. Para isso eles utilizaram um esquema híbrido, proposto no mesmo artigo e já descrito na seção 2.3.7, por meio das Equações (2.91), (2.92), e (2.93). Neste esquema, as equações de massa e quantidade de movimento foram resolvidas usando MBR e a equação de energia com uma discretização de diferenças finitas no espaço e Runge-Kutta no tempo. Eles utilizaram um esquema de força apresentado num trabalho anterior de autoria própria (LI; LUO; LI, 2013). Uma ilustração dos três regimes de ebulição simulados por esses autores é apresentada na Figura 5. Note-se que no regime de ebulição nucleada há uma grande formação de bolhas. Já na ebulição em filme há a completa secagem da parede e uma queda muito grande no coeficiente de transferência de calor. O regime de transição consiste num estágio intermediário entre os dois anteriores.

Figura 5 – Simulação dos três regimes de ebulição em piscina com o método do pseudopotencial: (a) nucleada; (b) transição; (c) em filme.



Fonte: Elaborado por Li *et al.* (2015).

Neste trabalho os autores estudaram do efeito que a temperatura de superaquecimento na parede possui no regime de ebulição e no coeficiente de transferência de calor.

Também estudou-se o efeito do ângulo de contato. Observou-se que um superaquecimento maior induz o aumento da cobertura de vapor na superfície aquecida. No início do regime de ebulição nucleada, o aumento da temperatura de superaquecimento provoca o aumento do coeficiente de transferência de calor porém, no regime de transição, este coeficiente diminui com o crescimento do superaquecimento. Os autores adotaram parâmetros de certa forma arbitrários na simulação sem nenhuma menção a algum sistema físico real ou que as condições de operação pudessem ser encontradas em algum experimento de laboratório.

Gong e Cheng (2015) utilizaram duas funções de distribuição nas suas simulações de ebulição em piscina. Uma função de distribuição foi utilizada para resolver as equações de massa e quantidade de movimento de acordo com o MBR tradicional, enquanto que outra função de distribuição foi utilizada para resolver a equação de energia também utilizando o MBR. Este procedimento já foi descrito na seção 2.3.7. Os autores avaliaram o impacto da molhabilidade na eficiência da transferência de calor. Também foi modelada a nucleação a partir de um substrato sólido. Uma temperatura foi imposta na superfície inferior do substrato e simulou-se a condução de calor no sólido e a transferência de calor conjugada entre a superfície superior do substrato e o fluido. Isto foi feito com o intuito de aproximar a solução de uma condição experimental, em que geralmente se aplica um fluxo de calor ou uma temperatura alta num substrato que aquece o fluido por condução/transferência de calor conjugada. Apesar deste esforço para tornar a simulação mais realista, os parâmetros de simulação também foram escolhidos de forma arbitrária sem menção a algum possível sistema físico real.

Mu *et al.* (2017) estudaram o processo de nucleação em cavidades. Neste trabalho, modelou-se um substrato sólido contendo uma pequena cavidade na sua superfície em contato com o fluido. Um fluxo de calor foi aplicado na parte inferior do substrato e modelou-se a transferência de calor do sólido para o fluido. O MBR-P utilizado é uma versão 3D do esquema proposto por Li, Luo e Li (2013) que foi desenvolvido por (ZHANG; PAPADIKIS; GU, 2014). A equação de energia é a mesma utilizada por Li *et al.* (2015). Os autores avaliaram a influência do formato da cavidade no processo de nucleação e na eficiência de transferência de calor. Os autores fizeram uma equivalência entre alguns parâmetros utilizados nas simulações com propriedades reais para a água como, por exemplo, a tensão superficial. Mas não foi realizada uma análise dimensional completa comparando o problema simulado com algum experimento real. Desta forma, ainda não foi revelado se os resultados do MBR podem ser utilizados para modelar um processo de ebulição em piscina realista.

Uma das maiores dificuldades na aplicação do MBR-P para o estudo de ebulição em piscina está relacionada à instabilidade do método para altas razões de densidade. Simulações bifásicas hidrodinâmicas com altas razões de densidade (da ordem de 10^3)

já foram realizadas na literatura (LI; LUO; LI, 2013). Entretanto, quando o MBR-P é combinado com uma equação de energia, a estabilidade do método é drasticamente reduzida e as razões de densidade simuladas costumam ser inferiores a 10^2 . Fang *et al.* (2017) dedicaram-se a estudar como seria possível aumentar a estabilidade do método para problemas térmicos. Os autores utilizaram o mesmo esquema de Li *et al.* (2015) e avaliaram como a alteração dos parâmetros da equação de estado poderiam contribuir para este aumento da estabilidade. Com estas alterações os autores conseguiram simular uma razão próxima a 200. O estudo focou-se apenas na estabilidade do método e não realizou-se uma conexão entre os resultados apresentados e algum sistema físico real.

Zhou, Liu e Liu (2019) estudaram o processo de ebulição em uma superfície estruturada formada por micro-pilares. Os autores variaram o formato e as dimensões dos micro-pilares e avaliaram o seu efeito no processo de nucleação e eficiência de transferência de calor. Concluiu-se que estas estruturas na superfície podem aumentar o número de sítios de nucleação e incrementar a transferência de calor da superfície para o fluido. Estes autores também não fizeram nenhuma conexão entre as dimensões e as condições de operação do sistema simulado com algum experimento de laboratório. Fei *et al.* (2020) utilizaram um operador de colisão mais sofisticados para simulação de ebulição em piscina. Alguns fenômenos físicos observados corresponderam a resultados experimentais. Por exemplo, a distribuição da área de contato das bolhas com o substrato segue uma função densidade de probabilidade. Observou-se que esta função muda de uma distribuição exponencial para uma lei de potência ao se incrementar o superaquecimento da parede. Também comparou-se os valores de fluxo crítico de calor com correlações da literatura com resultados satisfatórios. Porém, não criou-se uma relação entre as condições de operação do sistema simulado com algum caso encontrado em aplicações ou experimentos de laboratório. Outros trabalhos mais recentes continuam a apresentar um caráter mais qualitativo (FENG *et al.*, 2021; CHEN *et al.*, 2022; MUKHERJEE; BASU; MONDAL, 2022).

3.2 Ebulição convectiva em canais

3.2.1 Conceitos relacionados a ebulição convectiva em canais

Na ebulição convectiva, além da movimentação do fluido devido ao empuxo e ao processo de mudança de fase, há também uma movimentação global do fluido que geralmente é imposta através de algum dispositivo como, por exemplo, uma bomba. Esta movimentação também pode ocorrer de forma natural como, por exemplo, num canal vertical em que o fluido é acelerado para baixo devido à força da gravidade. Este tipo de ebulição também é denominada ebulição com convecção forçada (INCROPERA *et al.*, 2008). Um caso de muito interesse na literatura é o estudo deste tipo de ebulição no interior de canais isolados ou conjunto de canais que constituem um micro trocador de calor. Este interesse se deve à alta capacidade de remoção de calor proporcionada por este

fenômeno (KANDLIKAR, 2005).

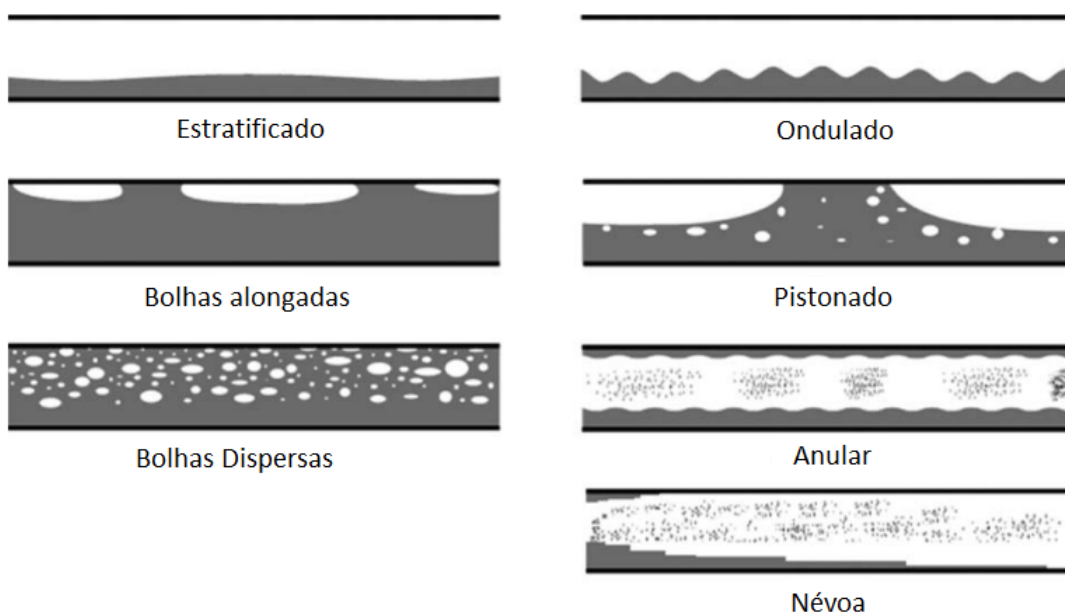
Os escoamentos no interior de canais são classificadas de diversas maneiras. Primeiramente, é necessário identificar tratar-se de um macro ou microcanal. Diferentes métodos foram propostos na literatura para distinguir macro de microcanais. Kew e Cornwell (1997) propuseram o seguinte critério baseado no número de confinamento:

$$Co = \frac{1}{D_h} \sqrt{\frac{4\gamma}{g(\rho_l - \rho_v)}} > 0.5, \quad (3.1)$$

sendo $D_h = \sqrt{4A_c/\pi}$ o diâmetro hidráulico do canal, em que A_c é a área da seção transversal canal e γ a tensão superficial. Cheng *et al.* (2008) adotaram $D_h > 3mm$ para macrocanal enquanto $D_h \leq 3$ constitui em microcanal.

Para cada tipo de canal (macro ou micro), dependendo das condições físicas impostas como vazão mássica e título de vapor do fluido escoando em seu interior, o escoamento pode apresentar padrões muito distintos. No caso de ebulição convectiva, não é possível definir o escoamento em um único padrão pois, devido à ebulição, as condições físicas do fluido vão se alterando ao longo do canal como, por exemplo, o aumento do título de vapor com a evaporação. Assim, torna-se mais fácil estudar escoamentos de misturas líquido-vapor adiabáticas, ou seja, sem a presença de transferência de calor e, portanto, sem ebulição e alteração do título de vapor ao longo do canal. A classificação de padrões para macrocanais adotada por Cheng, Ribatski e Thome (2008) é apresentada na Figura 6. No caso de microcanais, os efeitos devido à tensão superficial se sobrepõem ao

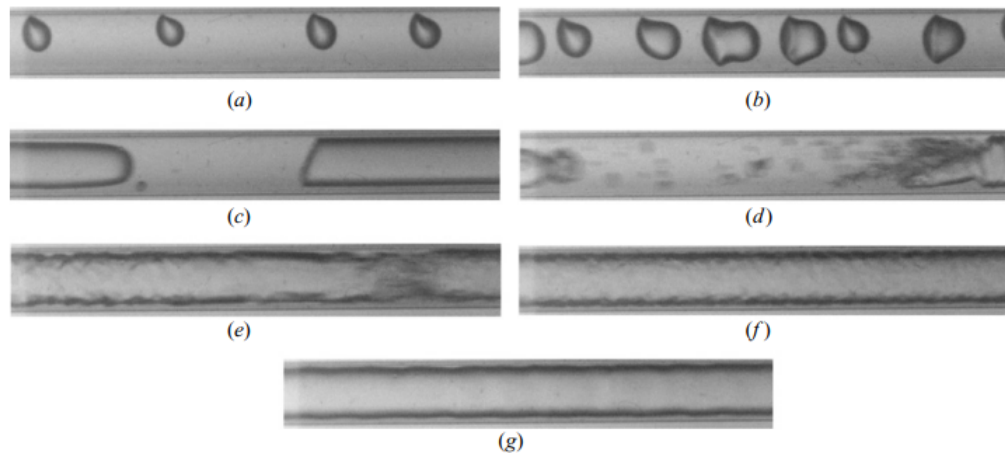
Figura 6 – Padrões de escoamentos adiabáticos para macrocanais horizontais.



Fonte: Elaborado por Cheng, Ribatski e Thome (2008).

gravitacional (KANDLIKAR, 2010). Assim, observa-se menor grau de estratificação da fase líquida. Exemplos de padrões de escoamentos para microcanais estudados por Revellin e Thome (2007) são mostrados na Figura 7.

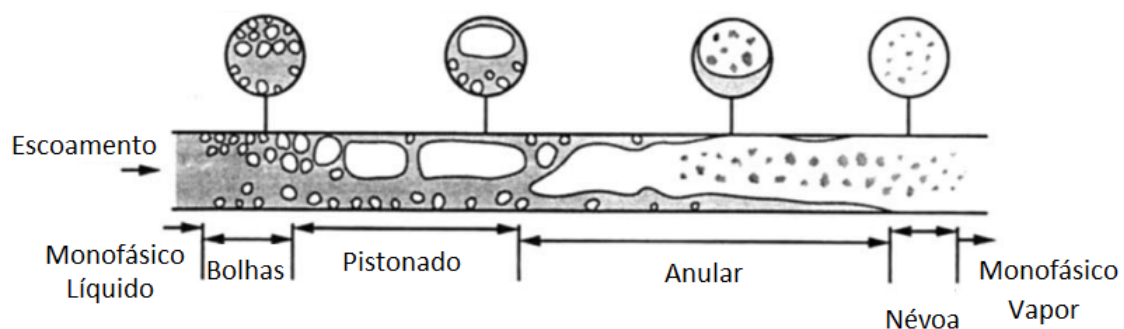
Figura 7 – Padrões de escoamentos adiabáticos para microcanais horizontais: (a) bolhas, (b) bolhas, (c) pistonado, (d) agitante, (e) agitante, (f) anular, (g) anular.



Fonte: Elaborado por Revellin e Thome (2007).

Cada padrão de escoamento depende de certas condições como, por exemplo, a vazão mássica e o título de vapor. Diversos autores produziram mapas em que é possível identificar o padrão de escoamento a partir destas condições físicas (CHENG; RIBATSKI; THOME, 2008; REVELLIN; THOME, 2007). No caso de escoamentos com ebulição, o padrão se altera ao longo do canal. Este comportamento está ilustrado na Figura 8.

Figura 8 – Padrões de escoamentos para ebulição convectiva em um canal horizontal.



Fonte: Elaborado por Cheng, Ribatski e Thome (2008).

3.2.2 Simulações de ebulição convectiva com o MBR-P

Gong e Cheng (2014) simularam escoamentos com mudança de fase em um canal bidimensional usando o método de Boltzmann em rede do pseudopotencial (MBR-P).

Os autores comentaram que tratava-se de um microcanal, embora não apresentaram nenhuma discussão a mais para justificar a sua classificação. Como foi desprezada a força da gravidade, $g = 0$, pode-se considerar que o sistema simulado satisfazia o critério de Kew e Cornwell (1997). A nucleação foi induzida por meio de um micro aquecedor posicionado na parede inferior do canal, onde foi imposto um fluxo de calor constante em algumas simulações e uma temperatura de superaquecimento constante em outros testes. Os autores avaliaram os efeitos de diversos parâmetros no padrão de escoamento, tempo de nucleação e temperatura de nucleação. Em um dos testes, os autores avaliaram o efeito do número de Reynolds no padrão de escoamento. Estes resultados são apresentados na Figura (9).

Figura 9 – Simulação de escoamento com mudança de fase em canal bidimensional com diferentes números de Reynolds: (a) $Re = 0.27$; (b) $Re = 0.396$; (c) $Re = 0.468$.



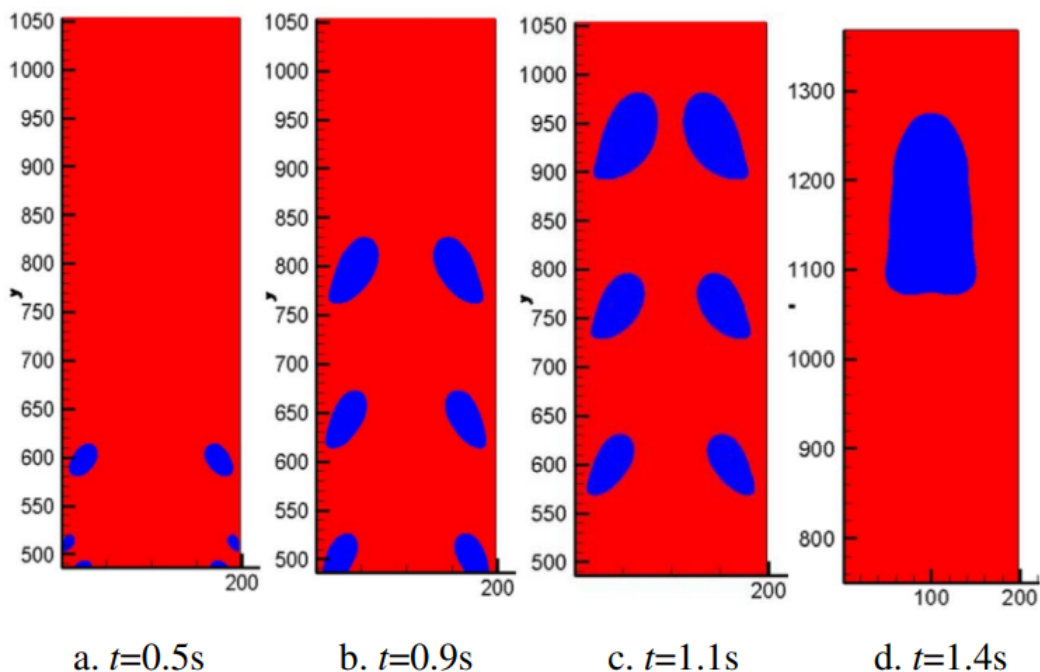
Fonte: Elaborado por Gong e Cheng (2014)

Pode ser observado na Figura (9.a) que para $Re = 0.27$ uma bolha se forma a partir do aquecedor e cresce ao longo do canal sem se romper. Os autores afirmaram que o padrão era semelhante a um escoamento anular. Ao aumentar-se o número de Reynolds, os autores observaram que bolhas começaram a se desprender e afirmaram que o escoamento assemelha-se ao pistonado. Pontuou-se que os resultados obtidos no estudo qualitativamente se comportaram de acordo com resultados experimentais reportados na literatura (WANG; CHENG, 2008; AVEDISIAN *et al.*, 1999). Os autores não fizeram nenhuma comparação entre os resultados obtidos e algum mapa de padrões de escoamento.

Simulações de diferentes padrões de escoamento em um processo ebulição convectiva foram realizadas por Sun *et al.* (2017). Os padrões, incluem a ebulição nucleada (bolhas), escoamento pistonado e o desvio de ebulição nucleada. O desvio de ebulição nucleada identificado por Sun *et al.* (2017) não está entre os padrões catalogados na subseção anterior. Este seria como o inverso do escoamento anular. No anular, há uma pequena camada de filme líquido próximo à parede enquanto a região central é composta de vapor.

Já no desvio da ebulição nucleada, ocorre a secagem completa do fluido próximo à superfície (forma-se um filme de vapor) enquanto a região central ainda está na fase líquida. Este tipo de escoamento ocorre para vazões mássicas e fluxos de calor muito elevados (MUDAWAR; BOWERS, 1999). Em um dos testes, os autores simularam a formação de um padrão pistonado a partir da coalescência de bolhas que nuclearam na superfície aquecida da parede do canal como mostrado na Figura (10). Neste trabalho, também foram estudadas as influências de diversos parâmetros na ebulição convectiva como, por exemplo, fluxo de calor, número de Reynolds, diâmetro do canal e comprimento das regiões de aquecimento.

Figura 10 – Simulação de escoamento pistonado com mudança de fase em canal.



Fonte: Elaborado por Sun *et al.* (2017)

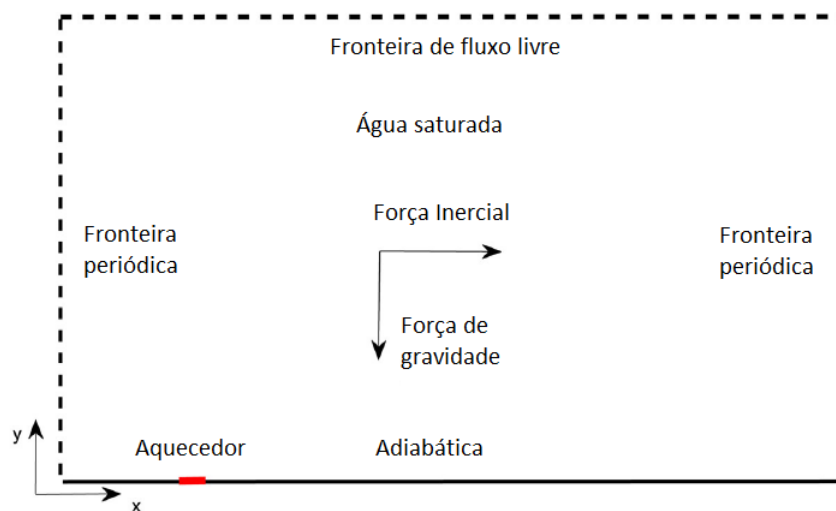
Os autores observaram que o coeficiente de transferência de calor aumenta com o incremento do fluxo de calor até o momento em que o desvio da ebulição nucleada ocorre, havendo assim um grande declínio no coeficiente de transferência de calor. Após a secagem completa da parede e o estabelecimento da ebulição em filme de vapor, este coeficiente volta a crescer com o aumento do fluxo de calor na parede. Em um artigo subsequente, Sun *et al.* (2018) estudaram o efeito do ângulo de contato no escoamento com mudança de fase em canais. Os autores observaram que o tempo de crescimento da bolha é menor para uma superfície hidrofílica em relação a uma superfície hidrofóbica. Porém, o tempo de espera para o surgimento de um novo núcleo de vapor e o coeficiente de transferência de calor é maior para a superfície hidrofílica.

Wang, Lou e Li (2020) realizaram um estudo paramétrico sobre a influência de diversos fatores na dinâmica de crescimento e desprendimento de bolhas e também na

eficiência da transferência de calor num canal horizontal. Os autores afirmaram que simularam um microcanal, porém nenhum critério foi apresentado para justificar esta afirmação. Diferentemente da simulação de Gong e Cheng (2014), neste estudo não se desprezou a influência da força de gravidade. Assim, não se pode afirmar diretamente que esta simulação representava um microcanal.

Os fatores de influência analisados por Wang, Lou e Li (2020) foram: modo de transferência de calor (com fluxo de calor ou temperatura do aquecedor constante), força gravitacional, magnitude da força de inércia e molhabilidade da superfície. A configuração utilizada para modelar este problema foi diferente dos outros autores. O esquema do sistema físico modelado é mostrado na Figura 11. Observa-se que ao invés da utilização de duas paredes (superior e inferior), os autores optaram por uma condição de contorno aberta na fronteira superior. Outro ponto diferente foi a utilização de uma força horizontal para movimentar o fluido ao invés de se impor uma vazão mássica. Há também a presença da força gravitacional. No artigo de Sun *et al.* (2017), os autores também utilizaram uma força para movimentar o fluido porém, esta coincidia com a força da gravidade pois tratava-se de um canal vertical.

Figura 11 – Esquema do modelo físico de canal usado por Wang, Lou e Li (2020).

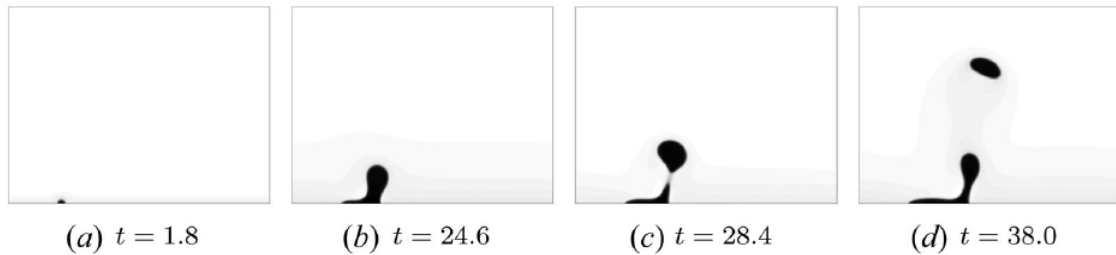


Fonte: Elaborado por Wang, Lou e Li (2020).

Alguns dos resultados obtidos por Wang, Lou e Li (2020) na simulação com temperatura constante no aquecedor são apresentados na Figura 12. Os instantes de tempo foram adimensionalizados conforme procedimento indicado no trabalho original. No instante $t = 1.8$, observa-se a formação de um pequeno núcleo de vapor no aquecedor. Nos instantes subsequentes, observa-se o crescimento de uma bolha e o seu respectivo deslocamento para a direita devido à ação da força horizontal. No instante $t = 28.4$, observa-se o início do desprendimento. Um comportamento curioso é observado entre

$t = 28.4$ e $t = 38.0$. Pode-se observar que a bolha despreendida pouco se deslocou no sentido horizontal, o que indica uma velocidade de escoamento muito baixa. As simulações realizadas por Wang, Lou e Li (2020) aparentam estar no limiar de uma ebulição em piscina, com velocidades de escoamento muito sutis. Assim como em outros trabalhos da

Figura 12 – Simulação de nucleação de bolha em um canal com temperatura constante no aquecedor.



Fonte: Elaborado por Wang, Lou e Li (2020)

literatura, não se fez uma conexão entre as simulações realizadas e algum sistema que pudesse ser encontrado de fato na realidade. Os parâmetros de simulação foram escolhidos de forma arbitrária, sem uma correspondência com algum fluido real. Os autores também não foram criteriosos ao afirmarem estar simulando um microcanal.

4 METODOLOGIA

Neste capítulo, será descrita a forma de se implementar o MBR, bem como um algoritmo geral de implementação. Após isso, será realizada uma discussão sobre unidades no contexto do MBR. Também serão apresentadas as condições de contorno utilizadas nas simulações deste trabalho. Por fim, será feita uma descrição detalhada das diversas simulações realizadas ao longo deste trabalho com relação à implementação. Nos próximos capítulos, os resultados obtidos nestas simulações serão objetos de análise.

4.1 Implementação do MBR

Ao longo do trabalho comentou-se que uma das vantagens do MBR em relação a outros métodos de CFD é a sua simplicidade computacional ou de implementação. Como o método possui uma complexa base teórica, pode ser difícil a primeira vista para o leitor perceber essa simplicidade. Desta forma, nesta subseção, será apresentado o processo de implementação de um problema relativamente simples tomado como exemplo. Para evitar confusão entre notações, ao referir-se a uma determinada implementação ao longo do texto, as variáveis computacionais serão apresentadas utilizando apóstrofes. Como exemplo, ao longo do texto a variável física densidade recebe o símbolo ρ . No código computacional não é utilizado o símbolo grego, e a variável é escrita por extenso. Ao longo do texto essa variável computacional será referida por ‘rho’.

Por simplicidade, não serão especificados os valores e unidades das grandezas físicas neste problema. Numa próxima subseção, será discutida em detalhes a questão de unidades no contexto do MBR. O problema físico que deseja-se modelar é uma caixa de fluido bidimensional. Um fluido incompressível está confinado dentro de uma caixa quadrada de dimensão L com quatro paredes sólidas. A parede superior possui uma velocidade horizontal fazendo com que o fluido, inicialmente estático, passe a circular dentro da caixa. A densidade inicial do fluido é ρ_0 . A velocidade horizontal da parede superior é fixada em U_w . Este sistema é esquematizado na Figura 13.

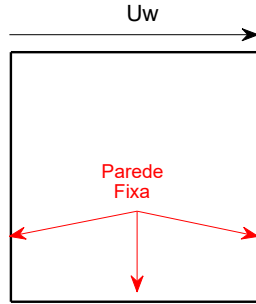
Nas simulações de fluido incompressível envolvendo o MBR, deve-se estabelecer uma velocidade inferior à velocidade do som na rede c_s . O ideal é respeitar a condição $Ma < 0.3$, em que Ma é o número de Mach, usualmente adotada na literatura como aproximação para escoamento incompressível (WHITE, 2018). Também assume-se que o problema é isotérmico. O primeiro passo é a inicialização dos campos de densidade e velocidade. Isto pode ser feito criando-se uma matriz no software Matlab para cada variável, usando por exemplo as funções ‘ones’ e ‘zeros’:

```
% Inicialização das variáveis macroscópicas
```

```
rho = rho0*ones(N,N);
Ux = zeros(N,N);
Uy = zeros(N,N);
```

sendo ‘rho0’ = ρ_0 , ‘N’ o número de nós, ‘rho’ a matriz de densidade, ‘Ux’ a matriz de velocidade em x ; e ‘Uy’ a matriz de velocidade em y .

Figura 13 – Representação da caixa de fluido. Três paredes sólidas são fixas enquanto que a parede superior se move horizontalmente com velocidade U_w .



Fonte: Elaborado pelo autor.

Com a definição dos campos iniciais de densidade e velocidade, é necessário inicializar as componentes da função de distribuição f_i em cada ponto do domínio. Para o caso bidimensional, a rede D2Q9 implica em nove componentes f_i para cada posição. Uma possibilidade de implementação é criar uma única matriz f da seguinte forma: ‘f=zeros(N,N,9)’, ou seja, para cada posição há 9 componentes que podem ser especificadas. Diferentes estratégias de inicialização são relatadas na literatura, isto será discutido mais adiante neste trabalho. Uma forma relativamente simples que pode ser aplicada em alguns casos é assumir a função de distribuição como sendo igual à função de equilíbrio no instante inicial, ou seja, $f_i(t = 0, x, y) = f_i^{eq}(t = 0, x, y)$. Note-se que a função de equilíbrio depende apenas das variáveis densidade e velocidade. Assim, a determinação de f_i em cada ponto é feita através da utilização da Equação (2.20):

$$\begin{aligned} f_i(t = 0, x, y) &= f_i^{eq}(t = 0, x, y) \\ &= w_i \rho(t = 0, x, y) \left(\frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} u_\alpha(t = 0, x, y) + \frac{(c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta})}{2c_s^4} u_\alpha(t = 0, x, y) u_\beta(t = 0, x, y) \right), \end{aligned} \quad (4.1)$$

Após a inicialização da função de distribuição, a sua evolução temporal é regida pela EMBR, dada pela Equação (2.24). Para facilitar a sua implementação, esta equação é aplicada em duas etapas. Este procedimento é amplamente utilizado na literatura. A primeira etapa é chamada de passo de colisão, em que atualiza-se a função de distribuição localmente:

$$f_i^*(t, \mathbf{x}) = f_i(t, \mathbf{x}) + \Omega(f_i, f_i^{eq}) \Delta t, \quad (4.2)$$

sendo f^* chamada de função colidida. Após este passo, é aplicada a etapa de propagação. Neste processo, cada componente f_i^* da função colidida na posição (x, y) é transladada/propagada para o nó adjacente $(x + c_{ix}\Delta t, y + c_{iy}\Delta t)$ de acordo com a direção do vetor \mathbf{c}_i :

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i\Delta t) = f_i^*(t, \mathbf{x}). \quad (4.3)$$

Note-se que a junção das Equações (4.2) e (4.3) é equivalente à EMBR dada pela Equação (2.24). Alguns autores como Guo e Shu (2013, p. 12) e Krüger *et al.* (2017, p. 66) definem o passo de colisão exatamente da maneira mostrada neste texto. Outros optam por inverter a ordem do passo de propagação com o de colisão (SUCCI, 2001, p. 19). Computacionalmente este procedimento pode ser aplicado de maneira relativamente simples. No software Matlab, pode-se criar uma matriz para a função colidida ‘fc = zeros(N,N,9)’. O passo de colisão considerando o operador BGK é calculado da seguinte maneira no Matlab:

```
% Passo de colisão (usando operação vetorial do Matlab)
fc = f + omega*(f-feq);
```

sendo a variável computacional ‘omega’ igual à razão entre o passo de tempo Δt e o tempo de relaxação τ , ou seja $\omega = \Delta t/\tau$. A matriz da função de equilíbrio ‘feq’ é calculada usualmente por meio da Equação (2.20).

O passo de propagação deve ser executado para cada índice ‘i’. No matlab, este passo pode ser implementado com o auxílio da função ‘mod’. O comando ‘mod(a,b)’ retorna o resto da divisão inteira entre ‘a’ e ‘b’ (para ‘a’ e ‘b’ inteiros). Assim, a etapa de propagação pode ser implementada como:

```
% Passo de Propagação
cx = [1 0 -1 0 1 -1 -1 1 0];
cy = [0 1 0 -1 1 1 -1 -1 0];
for indx = 1:N
    for indy = 1:N
        for i = 1:9
            posx = 1 + mod(indx+cx(i)+N-1,N);
            posy = 1 + mod(indy+cy(i)+N-1,N);
            f( posx, posy, i ) = fc( indx, indy, i );
        end
    end
end
end
% 1 + mod(indx+cx(i)+N-1,N) = indx+cx(i) se 0<indx+cx(i)<N+1
```

```
% 1 + mod(indx+cx(i)+N-1,N) = 1 se indx+cx(i) = N+1  
% 1 + mod(indx+cx(i)+N-1,N) = N se indx+cx(i) = 0
```

Agora será explicado o porque usar a função ‘mod’. Para cada índice ‘i’, as componentes ‘cx(i)’ e ‘cy(i)’ formam um vetor que liga um determinado nó a algum de seus nós adjacentes conforme a rede D2Q9. No passo de propagação, as funções de distribuição são deslocadas por uma quantidade $c_i \Delta t$ em relação a sua posição original. Como computacionalmente trabalha-se com índices que indicam uma determinada posição, ‘cx(i)’ e ‘cy(i)’ assumem apenas os valores -1, 0, 1. Desta forma nas bordas, a soma ‘indx+cx(i)’ pode retornar um valor não válido. Por exemplo, se para um determinado índice a variável ‘cx(i)’ assume o valor -1, então ‘indx’ não pode assumir o valor 1, pois ‘indx+cx(i)’ retornaria 0, o que não é uma posição válida para o vetor no Matlab. Fisicamente, isto está relacionado ao fato de que algumas componentes da função distribuição viajariam das bordas para a além da fronteira física. Como estes nós não estão definidos, a soma ‘indx+cx(i)’ retornaria um índice inválido. A função ‘mod’ resolve o problema direcionando essa função de distribuição para a borda oposta.

A utilização da função ‘mod’ permite uma formulação concisa para o passo de propagação com a utilização de um único laço ‘for’. O fato desta estratégia atribuir valores incorretos na solução da borda oposta não é um problema, pois de qualquer maneira seria necessária a utilização de condições de contorno. A função de distribuição viaja de uma posição do domínio para outra. Nas bordas, algumas dessas informações são desconhecidas pois não há uma parte do domínio nas redondezas de onde deveria vir a função distribuição. Desta forma, se faz necessária a utilização de uma condição de contorno para a função de distribuição. As condições de contorno serão explicadas em mais detalhes numa próxima subseção.

No caso em análise, o fluido está confinado num recipiente fechado. Para as paredes fixas, uma condição apropriada seria a de parede sólida com não-deslizamento e velocidade igual a zero. Uma condição deste tipo chama-se *Bounce-Back*, cuja implementação para a fronteira inferior fica:

```
% Exemplo Bounce-Back Fronteira Inferior  
for indx = 1:N  
    f(indx,1,2) = fc(indx,1,4);  
    f(indx,1,5) = fc(indx,1,7);  
    f(indx,1,6) = fc(indx,1,8);  
end
```

Para a fronteira superior é necessária a utilização de uma condição de não-deslizamento

porém, deve-se atribuir uma velocidade ao fluido igual à velocidade da parede. Isto pode ser feito através de uma correção no *Bounce-Back*:

```
% Exemplo Bounce-Back com velocidade - Fronteira Superior
for indx = 1:N
    f(indx,N,4) = fc(indx,N,2) - 2*w(2)*rho0*cx(2)*Uw/cs2;
    f(indx,N,7) = fc(indx,N,5) - 2*w(5)*rho0*cx(5)*Uw/cs2;
    f(indx,N,8) = fc(indx,N,6) - 2*w(6)*rho0*cx(6)*Uw/cs2;
end
```

sendo que vetor ‘w’ contém os pesos da rede e ‘cs2’ é uma variável que armazena o quadrado da velocidade do som $c_s^2 = 1/3(\Delta x/\Delta t)^2$. Estas condições de contorno serão explicadas em mais detalhes nas próximas subseções. Por enquanto, limitou-se apenas em apresentar a implementação de uma versão delas. Após as etapas de colisão, propagação e aplicação das condições de contorno, completou-se a evolução temporal da função de distribuição num passo de tempo. Para se obter as variáveis macroscópicas neste novo instante de tempo, basta utilizar os momentos definidos pelas Equações (2.23a) e (2.23b) que não passam de operações algébricas envolvendo a função de distribuição:

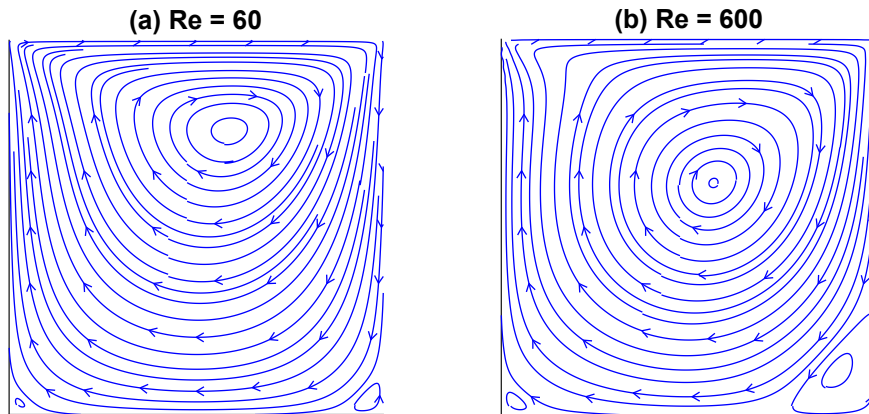
```
% Cálculo da variáveis macroscópicas
temp1 = zeros(N,N); temp2 = zeros(N,N); temp3 = zeros(N,N);
for i = 1:9
    temp1 = temp1 + f(:,i);
    temp2 = temp2 + (cx(i)*dx/dt)*f(:,i);
    temp3 = temp3 + (cy(i)*dx/dt)*f(:,i);
end
rho = temp1; Ux = temp2./rho; Uy = temp3./rho;
% velocidade da rede  $c_{ix}$  é equivalente a  $cx(i)*dx/dt$ 
% velocidade da rede  $c_{iy}$  é equivalente a  $cy(i)*dx/dt$ 
```

Ao se repetir o processo pode-se obter a solução macroscópica para qualquer instante de tempo t desejado. Na Figura 14 são apresentados resultados de simulações da caixa de fluido para dois números de Reynolds distintos.

4.2 Algoritmo de solução do MBR

Como descrito na subseção anterior, embora o MBR possua uma robusta e complexa base teórica, a sua implementação é relativamente simples e envolve poucas linhas de código. O método basicamente se divide em inicialização, cálculo da função de equilíbrio, passo de colisão, passo de propagação, condições de contorno e cálculo das variáveis

Figura 14 – Resultado da simulação da caixa de fluido para um tempo $t^* = tU_w/L = 200$ considerando os números de Reynolds: (a) $Re = 60$; (b) $Re = 600$.



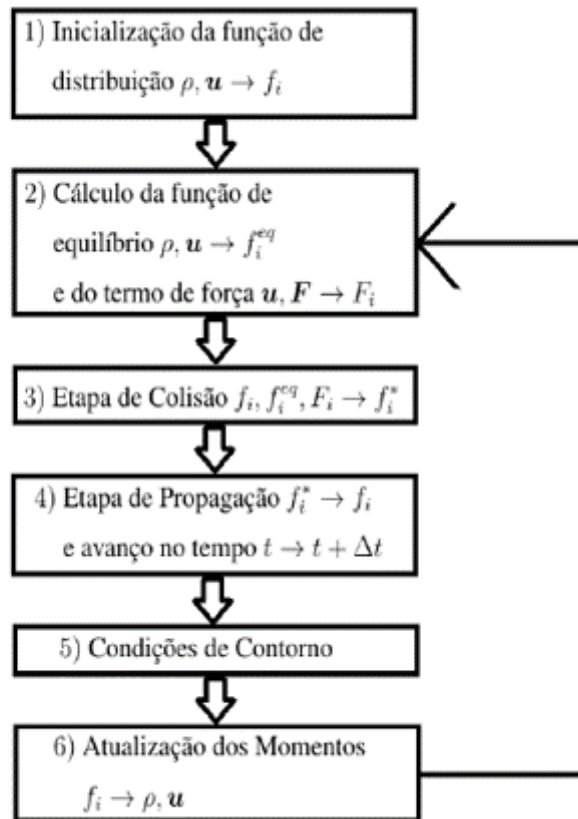
Fonte: Elaborado pelo autor.

macroscópicas. A função de equilíbrio é calculada a partir do conhecimento dos campos de densidade e velocidade. Como visto na subseção anterior, os passos de colisão e propagação envolvem poucas linhas de código e também são relativamente simples. As condições de contorno costumam envolver apenas operações algébricas com as funções de distribuição e variáveis macroscópicas que se desejam impor nos nós das fronteiras. As variáveis macroscópicas também são calculadas a partir de operações algébricas envolvendo as funções de distribuição como, por exemplo, o cálculo da densidade que consiste basicamente em somar todas as componentes f_i num determinado nó. Na Figura 15 é apresentado um algoritmo com as etapas de implementação do método.

4.3 Unidades de rede

Na solução do problema da caixa de fluido, omitiu-se a menção aos valores e unidades dos parâmetros utilizados na simulação. Isto ocorreu porque o MBR possui uma grande particularidade na questão das unidades, o que será discutido em mais detalhes nesta subseção. Usualmente num problema físico a ser resolvido, as variáveis de interesse são especificadas num certo sistema de unidades, como por exemplo o sistema internacional (SI). Também pode-se trabalhar com as variáveis formuladas adimensionalmente (ver seção 4.5.1). No SI, a grandeza comprimento L possui como unidade o metro (de símbolo m). O tempo t possui unidade de segundos (s). As variáveis de interesse costumam ser avaliadas continuamente no espaço e no tempo. Quando se utiliza um método numérico para se resolver um problema físico, as variáveis não são mais avaliadas continuamente, mas num conjunto finito de pontos (nós) no espaço e no tempo. Estes então possuem um espaçamento Δx entre si, e as variáveis são resolvidas entre instantes de tempos espaçados por Δt . No caso de uma malha regular, estes espaçamentos são constantes. Se L e t são especificados segundo o SI, então Δx possui unidade de metro e Δt de segundo.

Figura 15 – Algoritmo geral de implementação do MBR.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A particularidade do MBR está no fato que a grande maioria dos autores preferem trabalhar em um outro sistema de unidades em que estas são chamadas de unidades de rede. Basicamente, o método é resolvido num sistema em que $\Delta x = 1$ e $\Delta t = 1$. Para ilustrar melhor, considere que no problema da caixa, o comprimento desta seja L . Se este comprimento for discretizado em N número de nós, então $L = N\Delta x$. Porém, como $\Delta x = 1$, então $L = N$. Assim, nas unidades de rede a magnitude de um certo comprimento é equivalente ao número de nós utilizado para discretizá-lo. Para distinguir as unidades de rede de outros sistemas como SI, o sistema imperial britânico, entre outros, estes sistemas mais convencionais serão chamados genericamente de unidades físicas.

Não há nenhum fator que obrigue um usuário do método a adotar tal procedimento. É possível resolver todas as variáveis do método em unidades físicas. Também é possível trabalhar com o MBR numa forma adimensional, esta formulação será explorada em trabalhos futuros. Pode-se presumir que este procedimento (unidades de rede) seja adotado por uma certa conveniência. No MBR, muitas variáveis estão intrinsecamente conectadas aos espaçamentos Δx e Δt . Por exemplo, a viscosidade cinemática está relacionada ao tempo de relaxação $\nu = c_s^2(\tau - \Delta t/2)$. Por motivos de estabilidade do método, a viscosidade não

pode ser negativa, desta forma, obrigatoriamente deve-se respeitar $\tau/\Delta t > 1/2$ (KRÜGER *et al.*, 2017, p. 129). Outra condição importante é que $\tau/\Delta t$ não deve ser muito superior a 1, pois isto torna os erros numéricos do método mais significativos (para o operador BGK) (KRÜGER *et al.*, 2017, p. 147). De maneira geral, nos trabalhos de MBR-BGK encontrados na literatura $\tau < 2$, sendo na maioria dos casos $\tau < 1$. Desta forma, é válida a seguinte relação:

$$\frac{\tau}{\Delta t} = O(1). \quad (4.4)$$

Outra grandeza que depende da malha utilizada é a velocidade do som c_s . Como já visto $c_s^2 = 1/3(\Delta x/\Delta t)^2$. Para simulações de fluido incompressível é importante se manter a velocidade de escoamento U abaixo de um certo valor dado pela condição $Ma = U/c_s < 0.3$. Esta condição é equivalente a:

$$\frac{U\Delta t}{\Delta x} < \frac{0.3}{\sqrt{3}}. \quad (4.5)$$

Conclui-se que diversas variáveis devem ser especificadas levando-se em consideração os espaçamentos da malha computacional. Por conveniência, pode-se resolver o problema considerando $\Delta x = 1$ e $\Delta t = 1$. Desta forma, valores apropriados de τ e U podem ser especificados diretamente sem se preocupar com Δx e Δt .

Para ilustrar melhor como é o procedimento de solução em unidades de rede, o problema da caixa de fluido mostrado na Figura 14.b será usado como exemplo. Considere que no sistema físico, o comprimento é $L_f = 1$ m, a velocidade da parede superior é $U_f = 1$ m/s e a viscosidade cinemática é $\nu_f = 1/600$ m²/s. Aqui, os parâmetros nas unidades físicas estão representados com um subscrito f como, por exemplo, L_f . Nas unidades de rede estes mesmos parâmetros são chamados de L_u , U_u e ν_u . O primeiro passo para resolver o problema em unidades de rede é encontrar os adimensionais importantes para o problema físico dado. Neste caso, o adimensional que define o problema é o número de Reynolds. Assim, é necessário respeitar a seguinte relação:

$$Re = \frac{L_u U_u}{\nu_u} = \frac{L_f U_f}{\nu_f} = 600. \quad (4.6)$$

Considere que o domínio seja discretizado com 200 nós em cada direção, ou seja, $N = 200$. Assim o espaçamento físico entre os nós é dado por $\Delta x_f = L_f/N$. Em unidades de rede essa relação é $L_u = N\Delta x_u$. Como $\Delta x_u = 1$ por definição, $L_u = N = 200$. Agora, basta definir U_u e ν_u que resultem em Reynolds de 600. A hipótese de escoamento incompressível exige que $Ma = U_u/c_{s,u} < 0.3$. Neste caso adotou-se $U_u = 0.1$, o que implica em $\nu_u = 1/30$. O parâmetro de relaxação τ_u é dado pela seguinte equação:

$$\nu_u = c_{s,u}^2 \left(\tau_u - \frac{\Delta t_u}{2} \right), \quad (4.7)$$

como $c_{s,u}^2 = 1/3$ em unidades de rede e $\Delta t_u = 1$, obtém-se $\tau_u = 0.6$. O único ponto restante para que a simulação possa ser realizada é saber o quanto um passo de tempo de simulação

representa em unidades físicas. Isto pode ser calculado por:

$$\frac{\Delta t_f}{\Delta t_u} = \frac{U_u \Delta x_f}{U_f \Delta x_u}, \quad (4.8)$$

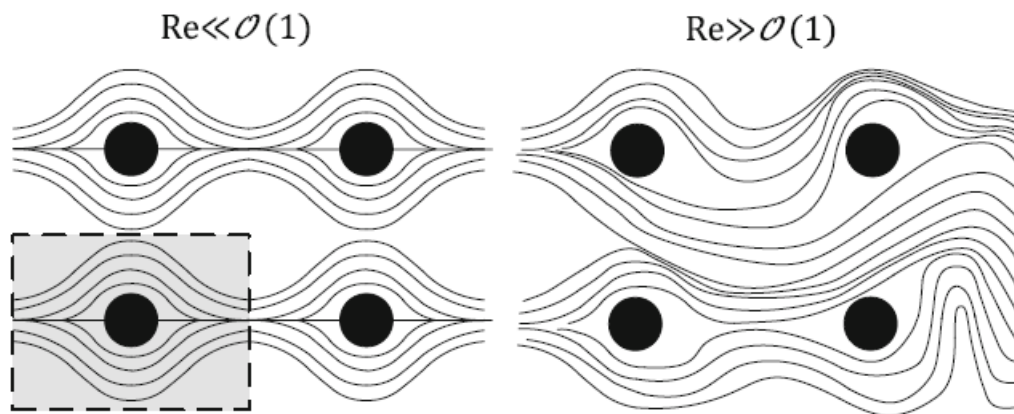
o que implica em $\Delta t_f = 1.5 \times 10^{-3}$ s. Com todas estas informações é possível estabelecer a simulação e rodá-la até qualquer instante de tempo físico desejado. Nas simulações numéricas realizadas ao longo deste trabalho, adotou-se as unidades de rede. Por simplificação, variáveis como por exemplo velocidade e viscosidade L_u e ν_u neste sistema serão referidas apenas como L e ν .

4.4 Condições de contorno

4.4.1 Condição periódica

A condição de contorno mais simples de se aplicar é a periódica. Neste tipo de condição, assume-se que as propriedades do fluido na saída do domínio são iguais as da entrada e vice-versa. Como se o fluido que estivesse saindo por uma fronteira, reentrasse no domínio pela fronteira oposta. Fisicamente este tipo de solução é mais adequada em problemas em que o padrão de escoamento se repete diversas vezes ao longo de um domínio.

Figura 16 – Escoamento ao redor de um conjunto de cilindros para dois números de Reynolds.



Fonte: Elaborado por Krüger *et al.* (2017, p. 170).

Na Figura 16 são apresentados dois escoamentos em sistemas com mesma geometria. Os dois sistemas são compostos por um conjunto simétrico de cilindros. No primeiro caso, mostrado a esquerda, o número de Reynolds é muito baixo o que configura um escoamento potencial, que é linear. A solução para um cilindro isolado pode ser sobreposta para se obter a solução do sistema completo. Como consequência, o padrão de escoamento também é periódico. No segundo caso, mostrado à direita, o número de Reynolds é alto o suficiente para que vórtices comecem a se formar ao redor dos cilindros. Quando os efeitos inerciais de

um escoamento são muito superiores aos efeitos viscosos, pequenas perturbações começam a se propagar quebrando a simetria e periodicidade do escoamento.

O exemplo acima evidencia que não basta a geometria do problema ser periódica para que um escoamento se configure como periódico e a respectiva condição de contorno possa ser usada. Um ponto relevante da condição de contorno periódica é que ela implica em conservação de massa e quantidade de movimento, pois a massa que sai do sistema está também entrando na fronteira oposta com a mesma velocidade.

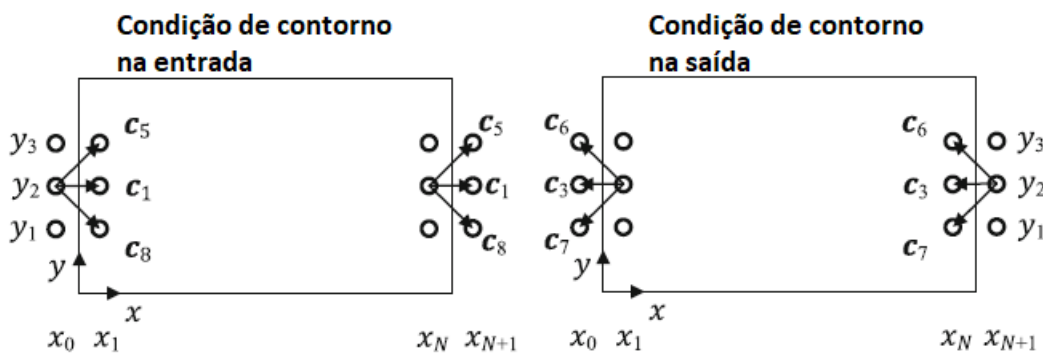
Para um sistema de uma única dimensão e comprimento L , a condição periódica é relativamente simples de ser aplicada nas variáveis macroscópicas. De acordo com Krüger *et al.* (2017, p. 171):

$$\rho(x, t) = \rho(x + L, t), \quad (4.9a)$$

$$\rho u(x, t) = \rho u(x + L, t). \quad (4.9b)$$

No contexto do MBR, a variável a ser resolvida é a função de distribuição. Neste caso a condição continua sendo relativamente simples, pois basta considerar que a função de distribuição que está saindo de uma fronteira do domínio durante o passo de propagação, estará adentrando ao domínio na fronteira oposta. Este processo pode ser representado na Figura 17.

Figura 17 – Esquema representando a condição de contorno periódica aplicada às funções de distribuição. As funções que se propagam para fora da fronteira são as mesmas que adentram ao sistema na fronteira oposta.



Fonte: Elaborado por Krüger *et al.* (2017, p. 172).

Nesta figura, considera-se que o domínio computacional esteja definido entre os nós x_1 e x_N . Os nós em x_0 e x_{N+1} são nós virtuais que são utilizados para auxiliar na aplicação da condição de contorno. À esquerda da entrada do domínio, a função de distribuição deveria se propagar da posição x_0 até x_1 . Como o escoamento é periódico, a informação contida no nó em x_0 é equivalente a da saída do domínio em x_N . Apenas é necessário definir em x_0 as funções de propagação que se movem para a direita, pois apenas estas

irão adentrar ao domínio. Desta forma, a condição de contorno nesta localidade é escrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} f_1^*(x_0, y_j, t) &= f_1^*(x_N, y_j, t), \\ f_5^*(x_0, y_j, t) &= f_5^*(x_N, y_j, t), \\ f_8^*(x_0, y_j, t) &= f_8^*(x_N, y_j, t), \end{aligned} \quad (4.10)$$

para qualquer índice j . Note-se que a condição de contorno foi aplicada na função colidida f^* que então irá propagar-se para dentro do domínio. O mesmo raciocínio aplica-se a fronteira oposta porém, nesse caso, considera-se as funções de distribuição que se propagam para a direita:

$$\begin{aligned} f_3^*(x_{N+1}, y_j, t) &= f_3^*(x_1, y_j, t), \\ f_6^*(x_{N+1}, y_j, t) &= f_6^*(x_1, y_j, t), \\ f_7^*(x_{N+1}, y_j, t) &= f_7^*(x_1, y_j, t). \end{aligned} \quad (4.11)$$

O auxílio dos nós virtuais é usado apenas para fins didáticos, na explicação do conceito desta condição de contorno. Do ponto de vista de implementação não é necessária a sua utilização. Na subseção 4.1 quando implementou-se o passo de propagação, comentou-se que o uso da função ‘mod’ já direciona a função de distribuição que está saindo de uma fronteira para a fronteira oposta. De fato, aquela implementação do passo de propagação, como efeito colateral, já aplica a condição de contorno periódica naturalmente não sendo necessária nenhuma implementação adicional. Uma outra forma de implementar o passo de propagação no Matlab, que também já aplica automaticamente a condição de contorno periódica, é através do uso da função ‘circshift’ para deslocar os elementos de uma matriz em uma direção especificada. A implementação neste caso é dada pelo seguinte trecho de código:

```
% Passo de Propagação (com uso de circshift)
for i = 1:9
    f( :, :, i ) = circshift( fc( :, :, i ), [cx(i), cy(i), 0] );
end
```

4.4.2 Bounce-Back

No problema da caixa de fluido, utilizou-se da condição de contorno conhecida como *Bounce-Back* para implementar-se uma parede imóvel. Aqui, este procedimento será explicado em mais detalhes. Como já discutido anteriormente, a função de distribuição f_i está associada às partículas que se propagam com velocidade \mathbf{c}_i . Agora, considera-se que f_j esteja associada às partículas com velocidade oposta a \mathbf{c}_i , ou seja $\mathbf{c}_j = -\mathbf{c}_i$. O princípio do *Bounce-Back* consiste em afirmar que as partículas colididas f_i^* se propagando para fora da fronteira colidem contra a parede sólida e retornam com velocidade espelhada \mathbf{c}_j

(KRÜGER *et al.*, 2017, p. 179):

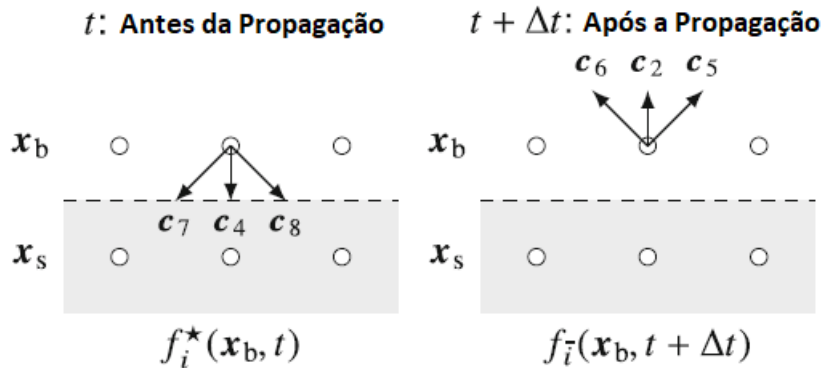
$$f_j(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}_b, t). \quad (4.12)$$

Para a parede inferior escreve-se:

$$\begin{aligned} f_2(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) &= f_4^*(\mathbf{x}_b, t), \\ f_5(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) &= f_7^*(\mathbf{x}_b, t), \\ f_6(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) &= f_8^*(\mathbf{x}_b, t), \end{aligned} \quad (4.13)$$

sendo \mathbf{x}_b a posição da fronteira (do inglês *boundary*). Este princípio está ilustrado na Figura 18. Observa-se que as funções colididas f_4^* , f_7^* e f_8^* estão relacionadas a partículas que se propagam para baixo no instante de tempo t . Estas partículas então colidem com a parede e invertem a sua velocidade. No instante de tempo $t + \Delta t$ estes conjuntos de partículas estão representadas pelas funções f_2 , f_5 e f_6 . O mesmo raciocínio pode ser aplicado para as outras fronteiras.

Figura 18 – Esquematização do princípio do *Bounce-Back*. No caso de uma parede estática, considera-se que as partículas que se propagam em direção a parede colidem e retornam com velocidades espelhadas.



Fonte: Elaborado por Krüger *et al.* (2017).

No caso em que a parede se move com uma velocidade \mathbf{u}_w , a formula do *Bounce-Back* exige uma correção (KRÜGER *et al.*, 2017, p. 180):

$$f_j(\mathbf{x}_b, t + \Delta t) = f_i^*(\mathbf{x}_b, t) - 2w_i\rho_w \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}_w}{c_s^2}, \quad (4.14)$$

sendo ρ_w a densidade do fluido na parede sólida. Como o MBR é um método compressível a densidade do fluido pode se alterar ao longo do tempo. No problema da caixa de fluido, como utilizou-se da hipótese de escoamento incompressível $Ma < 0.3$, pode-se considerar com boa precisão que a densidade do fluido na parede será igual a densidade inicial definida no domínio $\rho_w = \rho_0$.

4.5 Casos Teste

Ao longo deste trabalho desenvolveu-se diversos estudos numéricos. Alguns deles envolveram comparação entre diferentes esquemas; em outros foram testadas possíveis modificações no método do pseudopotencial. Desta forma, diversos casos testes foram necessários com o propósito de validação numérica ou de estudar um determinado fenômeno físico com o método do pseudopotencial. Para simplificar a leitura dos capítulos de resultados, optou-se por definir a implementação de cada caso teste previamente nesta seção.

A motivação para o uso de cada caso teste ficará clara apenas nos capítulos de resultados quando o seu emprego for requerido dentro do contexto do estudo desenvolvido. Assim, para alguns leitores pode ser entediante a tarefa de ler a implementação de cada caso sem necessariamente conhecer a motivação por trás do seu uso em mais detalhes. Desta forma, o leitor que assim desejar, pode passar a leitura diretamente para a seção de resultados e retornar para esta seção apenas quando tiver interesse em conhecer melhor os detalhes de implementação.

4.5.1 Equações de Estado

O MBR tradicional para sistemas monofásicos possui uma equação de estado específica $p_{EOS} = \rho c_s^2$ que representa um gás ideal isotérmico. A equação de um gás ideal é $p_{EOS} = \rho R_g T$, e no caso isotérmico $R_g T = c_s^2$ com a velocidade do som constante. O método do pseudopotencial envolve a substituição desta equação de estado por uma que represente um fluido não-ideal, além de adicionar outros termos no tensor de pressões. Uma das mais utilizadas na literatura do MBR e que será a adotada neste trabalho é a equação de Carnahan-Starling (C-S), ou apenas E-CS:

$$p_{EOS} = \rho R_g T \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2. \quad (4.15)$$

Os parâmetros a , b e R_g dependem das propriedades críticas do fluido: $a = 3.8533p_c/\rho_c^2$; $b \approx 0.5218/\rho_c$; e $R_g = 2.7864p_c/(\rho_c T_c)$. No sistema internacional (SI) estes parâmetros possuem as seguintes unidades: $[a] = J \cdot m^3 \cdot kg^{-2}$; $[b] = m^3 \cdot kg^{-1}$; e $[R] = J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$. Ao substituir estas relações para a , b e R_g na Equação (4.15), obtém-se a seguinte expressão:

$$p_r = 2.7864\rho_r \left[T_r \frac{1 + 0.1305\rho_r + (0.1305\rho_r)^2 - (0.1305\rho_r)^3}{(1 - 0.1305\rho_r)^3} - 1.3829\rho_r \right], \quad (4.16)$$

sendo $p_r = p_{EOS}/p_c$, $\rho_r = \rho/\rho_c$ e $T_r = T/T_c$ as propriedades termodinâmicas reduzidas do fluido. Como pode-se observar, esta equação não possui nenhum parâmetro livre. Ou seja, para qualquer escolha de a , b e R_g , a relação entre as propriedades reduzidas $p_r = \mathcal{F}(\rho_r, T_r)$ é a mesma. Isto implica que a equação C-S não pode ser utilizada para modelar qualquer

fluido, mas apenas aqueles que possuem uma relação entre propriedades reduzidas similar a esta.

Uma outra limitação, mas de caráter prático, diz respeito à escolha dos valores dos parâmetros a , b e R_g . A velocidade do som no fluido v_s é calculada por meio de:

$$v_s^2 = \left(\frac{\partial p_{EOS}}{\partial \rho} \right)_T = \frac{p_c}{\rho_c} \left(\frac{\partial p_r}{\partial \rho_r} \right)_{T_r} = \frac{a}{b} \mathcal{F}(\rho_r, T_r), \quad (4.17)$$

sendo que $\mathcal{F}(\rho_r, T_r)$ representa uma função genérica que depende de ρ_r e T_r . Assim para uma determinada densidade e temperatura reduzidas, a velocidade do som depende apenas dos parâmetros a e b . Se esta velocidade for muito alta, a simulação pode tornar-se instável. Note-se que a velocidade de propagação da função de distribuição de um nó para o outro em um instante de tempo é igual a 1 em unidades de rede. Esta é a máxima velocidade com o qual uma informação consegue se propagar no domínio. Desta forma, faz-se necessário realizar uma conversão conveniente de sistema de unidades de forma que a velocidade do som em unidades de rede tenha uma magnitude apropriada.

Ao utilizar-se da hipótese de escoamento incompressível para baixos números de Mach, não é necessário respeitar a velocidade do som real do problema. Isto ocorre porque, para problemas reais, as velocidades do fluido podem ser extremamente menores que a velocidade do som ($Ma \ll 1$) e reproduzir este número de Mach em uma simulação seria muito custoso. Assim, pode-se adotar uma velocidade do som conveniente na simulação, mas que respeite a condição $Ma < 0.3$. Para ilustrar esta questão será analisado um exemplo.

Considere que um determinado fluido é bem modelado pela E-CS com certos valores a , b e R em unidades físicas. No instante inicial, uma gota de líquido deste fluido está em repouso num meio composto pelo vapor do mesmo fluido. Considere-se que o fluido está a uma temperatura T e as densidades de fase são as de equilíbrio termodinâmico ρ_v e ρ_l . A partir deste instante, a gota começa a cair devido ao efeito da aceleração gravitacional g e atinge no instante de tempo t a velocidade de queda U . Supõe que U seja muito menor que a velocidade do som $U \ll v_s$ e, assim, o escoamento se aproxima do limite de incompressibilidade. A Figura 19 esquematiza este problema.

Após uma análise prévia, chegou-se à conclusão que as variáveis físicas relevantes para descrição deste problema são: o diâmetro da gota D ; a aceleração gravitacional g ; as viscosidades cinemáticas do vapor ν_v e do líquido ν_l ; as densidades do vapor ρ_v e do líquido ρ_l ; e a tensão superficial γ . Agora, considere-se que é desejado saber a velocidade de queda U no instante t . Neste caso, esta velocidade será função das variáveis listadas:

$$U = f(t, D, g, \nu_v, \nu_l, \rho_v, \rho_l, \gamma), \quad (4.18)$$

ou seja, U é uma função de 8 variáveis. Usando o teorema Pi de Buckingham (WHITE, 2018,

p. 292), é possível reduzir as variáveis de influência nos seguintes grupos adimensionais:

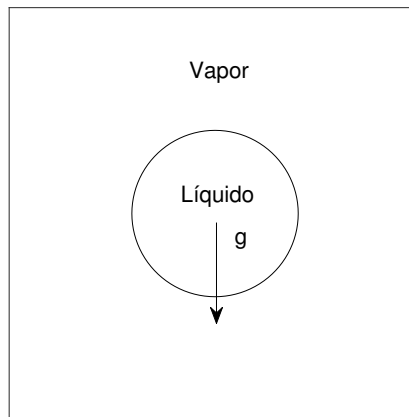
$$\frac{U}{\sqrt{Dg}} = f \left(t\sqrt{\frac{g}{D}}, \frac{\sqrt{gD^3}}{\nu_l}, \frac{\nu_v}{\nu_l}, \frac{\rho_l}{\rho_v}, \frac{\rho_l g D^2}{\gamma} \right). \quad (4.19)$$

Como está sendo considerado $Ma \ll 1$, desprezou-se o efeito do número de Mach. Esta equação implica que a solução U/\sqrt{Dg} depende apenas dos adimensionais:

$$\Pi_1 = t\sqrt{\frac{g}{D}}; \quad \Pi_2 = \frac{\sqrt{gD^3}}{\nu_l}; \quad \Pi_3 = \frac{\nu_v}{\nu_l}; \quad \Pi_4 = \frac{\rho_l}{\rho_v}; \quad \Pi_5 = \frac{\rho_l g D^2}{\gamma}. \quad (4.20)$$

Assim, para que o problema seja resolvido de forma satisfatória com o MBR, basta garantir que os mesmos adimensionais da Equação (4.20) sejam obtidos a partir das variáveis em unidades de rede. Isto garantirá a equivalência da solução em unidades de rede com a solução do problema físico.

Figura 19 – Esquematização da gota de líquido caindo num meio de vapor sob a ação de um campo gravitacional g .



Fonte: Elaborado pelo autor.

A relação entre o espaçamento Δx e o passo de tempo Δt em unidades físicas e de rede depende das velocidades em unidades físicas U_f e em unidades de rede U_u :

$$\frac{\Delta x_f}{\Delta t_f} \frac{\Delta t_u}{\Delta x_u} = \frac{\Delta x_f}{\Delta t_f} = \frac{U_f}{U_u}, \quad (4.21)$$

sendo que na expressão acima substituiu-se $\Delta x_u = 1$ e $\Delta t_u = 1$. A relação entre as variáveis a e b em unidades físicas e de rede é:

$$\frac{a_f}{b_f} = \frac{a_u}{b_u} \left(\frac{\Delta x_f}{\Delta t_f} \right)^2 \left(\frac{\Delta t_u}{\Delta x_u} \right)^2 = \frac{a_u}{b_u} \left(\frac{\Delta x_f}{\Delta t_f} \right)^2. \quad (4.22)$$

Porém, como as variáveis a e b estão relacionadas a velocidade do som através da Equação (4.17), isto implica que está sendo mantido o mesmo número de Mach tanto em

unidades físicas quanto de rede. Dada a hipótese de incompressibilidade, não é necessário manter o mesmo número de Mach em unidades de rede. Supõe-se que, dados a_f e b_f , calcula-se que o número de Mach físico seja $Ma_f = 10^{-3}$. Porém, em unidades de rede não há a necessidade de manter esse número tão baixo, pois $Ma_l < 0.3$ já fornece boa aproximação para o escoamento incompressível.

A discussão acima, evidencia que, do ponto de vista da compressibilidade do problema, há uma liberdade na escolha dos valores de a e b em unidades de rede. Porém, antes de se definir qualquer valor, é necessário avaliar como estes parâmetros influenciam os grupos adimensionais da Equação (4.20), pois são estes que regem o problema. Se a escolha de a , b e R não influenciar estes adimensionais, então pode-se escolhê-los de forma arbitrária, respeitando-se $Ma < 0.3$. Observa-se que um destes adimensionais é a razão de densidades ρ_l/ρ_v . Porém, independentemente da escolha dos parâmetros a , b e R_g , para uma mesma temperatura reduzida, a E-CS fornece a mesma razão de densidades. Então, esta não depende da escolha dos parâmetros. Um outro adimensional que pode ser influenciado é $\Pi_5 = \rho_l g D^2 / \gamma$. A escolha do parâmetro b influencia ρ_c e, por consequência, o valor de ρ_l para uma dada temperatura reduzida. Entretanto, este adimensional pode ser ajustado pela escolha conveniente das outras variáveis como g , D e γ ; assim, a definição específica de a , b e R_g não é decisiva.

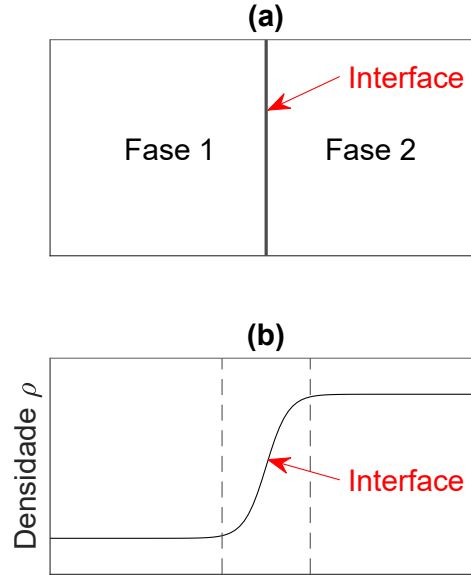
Concluindo, para muitos problemas não é necessário especificar os valores a , b e R_g em unidades físicas. Nestes casos, uma escolha arbitrária de a , b e R_g em unidades de rede que respeitem a hipótese de incompressibilidade pode ser feita sem que os adimensionais relevantes para o problema sejam afetados. Os valores mais comumente empregados na literatura são $b = 4$, $R_g = 1$ e $a \leq 1$. Para que o problema solucionado pelo MBR seja equivalente ao problema físico, basta fazer uma análise dimensional e encontrar os grupos adimensionais de relevância para o problema em questão. A manutenção destes grupos, garantirá a equivalência entre a solução numérica e o problema real. Neste trabalho, adotou-se $b = 4$, $R_g = 1$ e os valores de a serão especificados em cada problema nos capítulos de resultados.

4.5.2 Interface plana

O teste de interface plana talvez seja o teste bifásico mais simples de ser realizado. Ele consiste apenas em inicializar duas fases de densidades distintas separadas por uma interface plana (como mostrado na Figura 20.a) e performar a simulação até o equilíbrio se estabelecer. O intuito deste teste é verificar se, para uma determinada força de interação imposta ao fluido, as densidades de cada fase no equilíbrio são compatíveis com os valores esperados teoricamente. Como o MBR é um método de interface difusa, o perfil de densidades final se assemelha ao mostrado na Figura 20.b em que a densidade varia continuamente entre uma fase e outra. Neste caso, a interface possui uma certa espessura

ao invés de ser infinitesimalmente pequena.

Figura 20 – (a) Esquematização de duas fases separadas por uma interface plana. (b) Perfil de densidade difuso.



Fonte: Elaborado pelo autor.

O primeiro passo da modelagem envolve a escolha da equação de estado que represente o sistema. Como o teste da interface plana é utilizado para validação numérica do método e não para realmente se modelar um fluido real, há liberdade para se escolher uma equação conveniente. Aqui escolheu-se a E-CS, dada pela Equação (4.15). Os parâmetros b e R_g usados em todas as simulações já foram especificados na seção 4.5.1. O parâmetro a de cada simulação será especificado apenas nos capítulos de resultados. Como comentado, o intuito deste teste é apenas realizar uma validação numérica. Então, todas as variáveis serão especificadas em unidades de rede sem se preocupar com o problema físico em questão.

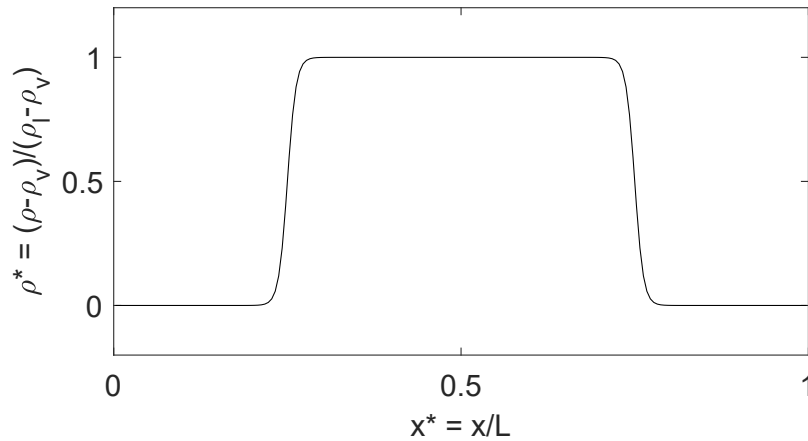
Para cada teste, uma malha com (N_x, N_y) nós será especificada, lembrando que em unidades de rede as dimensões do domínio são equivalentes ao número de nós $(L_x, L_y) = (N_x, N_y)$. O campo de densidades inicial precisa corresponder a duas fases, uma composta por vapor de densidade ρ_v e uma fase líquida de densidade ρ_l , separadas por uma interface. Para recriar o comportamento de interface difusa do método definiu-se o campo de densidades inicial utilizando a função tangente hiperbólica:

$$\rho(x, y) = \rho_v + \frac{\rho_l - \rho_v}{2} \left(\tanh \left[\frac{2(x - x_1)}{W} \right] - \tanh \left[\frac{2(x - x_2)}{W} \right] \right), \quad (4.23)$$

sendo W a espessura da interface. Os parâmetros x_1 e x_2 são as localizações das interfaces. Para ilustrar o resultado desta função, considerou-se um exemplo com domínio $(N_x, N_y) = (200, 1)$; $W = 5$; $(x_1, x_2) = (50, 150)$ e $(\rho_v, \rho_l) = (0.1, 1)$. O perfil de densidades calculado

com estes parâmetros usando a Equação (4.23) é mostrado na Figura 21. Aqui optou-se por manter a fase líquida no meio do domínio e a fase vapor nas laterais, diferentemente do que foi mostrado na Figura 20.a. Esta opção foi feita porque pretende-se utilizar condições de contorno periódicas nas bordas. Porém, um requisito para esta condição de contorno é que as propriedades nas duas bordas sejam iguais, pois é como se as fronteiras estivessem interligadas.

Figura 21 – Perfil de densidades obtido a partir da Equação (4.23).



Fonte: Elaborado pelo autor.

O sistema está em repouso no instante inicial; assim, o perfil de velocidades é nulo. O próximo passo é a inicialização da função de distribuição; aqui optou-se por inicializá-la igual a de equilíbrio dada pela Equação (2.20), pois esta pode ser diretamente calculada a partir dos campos macroscópicos. O método do pseudopotencial envolve o cálculo de uma força de interação e a sua respectiva implementação com algum esquema de força. Nos capítulos de resultados serão mencionados as forças e os esquemas utilizados em cada simulação. Porém, em comum está o cálculo do potencial de interação dado pela Equação (2.57) a partir da equação de estado. Como o teste de interface plana não impõe nenhuma condição severa de simulação, o operador de colisão BGK é suficiente para obter simulações estáveis. O tempo de relaxação τ será especificado em cada teste. Por fim, as simulações são executadas de acordo com o algoritmo descrito na seção 4.2 até atingir o equilíbrio. O critério usado para definir o equilíbrio é o seguinte:

$$\frac{\sum_i \sum_j |\rho_{i,j}(t) - \rho_{i,j}(t - 100)|}{\sum_i \sum_j |\rho_{i,j}(t)|} < 10^{-6}, \quad (4.24)$$

para todos os índices $1 \leq i \leq N_x$ e $1 \leq j \leq N_y$ dos nós que compõem a malha computacional.

4.5.3 Gota estática

A simulação de uma gota estática em equilíbrio é realizada com dois intuitos. O primeiro é medir a tensão superficial do método a uma determinada temperatura por

meio da relação de Young-Laplace. Este valor medido pode ser comparado com alguma predição teórica para verificar se o método está consistente. O segundo intuito é analisar como as densidades das fases variam com a curvatura da interface e se esta variação está de acordo com a teoria termodinâmica. Do ponto de vista de implementação, este teste é muito semelhante ao da simulação de uma gota estática. A única diferença é a função usada para inicializar o perfil de densidades. Neste caso, a função deve ser adaptada para inicializar uma gota ao invés de uma interface plana:

$$\rho(x, y) = \frac{\rho_l + \rho_g}{2} - \frac{\rho_l - \rho_g}{2} \tanh \left[\frac{2(R - R_0)}{W} \right], \quad (4.25)$$

sendo R_0 o raio inicial da gota e W novamente a espessura da interface. A distância radial de um determinado ponto do domínio é calculada como $R = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$, com (x_0, y_0) sendo a posição central do domínio computacional.

4.5.4 Oscilação suave de uma gota

O teste de oscilação de uma gota é muito semelhante ao teste anterior de uma gota estática do ponto de vista de implementação. Porém, ao invés de inicializada em formato circular, que já é de equilíbrio, a gota é inicializada em formato elíptico. Assim, a condição inicial do sistema é de não-equilíbrio e a gota oscila até o seu formato ficar completamente circular. A função geradora é igual a da Equação (4.25), porém aqui o raio inicial é uma função das coordenadas espaciais $R_0 = R_0(x, y)$ dada pelas seguintes relações:

$$R_0(\theta) = \frac{R_{min}}{\sqrt{1 - (e \cos(\theta))^2}}, \quad (4.26a)$$

$$\theta(x, y) = \arctan \left(\frac{y - y_0}{x - x_0} \right), \quad (4.26b)$$

$$e = \sqrt{1 - \left(\frac{R_{min}}{R_{max}} \right)^2}, \quad (4.26c)$$

com (x_0, y_0) sendo a posição central do domínio computacional. Nesta implementação, utilizou-se o operador MRT. Esta opção é baseada no fato que este termo de colisão é mais estável a baixas viscosidades. Isto é necessário neste teste dinâmico pois a viscosidade dissipa as oscilações rapidamente. A matriz de relaxação utilizada neste teste é dada por:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag} \left(1, 1.25, 1.25, 1, 1, 1, 1, \tau^{-1}, \tau^{-1} \right), \quad (4.27)$$

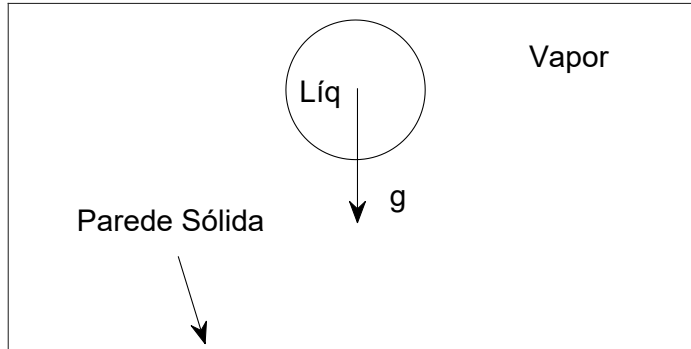
em que o tempo de relaxação τ será especificado no capítulo de resultados.

4.5.5 Colisão de uma gota contra uma parede

O teste de impacto de uma gota contra uma parede sólida é realizado para se avaliar a estabilidade do MBR-P. Neste teste, uma gota é inicializada a uma determinada

altura com velocidade nula que, a partir do instante inicial, cai por ação da gravidade em direção a uma parede sólida. O domínio computacional é dado por uma malha de (N_x, N_y) nós. A uma altura h em relação a parede sólida, uma gota de líquido de raio R é inicializada utilizando a Equação (4.25). Este teste é esquematizado na Figura 22.

Figura 22 – Esquema da condição inicial do teste de impacto contra uma parede. Uma gota estática é suspensa no vapor. Devido a ação da força gravitacional, a gota será acelerada em direção a parede sólida.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Impôs-se condições de contorno periódicas nas fronteiras laterais e condições de não-deslizamento nas fronteiras superior e inferior. Para esta última, utilizou-se o procedimento de regularização proposto por Latt *et al.* (2008). Esta escolha foi feita devido a maior estabilidade deste esquema para baixas viscosidades. Também é necessário definir as interações sólido-fluido. Por simplicidade, a força de interação agindo nas paredes sólidas é calculada normalmente da mesma forma que para os nós de fluido no interior do domínio, mas considerando que a densidade na parede é igual a densidade da fase vapor ρ_v . Isto é o mesmo que definir uma superfície hidrofóbica.

Novamente o operador MRT é utilizado com uma matriz de relaxação dada por:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag} \left(1, 1.25^{-1}, 1.25^{-1}, 1, 1, 1, 1, \tau^{-1}, \tau^{-1} \right), \quad (4.28)$$

em que τ é o tempo de relaxação relacionado à viscosidade cinemática $\nu = c_s^2(\tau - 0.5)$ em unidades de rede. Lembrando que a viscosidade é dada pela expressão $\nu = c_s^2(\tau_v - 0.5\Delta t)$, mas em unidades de rede $\Delta t = 1$. Neste trabalho, utilizou-se $(\rho_l - \rho_g)\tau = \tau_l(\rho - \rho_g) + \tau_v(\rho_l - \rho)$, em que τ_v e τ_l são os tempos de relaxação da fase vapor e líquido. Após a inicialização, as duas simulações são rodadas até 10 mil passos de tempo para que a interface da gota se estabilize. Após esse período, impôs-se ao fluido a força da gravidade na forma:

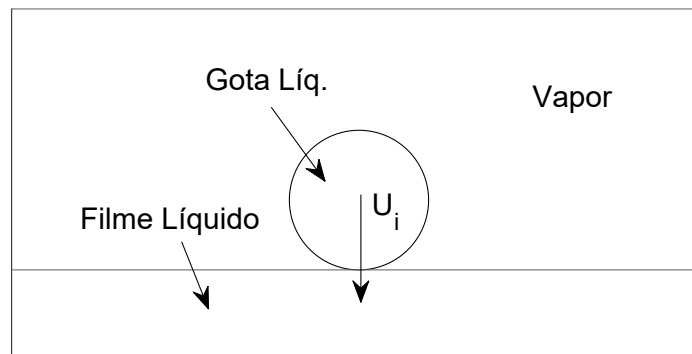
$$\mathbf{F}_g = -\rho g \hat{\mathbf{j}}, \quad (4.29)$$

em que $\hat{\mathbf{j}}$ é um vetor unitário na direção vertical. A aceleração da gravidade é definida como $g = 10^{-5}$. Esta força induz a gota a cair em direção a superfície inferior.

4.5.6 Colisão de uma gota contra um filme líquido

Este teste é em alguns aspectos semelhante ao teste anterior. Porém, ao invés da gota colidir contra uma parede sólida, agora ela colide contra um filme de líquido de altura h_y localizado acima da parede inferior. Além disso, ao invés de ser aplicada a força da gravidade para forçar a queda, a gota já é inicializada com uma velocidade de impacto U . Esta opção foi feita para que se tenha um controle mais fino do número de Reynolds que deseja-se impor às simulações. A gota também é inicializada imediatamente acima do filme líquido, para que não haja desaceleração devido ao atrito com a fase vapor e assim a velocidade de impacto é a mesma que foi imposta a gota. Um esquema de como esta simulação é inicializada é mostrado na Figura 23.

Figura 23 – Esquema da condição inicial do teste de impacto contra um filme líquido.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Condições de contorno periódicas são aplicadas nas fronteiras laterais. Na fronteira superior e inferior são impostas condições de não-deslizamento. Esta última foi aplicada com o uso do esquema *Bounce-Back*. Tanto a gota quanto o filme líquido possuem uma interface difusa na simulação que é inicializada usando a função tangente hiperbólica. Para cada equação de estado, mediu-se a espessura da interface num teste de interface plana e utilizou-se este valor para a inicialização do teste dinâmico.

Para o cálculo dos termos de força na fronteira superior e inferior é necessário atribuir valores às variáveis em nós que estão além da fronteira física para o cálculo de gradientes. Aqui, define-se que as densidades dos nós dentro das paredes sólidas são iguais à densidade do líquido saturado (fronteira inferior) e vapor saturado (fronteira superior). Isto implica que a parede inferior é hidrofílica; porém, os detalhes desta interação sólido-fluido não são importantes pois o fundo do domínio está completamente preenchido pelo filme líquido ao longo da simulação.

A matriz de relaxação é dada por:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag} \left(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, \tau^{-1}(\rho), \tau^{-1}(\rho) \right), \quad (4.30)$$

em que os tempos de relaxação, dependentes da densidade $\tau(\rho)$, permitem o controle da razão de viscosidade entre as fases líquido e gás. Este tempo de relaxação pode ser definido da seguinte maneira:

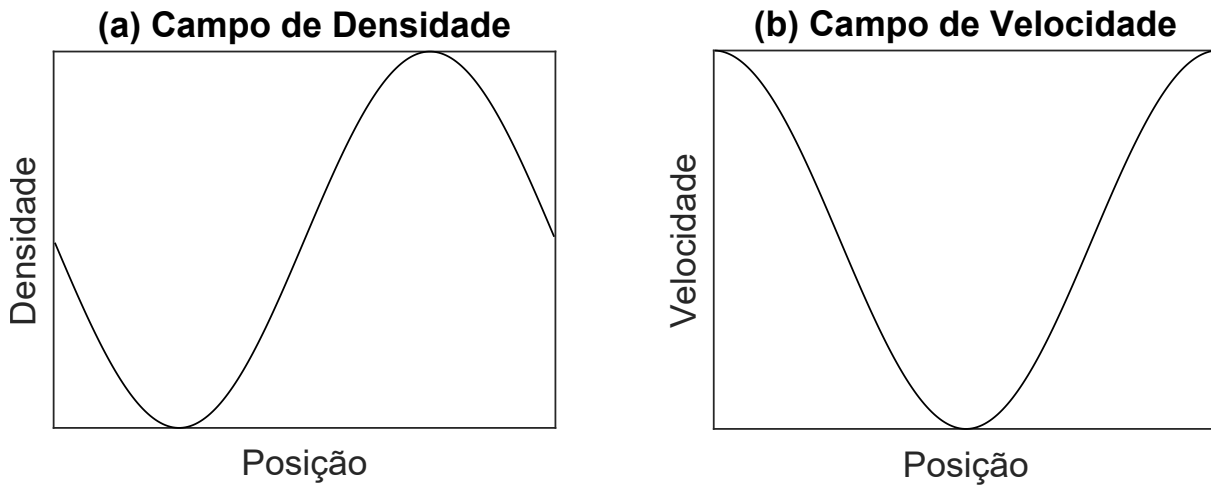
$$\tau(\rho) = \tau_l \frac{\rho - \rho_v}{\rho_l - \rho_v} + \tau_v \frac{\rho - \rho_l}{\rho_v - \rho_l}, \quad (4.31)$$

sendo τ_v e τ_l os tempos de relaxação das fases vapor e líquido. Caso τ_l seja especificado e deseja-se impor uma determinada razão de viscosidade $\nu_r = \nu_v/\nu_l$, o tempo de relaxação do vapor deve ser obtido por $\tau_v = 0.5 + \nu_r(\tau_l - 0.5)$.

4.5.7 Oscilação suave de um gás ideal

O teste da oscilação suave de um gás ideal foi desenvolvido com o propósito de ser um *benchmark* para avaliar a consistência dos modelos do MBR. Primeiramente, este teste consiste na inicialização de um sistema unidimensional de comprimento L com uma pequena perturbação nos campos de densidade e velocidade, como pode ser visto na Figura 24.

Figura 24 – Ilustração da condição inicial dos campos de densidade e velocidade utilizados no teste de oscilação suave de uma gás ideal.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Após a inicialização, o sistema começa a oscilar, sendo que a amplitude dessas oscilações decaem com o tempo. O objetivo é simular este sistema e comparar o decaimento medido com um resultado analítico. Por simplicidade, adotou-se que o fluido é representado por um gás ideal. Para o caso isotérmico, as equações que modelam este problema são as equações de conservação de massa e quantidade de movimento (para um gás ideal):

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u_x) = 0, \quad (4.32a)$$

$$\partial_t(\rho u_x) + \partial_x(\rho u_x u_x) = -\partial_x(\rho R_g T_0) + 2\mu \partial_x^2 u_x, \quad (4.32b)$$

supõe-se uma solução oscilatória no seguinte formato (para o caso isotérmico):

$$\rho = \rho_0 + A \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos(\omega t) e^{-\nu t}, \quad (4.33a)$$

$$u_x = B \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin(\omega t + \theta_1) e^{-\nu t}, \quad (4.33b)$$

$$T = T_0. \quad (4.33c)$$

Esta solução oscilatória é substituída na equação de conservação e despreza-se os termos de ordem A^2 , AB e B^2 (hipótese de pequenas oscilações $A \ll 1$ e $B \ll 1$). Na prática, isto é o mesmo que linearizar as equações de conservação. Note que a solução oscilatória é linear. Fazendo este procedimento, é possível obter as seguintes relações:

$$\nu = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \frac{\mu}{\rho_0}, \quad (4.34a)$$

$$\omega^2 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 R_g T_0 - \nu^2, \quad (4.34b)$$

$$\rho_0 B = -A \sqrt{R_g T_0}, \quad (4.34c)$$

$$\tan \theta_1 = \frac{\nu}{\omega}, \quad (4.34d)$$

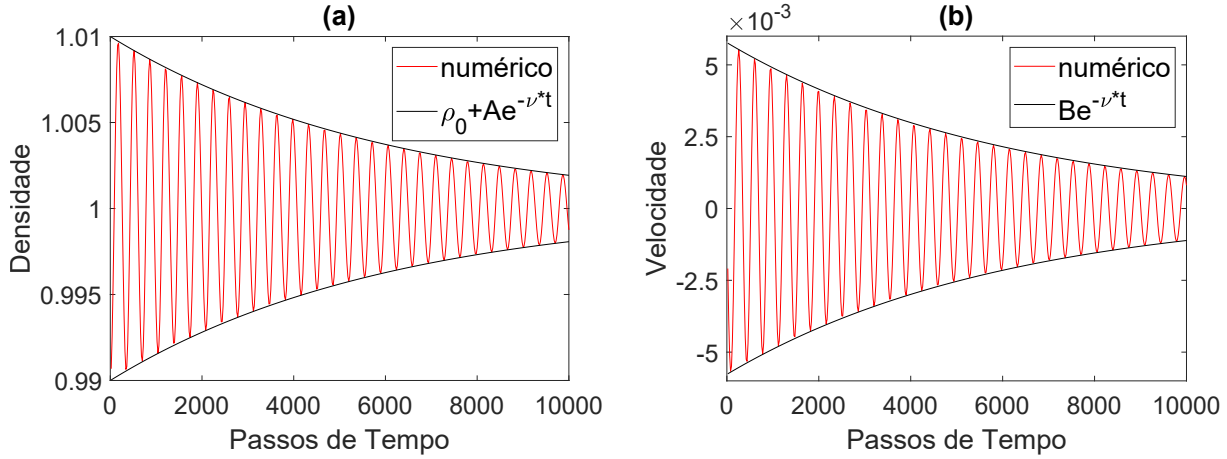
ou seja, conhecidos os valores para a viscosidade do fluido μ , o comprimento do domínio L , as propriedades termodinâmicas iniciais ρ_0 e T_0 ; a constante específica do gás R_g e a perturbação A da densidade, é possível determinar todos os parâmetros da solução analítica. Os perfis de densidade e velocidade inicial são representados na Figura 24 usando a solução analítica com $t = 0$.

Para validar esta solução analítica, comparou-se diretamente com a solução do MBR usando operador BGK. Há duas opções para realizar esta simulação. Na primeira utiliza-se a rede D1Q3 com um domínio de $L = 200$ nós e condições de contorno periódicas nas extremidades. Na segunda, usa-se a rede D2Q9 com mesmo comprimento em x e um comprimento arbitrário em y com condições periódicas em todas as fronteiras. Isto seria equivalente a simular um problema unidimensional com uma geometria bidimensional. Adotou-se $\tau = 1$ para o tempo de relaxação e $\rho_0 = 1$ para densidade inicial, o que resulta numa viscosidade dinâmica $\mu = \rho_0 c_s^2 (\tau - 0.5) = 1/6$. A perturbação na densidade é de $A = 0.01$. Para o MBR tradicional a velocidade do som é fixa e vale a relação $R_g T_0 = c_s^2 = 1/3$. Com estes dados, pode-se determinar completamente a solução analítica. Comparou-se os resultados da simulação com as curvas de decaimento $\rho = \rho_0 + A e^{\nu t}$ e $v = B e^{\nu t}$. Os resultados desta comparação são apresentados na Figura 25. Observa-se uma excelente concordância entre o MBR e a solução analítica.

Para o caso não-isotérmico, deve-se considerar todas as equações de conservação e uma temperatura variável:

$$\partial_t \rho + \partial_x (\rho u_x) = 0, \quad (4.35a)$$

Figura 25 – Comparação entre os resultados numéricos (obtidos com o MBR) e analíticos para o teste da oscilação suave de um gás ideal: (a) densidade do fluido ao longo do tempo na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido ao longo do tempo na mesma posição.



Fonte: Elaborado pelo autor.

$$\partial_t(\rho u_x) + \partial_x(\rho u_x u_x) = -\partial_x(\rho R_g T) + 2\mu \partial_x^2 u_x, \quad (4.35b)$$

$$\partial_t(\rho e) + \partial_x(\rho u_x e) = \kappa \partial_x^2 T - (\rho R_g T) \partial_x u_x + 2\mu (\partial_x u_x)^2, \quad (4.35c)$$

em que $e = c_v T$ para um gás ideal. A solução analítica é dado pelo conjunto de expressões:

$$\rho = \rho_0 + A \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \cos(\omega t) e^{-\nu t}, \quad (4.36a)$$

$$u_x = B \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin(\omega t + \theta_1) e^{-\nu t}, \quad (4.36b)$$

$$T = T_0 + C \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \sin(\omega t + \theta_2) e^{-\nu t}. \quad (4.36c)$$

Novamente, substituiu-se estas soluções nas equações de conservação e eliminou-se os termos de segunda ordem em relação à amplitude de perturbação. O seguinte conjunto de equações é obtido através deste procedimento:

$$\nu = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \frac{\mu}{\rho_0} + \frac{c_v}{T_0} \frac{C^2}{B^2} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \frac{\alpha}{2}, \quad (4.37a)$$

$$\nu^2 + \omega^2 = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 R_g T_0 + \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \frac{c_v \rho_0^2 C^2}{T_0 A^2}, \quad (4.37b)$$

$$B^2 = \frac{c_v}{T_0} C^2 + \frac{R_g T_0}{\rho_0^2} A^2, \quad (4.37c)$$

$$\theta_1 = \arctan\left(\frac{\nu}{\omega}\right), \quad (4.37d)$$

$$\tan(\theta_1 - \theta_2) = \frac{\omega}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \alpha - \nu}, \quad (4.37e)$$

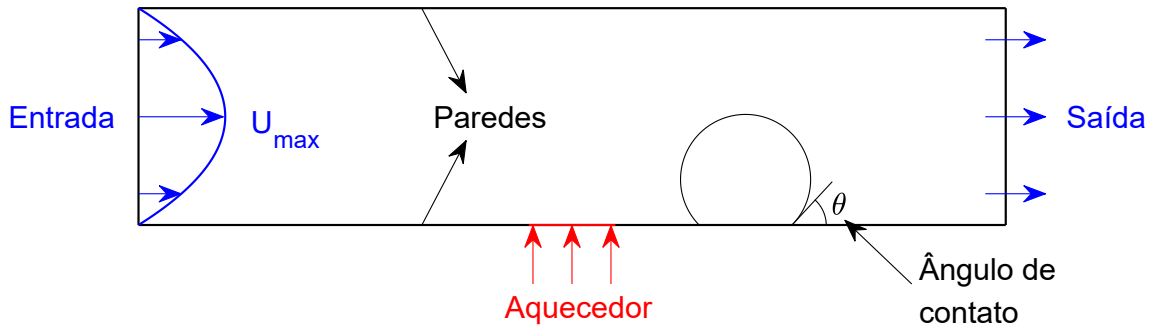
$$\nu^2 + \omega^2 - 2 \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 \alpha \nu + \left(\frac{2\pi}{L} \right)^4 \alpha^2 - \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 \left(\frac{R_g T_0}{c_v} \right)^2 \frac{B^2}{C^2} = 0, \quad (4.37f)$$

sendo $\alpha = \kappa/(\rho c_v)$ a difusividade térmica. Neste caso, não se consegue calcular o valor do parâmetros da solução analítica de maneira explícita a partir das propriedades do fluido e do comprimento do domínio. Porém, o sistema de equações acima pode ser resolvido numericamente. Os parâmetros necessários para a completa determinação da solução analítica são: a viscosidade μ ; o comprimento do domínio L ; as propriedades termodinâmicas iniciais ρ_0 , T_0 ; a amplitude de perturbação A , a constante específica do gás R_g ; o calor específico c_v ; e a difusividade térmica α .

4.5.8 Escoamento no interior de um canal com mudança de fase

Neste trabalho também realizou-se simulações referentes a escoamentos no interior de canais com mudança de fase. O sistema simulado é esquematizado na Figura 26. Apesar de um canal real ser um sistema físico tridimensional, adotou-se um modelo bidimensional. O intuito destas simulações foi avaliar as condições de contorno e a capacidade do método em nuclear bolhas na presença de um escoamento. Desta forma, o modelo bidimensional é suficiente para atender o objetivo do estudo. As fronteiras do canal consistem em duas paredes sólidas, uma entrada e uma saída de fluido.

Figura 26 – Esquema do sistema físico usado para representar o canal.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Inicialmente o fluido (em estado líquido) está em repouso a uma temperatura T_{sat} . Na entrada é imposto um fluxo de líquido com temperatura constante T_{sat} e com perfil de velocidades parabólico $u_x^e(y)$:

$$u_x^e(y) = 4U_{max} \left(\frac{y}{L} - \frac{y^2}{L^2} \right), \quad (4.38)$$

sendo U_{max} a velocidade máxima que ocorre no centro da entrada do canal. Esta condição de contorno foi aplicada no MBR utilizando o esquema de Zou e He (1997), dado pelas

equações:

$$\begin{aligned}
\rho^e &= \frac{1}{1 - u_x^e} \left(f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7) - \frac{F_x^e \Delta t}{2} \right), \\
f_1 &= f_3 + \frac{2\rho^e u_x^e}{3} - \frac{F_x^e \Delta t}{6}, \\
f_5 &= f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{\rho^e u_y^e}{2} + \frac{\rho^e u_x^e}{6} - \frac{F_x^e \Delta t}{6} - \frac{F_y^e \Delta t}{4}, \\
f_8 &= f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) - \frac{\rho^e u_y^e}{2} + \frac{\rho^e u_x^e}{6} - \frac{F_x^e \Delta t}{6} + \frac{F_y^e \Delta t}{4}.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Os sobrescritos $(^e)$ indicam que as variáveis são referentes aos nós da entrada. Na primeira relação deste conjunto, calcula-se a densidade do fluido na entrada a partir da velocidade que se quer impor na direção da coordenada x , que no caso trata-se do perfil parabólico. A velocidade vertical na entrada é nula $u_y^e = 0$, e as forças de interação F_x^e e F_y^e são aquelas agindo sobre os nós da entrada. Como desprezou-se a ação da força gravitacional neste problema, estas forças são iguais às componentes da força de Shan-Chen nas coordenadas x e y . Esta força dada pela Equação (2.69) depende da somatória $\sum_i \psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \times \dots$, mas os valores de $\psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_3 \Delta t)$, $\psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_5 \Delta t)$ e $\psi(t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_7 \Delta t)$ são desconhecidos para os nós da entrada. Eles foram calculados considerando que o líquido que entra no domínio está no estado de saturação para a temperatura T_{sat} . Assim, para essa temperatura, calculou-se as densidades pela regra de Maxwell.

Nas paredes sólidas também impôs-se uma temperatura constante T_{sat} junto com a condição de não-deslizamento, também aplicada pelo esquema de Zou e He (1997). Para a parede superior esta é dada pelas relações:

$$\begin{aligned}
\rho^s &= \frac{1}{1 + u_y^s} \left(f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 + f_6) + \frac{F_y^s \Delta t}{2} \right), \\
f_4 &= f_2 - \frac{2\rho^s u_y^s}{3} + \frac{F_y^s \Delta t}{6}, \\
f_7 &= f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{\rho^s u_x^s}{2} - \frac{\rho^s u_y^s}{6} + \frac{F_x^s \Delta t}{4} + \frac{F_y^s \Delta t}{6}, \\
f_8 &= f_6 - \frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{\rho^s u_x^s}{2} - \frac{\rho^s u_y^s}{6} - \frac{F_x^s \Delta t}{4} + \frac{F_y^s \Delta t}{6}.
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Os sobrescritos $(^s)$ indicam que as variáveis são referentes aos nós da fronteira superior. Como se trata de uma parede sólida: $u_x^s = 0$ e $u_y^s = 0$. Uma questão particular deste tipo de fronteira refere-se à molhabilidade da superfície. Ou seja, se a superfície é hidrofílica ou hidrofóbica. Esta atribuição é feita por meio da especificação do ângulo de contato que uma bolha teria com a superfície, como representado na Figura 26. No MBR-P este ângulo de contato é atribuído de maneira indireta através de uma modificação na força de interação na parede:

$$F_\alpha^{int} = -\frac{2}{c_s^2 \Delta t} \psi(t, \mathbf{x}^s) \left(G \sum_{i \in I_f} w_i \psi(t, \mathbf{x}^s + \mathbf{c}_i \Delta t) c_{i\alpha} + G^b \sum_{i \in I_s} w_i \psi(t, \mathbf{x}^s) c_{i\alpha} \right). \tag{4.41}$$

Os símbolos I_f e I_s referem-se aos índices associados a interações do tipo fluido-fluido e fluido-sólido respectivamente. Este modelo foi proposto por Li *et al.* (2014) e é chamado de *modified ψ -based*. Neste estudo utilizou-se $G^b = -0.94$, o que é equivalente a definir o ângulo de contato como $\pi/2$. A região no centro da parede inferior indicada pela cor vermelha na Figura 26 representa o aquecedor. Este é mantido a uma temperatura acima do ponto crítico $T_h = 1.25T_c$. O aquecedor possui três nós de extensão, ou seja seu comprimento é $L_h = 3\Delta x$.

A condição de contorno mais desafiadora é a da saída do domínio. Esta dificuldade ocorre porque há um fluxo de massa deixando o domínio, e não se sabe exatamente quais variáveis atribuir a esta região. Nesta fronteira pode estar fluindo tanto líquido quanto vapor. Não há muitas informações na literatura sobre condições de contorno deste tipo voltadas para escoamentos multifásicos. Geralmente, refere-se ao trabalho de Lou, Guo e Shi (2013) em que os autores desenvolveram condições de fronteira para uma saída de fluido. Neste trabalho, testou-se estas condições apenas para casos hidrodinâmicos e nos quais gotas de líquido fluíam num meio de vapor. No problema em questão, são bolhas de vapor fluindo em um meio líquido com possível mudança de fase e transferência de calor. Lou, Guo e Shi (2013) propuseram duas condições de saída, uma refere-se a condição de Neumann nula:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} = 0, \quad (4.42)$$

para qualquer variável \mathcal{F} e outra chamada de convectiva:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + u_x \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} = 0. \quad (4.43)$$

Os autores desenvolveram estas condições de fronteira no contexto do método de He, Chen e Zhang (1999).

Para o MBR-P são necessárias algumas modificações para a condição convectiva, não sendo possível uma aplicação direta das mesmas fórmulas desenvolvidas pelos autores originais. Curiosamente, alguns autores do MBR-P mencionam o uso desta condição em seus trabalhos, mas não fazem menção a nenhuma alteração requerida. Desta forma, tomou-se a liberdade neste trabalho de se fazer uma modificação considerada conveniente. Criou-se uma camada de nó fantasma $N_x + 1$ para um domínio com N_x nós em x . A condição de Neumann nula se torna:

$$\mathcal{F}_{N_x+1}^n = \mathcal{F}_{N_x}^n, \quad (4.44)$$

sendo que \mathcal{F} representa qualquer variável f_i , ρ , ψ , \mathbf{u} , \mathbf{F} e T no instante de tempo t_n . A condição convectiva foi originalmente proposta como um procedimento implícito:

$$\mathcal{F}_{N_x}^{n+1} = \frac{\mathcal{F}_{N_x}^n - \lambda_{N_x-1}^{n+1} \mathcal{F}_{N_x-1}^{n+1}}{1 + \lambda_{N_x-1}^{n+1}}, \quad (4.45a)$$

$$\mathcal{F}_{N_x+1}^{n+1} = \frac{\mathcal{F}_{N_x+1}^n - \lambda_{N_x}^{n+1} \mathcal{F}_{N_x}^{n+1}}{1 + \lambda_{N_x}^{n+1}}. \quad (4.45b)$$

Na expressão acima, $\lambda_{N_x}^{n+1} = u_{x,N_x}^{n+1} \Delta t / \Delta x$; e $n + 1$ indica que a variável é avaliada no tempo $t_{n+1} = t_n + \Delta t$. Observa-se que as variáveis no passo $n + 1$ denominadas $\mathcal{F}_{N_x}^{n+1}$ dependem do conhecimento de u_{x,N_x-1}^{n+1} e $\mathcal{F}_{N_x-1}^{n+1}$. No caso da função de distribuição, $f_{N_x-1}^{n+1}$ é conhecida após o passo de propagação pois, como está localizada no interior do domínio, não necessita de nenhuma condição de contorno. Já a velocidade no próximo passo de tempo u_{x,N_x-1}^{n+1} também seria conhecida após o passo de propagação. O problema se encontra no fato de que, para o método do pseudopotencial, esta velocidade dependeria das densidades dos nós vizinhos, que são desconhecidas neste momento. Assim, a resolução desta condição de contorno se tornaria muito complexa e é adotada a seguinte aproximação:

$$\mathcal{F}_{N_x}^{n+1} = \frac{\mathcal{F}_{N_x}^n - \lambda_{N_x-1}^n \mathcal{F}_{N_x-1}^{n+1}}{1 + \lambda_{N_x-1}^n}, \quad (4.46a)$$

$$\mathcal{F}_{N_x+1}^{n+1} = \frac{\mathcal{F}_{N_x+1}^n - \lambda_{N_x}^n \mathcal{F}_{N_x}^{n+1}}{1 + \lambda_{N_x}^n}. \quad (4.46b)$$

Assim, ao invés de se utilizar as velocidades u_{x,N_x-1}^{n+1} e u_{x,N_x}^{n+1} que são muito difíceis de serem determinadas, utilizou-se u_{x,N_x}^n e u_{x,N_x-1}^n que são conhecidas.

Para a resolução do problema utilizou-se o operador de colisão MRT com a seguinte matriz de relaxação:

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag} \left(1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, \tau^{-1}, \tau^{-1} \right), \quad (4.47)$$

o tempo de relaxação será explicitado no capítulo de resultados. Como exceção a todos os outros casos testes em que utilizou-se a E-CS para modelar o fluido, desta vez optou-se pela equação de Peng-Robinson (E-PR). Esta escolha foi feita pois esta equação é a mais utilizada na literatura para problemas complexos com mudança de fase. Ela é dada por:

$$p_{EOS} = \frac{\rho R_g T}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2 \left[1 + (0.37464 + 1.54266\omega_a - 0.2699\omega_a^2) \left(1 - \sqrt{T/T_c} \right) \right]^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2}. \quad (4.48)$$

Os parâmetros a , b e R_g dependem das propriedades críticas do fluido: $a = 4.8648p_c/\rho_c^2$, $b = 0.25377/\rho_c$, e $R_g = 3.2618p_c/(T_c\rho_c)$. Além disso, há a presença de um outro parâmetro ω_a chamado fator acêntrico. Neste trabalho adotou-se $a = 3/49$, $b = 2/21$, $R_g = 1$ e $\omega_a = 0.344$ que são os valores mais utilizados na literatura.

5 RESULTADOS: ABORDAGENS DE FORÇA E PRESSÃO

Na Seção (2.3) da fundamentação teórica, apresentou-se a teoria relacionada ao tensor de pressões do método do pseudopotencial e posteriormente apresentou-se diversos métodos desenvolvidos para incorporar este tensor dentro da EMBR. Nesta seção, será apresentada uma metodologia mais geral para a discretização do tensor de pressões considerando apenas interações entre nós vizinhos. Duas abordagens serão definidas.

A primeira delas envolve apenas a definição de uma força de interação apropriada. Com esta força é possível corrigir a consistência termodinâmica e também controlar a tensão superficial no método do pseudopotencial. Note-se que o procedimento desenvolvido por Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) também permite o aprimoramento da consistência termodinâmica e envolve apenas o uso de uma força de interação sem a necessidade de modificações no esquema de força. Porém, este procedimento não permite o controle da tensão superficial sem a alteração da curva de coexistência do método. Assim, o procedimento aqui proposto pode ser visto como uma generalização da ideias apresentadas por estes autores. Os resultados obtidos são muito satisfatórios e mostram que é possível corrigir os defeitos do método do pseudopotencial com o emprego de um esquema numérico muito simples. Os estudos referentes a esta técnica foram publicados na revista *Physical Review E* com o título “*Force approach for the pseudopotential lattice Boltzmann method*” (CZELUSNIAK *et al.*, 2020).

O outro método envolve apenas a definição de um termo fonte que altera diretamente o tensor de pressões do método, sem a definição de nenhuma força de interação. Métodos baseados diretamente no tensor de pressão foram usados no contexto do método de energia livre (SWIFT; OSBORN; YEOMANS, 1995), porém não foram empregados no método do pseudopotencial. Neste capítulo, este tipo de abordagem foi não apenas empregada no método do pseudopotencial como também foi aprimorada para corrigir algumas falhas que serão discutidas mais adiante. Mesmo com essas correções, o método da pressão não apresentou resultados satisfatórios quando utilizado para se implementar o método do pseudopotencial. Isto se deve à presença de outros erros de discretização difíceis de serem corrigidos e novos estudos são necessários para se avaliar a possibilidade de eliminação desses erros.

5.1 Desenvolvimento Teórico

5.1.1 Discretizando os gradientes do pseudopotencial

O tensor de pressão, Equação (2.56), é constituído pela densidade efetiva e suas derivadas. Assim, qualquer método para discretizá-lo passará por aproximar numericamente

estas derivadas. Um procedimento relativamente simples consiste em utilizar o método das diferenças finitas para realizar estas aproximações. Como estão sendo consideradas interações entre nós vizinhos, para uma posição \mathbf{x} as operações devem ser feitas apenas com os valores de densidade efetiva $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$. Para tornar mais geral, a análise será feita para uma função arbitrária $\mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$. Expandindo este termo em séries de Taylor, obtém-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) &= \mathcal{F}(\mathbf{x}) + c_{i\alpha} \partial_\alpha \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \frac{\Delta t^2}{2} c_{i\alpha} c_{i\beta} \partial_\alpha \partial_\beta \mathcal{F}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{\Delta t^3}{6} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} \partial_\alpha \partial_\beta \partial_\gamma \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \dots, \end{aligned} \quad (5.1)$$

Na expressão acima, em cada termo aparece um polinômio relacionado às velocidades de rede, por exemplo 1, $c_{i\alpha}$ e $c_{i\alpha} c_{i\beta}$. Como é muito comum no MBR representar as funções por expansões em polinômios de Hermite discretos, uma possibilidade é reorganizar os termos da Equação (5.1) neste formato:

$$\begin{aligned} w_i \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) &= w_i \left[M^0(\mathcal{F}) + \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} M_\alpha^{(1)}(\mathcal{F}) + \frac{c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} M_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathcal{F}) \right. \\ &+ \frac{c_{ix} c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}}{2c_s^6} M_x^{(3)}(\mathcal{F}) + \frac{c_{iy} c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}}{2c_s^6} M_y^{(3)}(\mathcal{F}) \\ &\left. + \frac{c_{ix}^2 c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}^2 + c_s^4}{4c_s^8} M^{(4)}(\mathcal{F}) \right]. \end{aligned} \quad (5.2)$$

A ideia de representar a densidade efetiva como uma expansão é motivada por calcular as derivadas desejadas utilizando a notação usual do MBR que, no caso, é a notação dos momentos de $w_i \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$. Estes momentos são dados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} M^{(0)}(\mathcal{F}) &= \sum_i w_i \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \frac{c_s^2 \Delta t^2}{2} \partial_\gamma \partial_\gamma \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \frac{c_s^4 \Delta t^4}{8} \partial_\gamma^4 \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \dots, \\ M_\alpha^{(1)}(\mathcal{F}) &= \sum_i w_i c_{i\alpha} \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = c_s^2 (\Delta t) \partial_\alpha \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \frac{3c_s^4 \Delta t^3}{2} \partial_\alpha \partial_\gamma \partial_\gamma \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \dots, \\ M_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathcal{F}) &= \sum_i w_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = c_s^4 \Delta t^2 \partial_\alpha \partial_\beta \mathcal{F}(\mathbf{x}) + O(c_s^6 \Delta t^4), \\ M_x^{(3)}(\mathcal{F}) &= \sum_i w_i (c_{ix} c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}) \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = c_s^6 \Delta t^3 \partial_x \partial_y^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}) + O(c_s^8 \Delta t^5), \\ M_y^{(3)}(\mathcal{F}) &= \sum_i w_i (c_{iy} c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}) \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = c_s^6 \Delta t^3 \partial_y \partial_x^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}) + O(c_s^8 \Delta t^5), \\ M^{(4)}(\mathcal{F}) &= \sum_i w_i (c_{ix}^2 c_{iy}^2 - c_s^2 c_{ix}^2 - c_s^2 c_{iy}^2 + c_s^4) \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = c_s^8 \Delta t^4 \partial_x^2 \partial_y^2 \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \dots, \end{aligned} \quad (5.3)$$

Em unidades de rede $c_{s,u} = 1/\sqrt{3}$, enquanto que em unidades físicas $c_s = (1/\sqrt{3})(\Delta x/\Delta t) = c_{s,u}(\Delta x/\Delta t)$. Com isso, é possível calcular a ordem de precisão espacial das discretizações

acima. Alguns exemplos são:

$$\begin{aligned}\frac{M_\alpha^{(1)}(\mathcal{F})}{c_s^2 \Delta t} &= \frac{M_\alpha^{(1)}(\mathcal{F})}{c_{s,u}^2 \Delta x (\Delta x / \Delta t)} = \partial_\alpha \mathcal{F}(\mathbf{x}) + O(\Delta x^2), \\ \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathcal{F})}{c_s^4 \Delta t^2} &= \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathcal{F})}{c_{s,u}^4 \Delta x^2 (\Delta x / \Delta t)^2} = \partial_\alpha \partial_\beta \mathcal{F}(\mathbf{x}) + O(\Delta x^2).\end{aligned}\tag{5.4}$$

Determinada a forma de aproximar as derivadas da densidade efetiva, é necessário incorporá-las na EMBR. Uma maneira de se fazer isso é introduzindo uma força de campo como fizeram Shan e Chen (1993). Uma alternativa a este procedimento é adicionar termos fontes na equação de forma análoga a Li *et al.* (2012) e Li e Luo (2013).

5.1.2 Formas de Implementar o Tensor de Pressão na EMBR

Nesta subseção será mostrado o racional por trás dos desenvolvimentos apresentados ao longo deste capítulo. Para facilitar a leitura, algumas equações já apresentadas no capítulo de fundamentação teórica serão repetidas, evitando que o leitor precise alternar demasiadamente entre seções. O formato do tensor de pressão que será utilizado como base para todos desenvolvimentos é o dado pela Equação (2.59a):

$$p_{\alpha\beta} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G (\partial_\gamma \psi) (\partial_\gamma \psi) + A_2 G \psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G \psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \tag{5.5}$$

A partir desta equação, derivou-se a relação entre as densidades das fases líquida e vapor em equilíbrio separadas por uma interface plana. Esta relação é dada pela Equação (2.65), aqui repetida por comodidade:

$$\int_{\rho_v}^{\rho_l} (p_0 - p_{EOS}) \frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\epsilon}} d\rho = 0, \tag{5.6}$$

na qual substituiu-se $c_s^2 \rho + G\psi^2 = p_{EOS}$. O parâmetro $\epsilon = -2A_1 / (A_2 + A_3)$ é fundamental e determina o formato da curva de coexistência das densidades de equilíbrio para uma dada equação de estado p_{EOS} . Assim, os coeficientes do tensor de pressão $A_{1,2,3}$ podem ser ajustados para que esta curva de coexistência se aproxime da solução termodinamicamente consistente que seria dada pela regra de Maxwell, já apresentada anteriormente na Equação (2.67):

$$\int_{\rho_v}^{\rho_l} (p_0 - p_{EOS}) \frac{d\rho}{\rho^2} = 0. \tag{5.7}$$

Já a tensão superficial para uma interface difusa pode ser calculada usando a Equação (2.54). Neste caso, considera-se que a coordenada x seja normal a interface e y paralela a interface:

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} (p_{xx} - p_{yy}) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A_3 G \psi \partial_x \partial_x \psi dx. \tag{5.8}$$

Esta equação implica que a tensão superficial no método do pseudopotencial pode ser ajustada por meio do coeficiente A_3 . Ou seja, ao se especificar os valores dos coeficientes

$A_{1,2,3}$ são definidos o formato da curva de coexistência e a tensão superficial do método. Ao se ajustar estes coeficientes pode-se especificar as características desejadas ao método.

Na seção anterior foi discutido como discretizar as derivadas presentes no tensor de pressão utilizando um esquema de diferenças finitas, o que permite o cálculo numérico aproximado do tensor de pressão. Lembrando-se que a Equação (5.5) representa o tensor resultante desejado. O tensor que será inserido para que este resultado seja alcançado é chamado de $p'_{\alpha\beta}$. A questão que falta ser respondida é como inserir este tensor no método de rede de Boltzmann. Uma das formas de se fazer isso é calculando uma força equivalente ao negativo do divergente do tensor de pressão $F_\alpha = -\partial_\beta p'_{\alpha\beta}$ e depois inserir no MBR por meio de um esquema de força. Assim, um termo fonte $S_i(\mathbf{F})$, que seria o esquema de força dependente da força \mathbf{F} , seria introduzido na EMBR:

$$f_i(t+1, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - f_i(t, \mathbf{x}) = \Omega_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}^{eq}) \Delta t + S_i(\mathbf{F}) \Delta t, \quad (5.9)$$

com o intuito de obter-se uma equação macroscópica final no seguinte formato:

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) &= -\partial_\beta(c_s^2 \rho) \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} + F_\alpha \\ &= -\partial_\beta(c_s^2 \rho) \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} - \partial_\beta p'_{\alpha\beta} \\ &= -\partial_\beta(c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + p'_{\alpha\beta}) + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Assim, basta definir $p'_{\alpha\beta}$ para que a soma $c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + p'_{\alpha\beta}$ resulte no tensor de pressão desejado.

Um outro caminho consiste em determinar um termo fonte $S_i(\mathbf{p}')$ que dependa diretamente do tensor de pressão \mathbf{p}' da seguinte forma:

$$f_i(t+1, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - f_i(t, \mathbf{x}) = \Omega_i(\mathbf{f}, \mathbf{f}^{eq}) \Delta t + S_i(\mathbf{p}') \Delta t, \quad (5.11)$$

que convenientemente resulte na equação macroscópica final desejada:

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\beta(c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + p'_{\alpha\beta}) + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta}. \quad (5.12)$$

A primeira estratégia será denominada de abordagem de força e a segunda de abordagem de pressão. Estes procedimentos serão discutidos em mais detalhes nas próximas subseções.

5.2 Abordagem da Força: Desenvolvimento Teórico

5.2.1 Teoria

Existem diversos esquemas de força desenvolvidos para o MBR, o mais comumente utilizado é o esquema de Guo (GUO; ZHENG; SHI, 2002), que será considerado para os próximos desenvolvimentos. O objetivo de um esquema assim é a introdução dos efeitos de uma força no MBR. Porém, como todo esquema numérico haverá erros de discretização que irão desviar o comportamento físico do método do comportamento desejado. Desta forma, é necessário verificar as equações macroscópicas finais. Lycett-Brown e Luo (2015)

determinaram a equação macroscópica resultante da introdução de uma força \mathbf{F} na EMBR por meio do esquema de força do Guo. Nesta análise foram levados em consideração erros de truncamento de até terceira ordem devido ao esquema de força:

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = & -\partial_\beta(c_s^2 \rho) \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} + F_\alpha \\ & + \partial_\beta \left[\frac{c_s^2 \Delta t^2}{12} (\partial_\gamma F_\gamma \delta_{\alpha\beta} + \partial_\alpha F_\beta + \partial_\beta F_\alpha) \right], \end{aligned} \quad (5.13)$$

sendo que o último termo no lado direito da equação refere-se aos erros de truncamento. É possível determinar aproximadamente o efeito destes erros lembrando que $F_\alpha = -\partial_\beta p'_{\alpha\beta}$ e usando a aproximação $p'_{\alpha\beta} \approx G\psi^2 \delta_{\alpha\beta}$. Assim, obtém-se $F_\alpha \approx -2G\psi \partial_\alpha \psi$. Substituindo esta expressão nos erros de truncamento da equação acima e considerando que $c_s^2 = (1/3)(\Delta x/\Delta t)^2$, obtém-se:

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = & -\partial_\beta(c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + p'_{\alpha\beta}) + \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} \\ & - \partial_\beta \left[\left(\frac{\Delta x^2}{6} G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + \frac{\Delta x^2}{6} G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} \right]. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Os erros de truncamento serão incorporados como parte do tensor resultante $p_{\alpha\beta}$:

$$p_{\alpha\beta} = p'_{\alpha\beta} + \left(c_s^2 \rho + \frac{\Delta x^2}{6} G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + \frac{\Delta x^2}{6} G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta}. \quad (5.15)$$

Como $p_{\alpha\beta}$ é dado pela Equação (5.5), pode-se calcular o tensor $p'_{\alpha\beta}$ igualando a Equação (5.15) com a (5.5):

$$\begin{aligned} p'_{\alpha\beta} = & \left(G\psi^2 + \left(A_1 - \frac{\Delta x^2}{6} \right) G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + \left(A_2 - \frac{\Delta x^2}{6} \right) G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} \\ & + A_3 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Agora, é necessário definir uma força $F_\alpha = -\partial_\beta p'_{\alpha\beta}$ capaz de introduzir este tensor de pressão dentro das equações macroscópicas. Pode-se partir da força de Shan-Chen e extendê-la por meio de correções:

$$F_\alpha = -\partial_\beta p'_{\alpha\beta} = F_\alpha^{SC} + k_1 F_\alpha^{(1)} + k_2 F_\alpha^{(2)} + k_3 F_\alpha^{(3)}, \quad (5.17)$$

sendo cada um destes termos expressos por:

$$F_\alpha^{SC} = -\partial_\beta \left[\left(G\psi^2 - \frac{\Delta x^2}{6} G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) \right) \delta_{\alpha\beta} + \frac{\Delta x^2}{3} G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi \right], \quad (5.18a)$$

$$F_\alpha^{(1)} = -\partial_\beta [G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) \delta_{\alpha\beta}], \quad (5.18b)$$

$$F_\alpha^{(2)} = -\partial_\beta [G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \delta_{\alpha\beta}], \quad (5.18c)$$

$$F_\alpha^{(3)} = -\partial_\beta [G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi - G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \delta_{\alpha\beta}]. \quad (5.18d)$$

Comparando as Equações (5.16) e (5.17) e utilizando-se a expansão em séries de Taylor da força de Shan-Chen, Equação (5.18a), pode-se determinar os coeficientes $k_{1,2,3}$ de forma a recuperar o tensor de pressão desejado nas equações macroscópicas:

$$k_1 = A_1; \quad k_2 = A_2 + A_3 - \frac{\Delta x^2}{2}; \quad k_3 = A_3 - \frac{\Delta x^2}{3}. \quad (5.19)$$

O passo final para o desenvolvimento do método da força consiste na discretização das forças de correção. A força definida pela Equação (5.18b) pode ser escrita da seguinte forma:

$$F_\alpha^{(1)} = -\partial_\beta [G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi)\delta_{\alpha\beta}] = -2G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\alpha \partial_\gamma \psi). \quad (5.20)$$

Esta força pode ser discretizada usando os momentos da Equação (5.3). A segunda força de interação definida pela Equação (5.18c) não pode ser discretizada utilizando apenas nós vizinhos, pois o seu cálculo envolve derivadas de ordem três que não são discretizáveis pelas expressões apresentadas na Equação (5.3). Assim, apenas resta a escolha $k_2 = 0$ na Equação (5.17), ou seja, a soma dos coeficientes $A_2 + A_3$ não pode ser controlada e assume apenas um valor $A_2 + A_3 = \Delta x^2/2$.

Com relação à terceira força de interação dada pela Equação (5.18d), a mesma possui um termo equivalente à segunda força. Porém, esta terceira força pode ser discretizada como um todo ao ser manipulada utilizando a Equação (2.58). Assim pode-se reescrevê-la no seguinte formato:

$$\begin{aligned} F_\alpha^{(3)} &= -\partial_\beta [G\psi\partial_\alpha\partial_\beta\psi - G\psi\partial_\gamma\partial_\gamma\psi\delta_{\alpha\beta}] = -\partial_\beta [G(\partial_\gamma\psi)(\partial_\gamma\psi)\delta_{\alpha\beta} - G(\partial_\alpha\psi)(\partial_\beta\psi)] \\ &= G(\partial_\alpha\psi)(\partial_\gamma\partial_\gamma\psi) - G(\partial_\gamma\psi)(\partial_\alpha\partial_\gamma\psi). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Utilizando-se das relações apresentadas na Equação (5.3), pode-se escrever estas forças na forma discreta:

$$F_\alpha^{(1)} = -2 \frac{M_\beta^{(1)}(\psi)}{c_s^2 \Delta t} \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4 \Delta t^2}, \quad (5.22a)$$

$$F_\alpha^{(3)} = \frac{M_\alpha^{(1)}(\psi)}{c_s^2 \Delta t} \frac{M_{\beta\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4 \Delta t^2} - \frac{M_\beta^{(1)}(\psi)}{c_s^2 \Delta t} \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4 \Delta t^2}. \quad (5.22b)$$

O tensor de pressão final recuperado com o método da força é dado por:

$$p_{\alpha\beta} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + \left(\frac{\Delta x^2}{2} - A_3 \right) G\psi\partial_\gamma\partial_\gamma\psi \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G\psi\partial_\alpha\partial_\beta\psi. \quad (5.23)$$

Por simplicidade, a abordagem da força proposta neste trabalho também poderá ser chamada de MBR-P-F ao longo do texto. Como já comentado anteriormente, as simulações neste trabalho são realizadas em unidades de rede, ou seja, adota-se um sistema de unidades em que $\Delta x = 1$, $\Delta t = 1$ e $c_s^2 = 1/3$.

5.2.2 Implementação

Na subseção anterior foi apresentado o desenvolvimento teórico relacionado à abordagem de força. Porém, pode ser difícil para o leitor visualizar como este método é implementado de fato. Assim, nesta subseção será apresentada a implementação passo a passo do método para o teste da interface plana. O leitor deve consultar os detalhes gerais de solução do teste de interface plana na seção 4.5.2. O mesmo procedimento de solução será utilizado aqui.

Neste exemplo, será adotado $a = 0.25$ na E-CS. Considera-se que o fluido está a uma temperatura reduzida $T_r = 0.65$, o que resulta em densidades de fase $\rho_v = 0.0056$ e $\rho_l = 0.3823$ pela regra de Maxwell. Outros dados de simulação são $(N_x, N_y) = (200, 1)$; $W = 5$; $(x_1, x_2) = (50, 150)$. O procedimento de implementação é muito semelhante ao apresentado na seção 4.1 quando resolveu-se a caixa de fluido. A única diferença agora é que, antes da realização do passo de colisão, deve-se calcular a força de interação e, no passo de colisão, deve-se adicionar a contribuição do esquema de força.

A força de interação é dada pela Equação (5.17) sendo que os parâmetros k_1 , k_2 e k_3 foram estabelecidos pela Equação (5.19). Para interações baseadas em apenas nós vizinhos, que é o presente caso, $k_2 = 0$. Assim, a força proposta é constituída somente por F_α^{SC} , $F_\alpha^{(1)}$ e $F_\alpha^{(3)}$ que são discretizadas de acordo com a Equação (5.22). Como o problema será resolvido em unidades de rede, em todas as expressões os termos Δx e Δt serão substituídos por 1 simplesmente. Além disso, deve-se considerar $c_s^2 = 1/3$ e as velocidades \mathbf{c}_i também devem ser usadas em unidades de rede. Juntando todas essas informações, obtém-se:

$$F_\alpha = F_\alpha^{SC} - 2A_1 \frac{M_\beta^{(1)}(\psi)}{c_s^2} \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4} + \left(A_3 - \frac{1}{3} \right) \left(\frac{M_\alpha^{(1)}(\psi)}{c_s^2} \frac{M_{\beta\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4} - \frac{M_\beta^{(1)}(\psi)}{c_s^2} \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4} \right), \quad (5.24)$$

sendo que os momentos do potencial de interação são dados pela Equação (5.3). Aqui, apenas os momentos de ordem 1 e 2 são necessários para o cálculo da força:

$$M_\alpha^{(1)}(\psi) = \sum_i w_i c_{i\alpha} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i), \quad (5.25a)$$

$$M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi) = \sum_i w_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i), \quad (5.25b)$$

como $\Delta t = 1$, optou-se por simplificar o termo $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$ por apenas $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$.

Antes de se iniciar a implementação da força, é necessário especificar os valores de A_1 e A_3 . O primeiro está relacionado ao parâmetro ϵ que controla a curva de coexistência. Esta relação é dada por $\epsilon = -2A_1/(A_2 + A_3)$, como descrito na seção 2.3.3. Como comentado anteriormente, quando utiliza-se apenas interações entre nós vizinhos a soma $A_2 + A_3$ é fixa e igual a $1/2$ ($\Delta x^2/2 = 1/2$ em unidades de rede). Assim, há uma relação direta entre ϵ e A_1 dada por $\epsilon = -4A_1$. Em teoria, as densidades de fase do método

do pseudopotencial devem respeitar a Equação (2.65) que depende de ϵ . Deseja-se que essas densidades coincidam com as obtidas pela regra de Maxwell, pois estas seriam as observadas num processo fisicamente consistente. Ao substituir-se $\epsilon = 1.94$ nesta equação e resolvendo-a numericamente, obtém-se as seguintes densidades de fase: $\rho_v = 0.0056$ e $\rho_l = 0.3823$. Estas densidades são exatamente as mesmas obtidas pela regra de Maxwell; assim, este valor de ϵ será utilizado nas simulações. Para o parâmetro A_3 serão utilizados três valores: $1/6$; $1/3$ e $2/3$.

A implementação da força começa pelo cálculo dos momentos dados pelas Equações (5.25a) e (5.25b). Note-se que embora haja dois momentos, estes são tensores. Como estão envolvidas duas dimensões, para $M_\alpha^{(1)}(\psi)$ há as componentes $M_x^{(1)}(\psi)$ e $M_y^{(1)}(\psi)$. Já para $M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi)$ há $M_{xx}^{(2)}(\psi)$, $M_{xy}^{(2)}(\psi)$ e $M_{yy}^{(2)}(\psi)$. Estes momentos podem ser calculados no software Matlab através das seguintes linhas de código:

```
% Exemplo Cálculo dos Momentos
% M1_x = M_x^{(1)}(\psi); M1_y = M_y^{(1)}(\psi);
% M2_xx = M_{xx}^{(2)}(\psi); M2_xy = M_{xy}^{(2)}(\psi); M2_yy = M_{yy}^{(2)}(\psi)
% psi(:, :) = Matriz com os valores de \psi
M1_x = 0; M1_y = 0; M2_xx = 0; M2_xy = 0; M2_yy = 0;
for i = 1:9
    psi_d = circshift( psi(:, :), [ -cx(i), -cy(i) ] ); % psi_d = \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)
    M1_x = M1_x + w(i)*cx(i)*psi_d;
    M1_y = M1_y + w(i)*cy(i)*psi_d;
    M2_xx = M2_xx + w(i)*(cx(i)*cx(i)-1/3)*psi_d;
    M2_xy = M2_xy + w(i)*cx(i)*cy(i)*psi_d;
    M2_yy = M2_yy + w(i)*(cy(i)*cy(i)-1/3)*psi_d;
end
```

Após o cálculo anteriormente descrito, a força de interação pode ser calculada através de operações algébricas envolvendo estes momentos. Aqui, optou-se por calcular as correções $F_\alpha^{(1)}$ e $F_\alpha^{(2)}$ antes de se calcular a força total como a força de Shan-Chen somada às correções:

```
% Exemplo Cálculo da Força de Interação
G = -1; cs2 = 1/3; cs4 = 1/9; % cs2 = c_s^2; cs4 = c_s^4

F_SC_x = -2/cs2*G*psi.*M1_x; % Força de Shan-Chen em x
F_SC_y = -2/cs2*G*psi.*M1_y; % Força de Shan-Chen em y

F1_x = -2*( (M1_x/cs2).*(M2_xx/cs4) + (M1_y/cs2).*(M2_xy/cs4) );
```

```
F1_y = -2*( (M1_x/cs2).*(M2_xy/cs4) + (M1_y/cs2).*(M2_yy/cs4) );
% As duas equações acima são a Equação (5.22a) para coordenadas x e y
```

```
F2_x = (M1_x/cs2).*(M2_xx+M2_yy)/cs4 + F1_x/2;
F2_y = (M1_y/cs2).*(M2_xx+M2_yy)/cs4 + F1_y/2;
% As duas equações acima são a Equação (5.22b) para coordenadas x e y
```

```
Fx = F_SC_x + A1*(F1_x) + A3*(F2_x);
Fy = F_SC_y + A1*(F1_y) + A3*(F2_y);
```

Para que estas forças de interação possam ser incorporadas no MBR, é necessário a utilização de um esquema de força. O MBR-P-F desenvolvido utiliza-se do esquema de Guo, sem nenhuma alteração adicional. Este esquema de força pode ser implementado no Matlab com as seguintes linhas de código:

```
% Exemplo Cálculo do Esquema de Força do Guo
t1 = Ux.*Fx + Uy.*Fy;
for i = 1:9
    t2 = cx(i)*Ux + cy(i)*Uy;
    t3 = cx(i)*Fx + cy(i)*Fy;
    F(:,i) = w(i)*( t2/cs2 + t2.*t3/cs4 - t1/cs2 );
% O termo F(:,i) é equivalente a  $F_i$  da Equação (2.30)
end
```

O passo de colisão possui um termo adicional para levar em consideração o esquema de força, com relação ao apresentado na seção 4.1. Este pode ser implementado como:

```
% Exemplo do Passo de Colisão com esquema de Força
f = omega*feq + (1-omega)*f + (1-omega/2)*F;
```

Note-se que os trechos de código foram desenvolvidos para serem implementados no software Matlab e a maioria deles utilizam as operações vetoriais próprias deste software. Em outras linguagens de programação a implementação precisaria de adaptações. Por exemplo, para multiplicar todos os elementos $a_{i,j}$ de uma matriz com os elementos $b_{i,j}$ de outra, no Matlab pode-se utilizar a expressão curta $a.*b$ que automaticamente já faz a multiplicação para todos os índices. Em outras linguagens, pode ser necessário a utilização de um laço *for*.

O passo de propagação é exatamente igual ao já mostrado na seção 4.1. Como

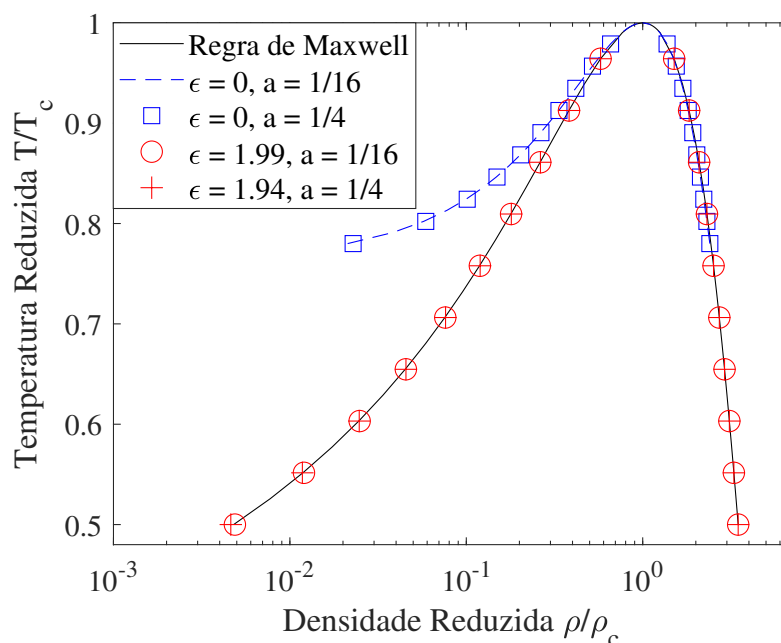
estão sendo utilizadas condições de contorno periódicas, não é necessário a aplicação de nenhum tratamento para estas condições, pois a implementação realizada para o passo de propagação já aplica estas de maneira implícita. Simulando a evolução temporal deste sistema até o estado de equilíbrio, obtém-se para todos os valores de A_3 o mesmo resultado de densidades de fase: $\rho_v = 0.0061$ e $\rho_l = 0.3824$. O fato do parâmetro A_3 não influenciar as densidades no teste de interface plana já era esperado, pois estas densidades dependem apenas de ϵ e por consequência A_1 . Porém a densidade final do vapor apresenta um erro de aproximadamente 9% com relação a densidade obtida com a regra de Maxwell. O objetivo nesta subseção é apenas apresentar detalhes de implementação, os resultados do método serão analisados em mais detalhes nas próximas subseções.

5.3 Abordagem de Força: Testes de Validação

5.3.1 Escolha dos Parâmetros

Em todos os testes realizados para validar o método da força utilizou-se a E-CS como equação de estado. De acordo com outros trabalhos da literatura (LI; LUO; LI, 2013; LYCETT-BROWN; LUO, 2015), o parâmetro a pode ser ajustado com o intuito de se controlar a espessura da interface no método. Assim, neste trabalho serão adotados os valores $a = 1/4$ e $a = 1/16$ para avaliar o efeito da espessura da interface nas simulações. Dada a equação de estado utilizada nos testes, o próximo passo é a definição dos valores de ϵ que serão utilizados.

Figura 27 – Curva de coexistência teórica calculada para diferentes valores de ϵ e a .



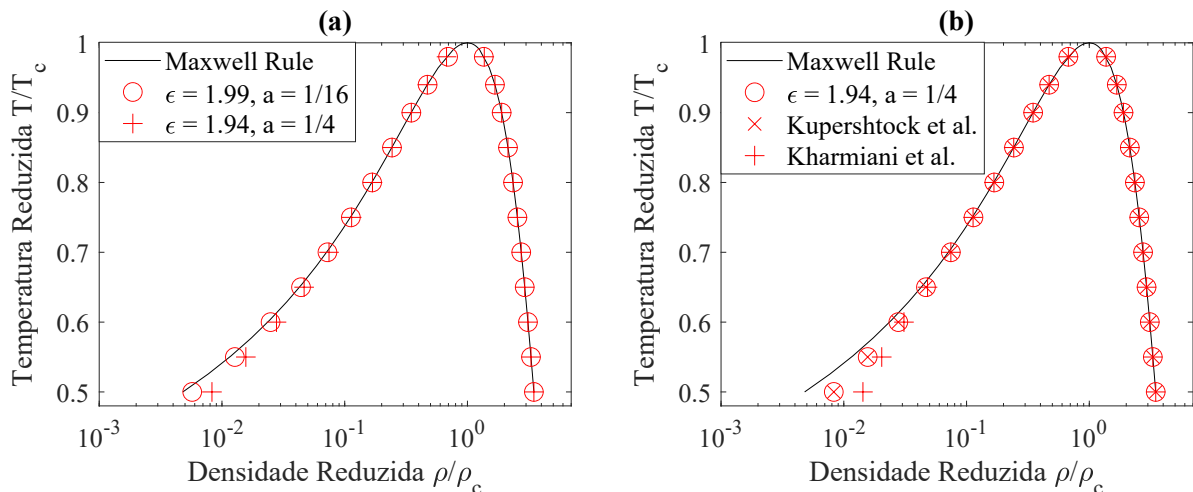
Fonte: Elaborado pelo autor.

A relação de equilíbrio mecânico entre as fases, Equação (2.65), depende da equação de estado sendo utilizada. Para cada valor de a utilizado na equação de estado, um valor de ϵ diferente será necessário para aproximar a regra de áreas de Maxwell. Na Figura 27 são apresentadas as curvas de coexistências obtidas através da solução da Equação 2.65 para diferentes valores de a e ϵ . Como pode ser visto na figura, para $a = 1/4$ o valor de ϵ que aproxima a curva de coexistência do método do pseudopotencial com a regra de Maxwell é $\epsilon = 1.94$. Já para $a = 1/16$, este valor varia levemente para $\epsilon = 1.99$. Também apresentou-se os resultados considerando $\epsilon = 0$, que seria o caso de se utilizar a força original proposta por Shan-Chen sem a correção $F_\alpha^{(1)}$ da Equação (5.17). Neste caso, para ambos os valores de a , a curva teórica do método do pseudopotencial desviou significativamente da regra de Maxwell.

5.3.2 Teste de Interface Plana

O procedimento de solução deste teste está descrito na seção 4.5.2. Aqui, utilizou-se os parâmetros $(N_x, N_y) = (50, 201)$ e $W = 5$. Definindo $A_3 = 1/3$ na força de interação, Equação (5.24), realizou-se diversas simulações para diferentes temperaturas. Os resultados são apresentados na Figura 28.a. Para $a = 1/4$ a curva de coexistência obtida numericamente aproximou-se da regra de Maxwell para temperaturas reduzidas acima de 0.6. Para esta temperatura a diferença da densidade de vapor em relação à curva de Maxwell foi de 13%. Porém, apresentou-se uma discrepância de 72% para $T_r = 0.5$. No caso em que $a = 1/16$ a curva numérica ficou mais próximo da regra de Maxwell e o erro para $T_r = 0.5$ foi de 20%.

Figura 28 – (a) Curva de coexistência numérica simulada para $(a, \epsilon) = (1/4, 1.94)$ e $(1/16, 1.99)$. (b) Comparação entre o método da força proposto e os métodos propostos por Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) e Kharmiani, Niazmand e Passandideh-Fard (2019).



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados do método proposto considerando $a = 1/4$ foram comparados com outras abordagens baseadas em força encontradas na literatura. As abordagens escolhidas para comparação foram o procedimento proposto por Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) e Kharmiani, Niazmand e Passandideh-Fard (2019). Nota-se que o procedimento proposto difere-se destes outros: o primeiro não permite um controle de tensão superficial e no segundo as forças de interação são calculadas usando nós mais afastados do que os nós vizinhos. Os resultados dessa comparação foram expostos na Figura 28.b. Observa-se que para o caso da interface plana o procedimento proposto fornece os mesmos resultados de densidade que o método de Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009), enquanto as densidades do método de Kharmiani, Niazmand e Passandideh-Fard (2019) desviaram-se ainda mais da regra de Maxwell.

Com o intuito de avaliar o efeito do parâmetro a nos resultados do método, simulou-se quatro casos de interface plana distintos. Utilizou-se os dois valores de a empregados nos casos anteriores e duas temperaturas reduzidas distintas. Os perfis de densidade em equilíbrio dessas simulações foram apresentados na Figura 29. Observa-se que para valores menores de a a espessura da interface aumenta, comportamento que pode justificar o aumento da precisão numérica dos resultados para a reduzido. Com o aumento da temperatura reduzida também observa-se o crescimento da espessura da interface, justificando os melhores resultados obtidos para altas temperaturas. Com uma espessura maior, as propriedades físicas variam mais suavemente entre uma fase e outra. Assim os erros de discretização, que estão relacionados a gradientes das propriedades físicas, são menores em magnitude.

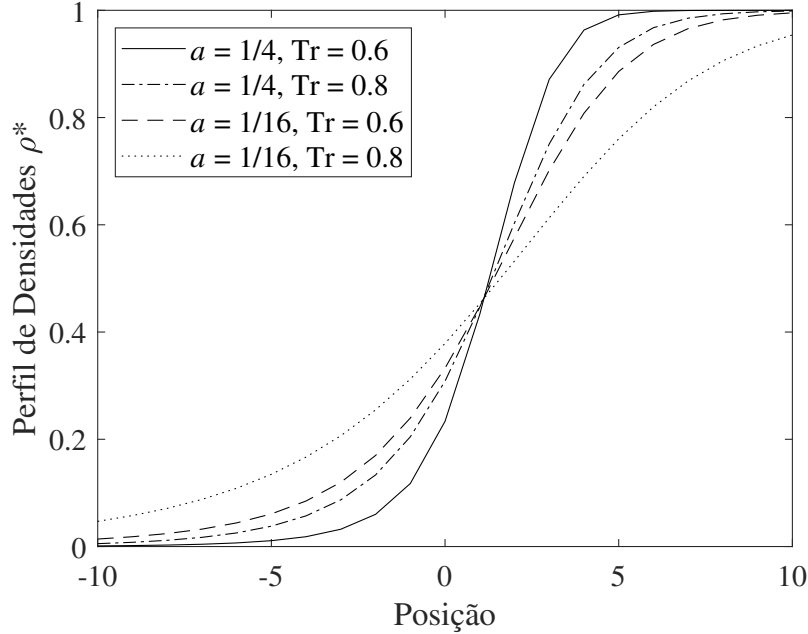
5.3.3 Teste da Gota Estática

Nesta subseção são apresentados resultados de simulações de uma gota estática. Estes testes foram realizados com o intuito de verificar a capacidade do método proposto em variar a tensão superficial de maneira consistente. Os detalhes desta simulação são descritos na seção 4.5.3. Os parâmetros utilizados nas simulações são $(N_x, N_y) = (200, 200)$ e $W = 5$. Todos os testes foram realizados para uma temperatura fixa $T_r = 0.7$. Como nos testes anteriores, utiliza-se $\epsilon = 1.94$ para $a = 1/4$ e $\epsilon = 1.99$ para $a = 1/16$ na equação de Carnahan-Starling. Para um valor de A_3 especificado, são realizadas simulações com diferentes raios. Quando uma simulação atinge o equilíbrio, a tensão superficial é medida utilizando a relação de Young-Laplace:

$$\Delta P = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (5.26)$$

em que R_1 e R_2 são os raios de curvatura da interface. No caso de uma simulação bidimensional de uma gota, há um raio de curvatura de mesma dimensão do raio da gota e o outro raio é infinito. Para medir o raio da gota nas simulação, considerou-se que a

Figura 29 – Comparação entre as espessuras de interface para diferentes valores do parâmetro a e temperaturas reduzidas. A densidade adimensional é dada por $\rho^* = (\rho - \rho_g)/(\rho_l - \rho_g)$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

interface está localizada na região de densidade média ρ_m entre as fases líquido e vapor $\rho_m = (\rho_l + \rho_v)/2$.

Para avaliar a consistência dos resultados de tensão superficial do MBR, é necessário uma solução de referência. Uma possível solução pode ser obtida resolvendo-se a equação do tensor de pressão normal a uma interface plana dada pela Equação (2.60a). Para facilitar a leitura, esta equação é repetida aqui:

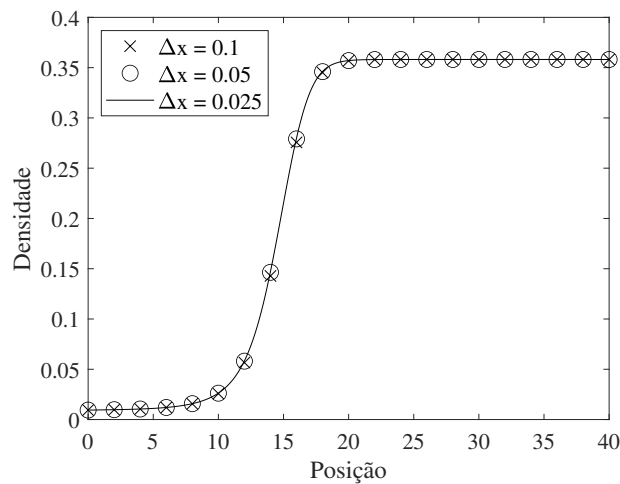
$$p_{xx} = c_s^2 \rho + G\psi^2 + G \left[A_1 \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + (A_2 + A_3) \psi \frac{d^2\psi}{dx^2} \right], \quad (5.27)$$

a qual pode ser resolvida numericamente considerando que p_{xx} é constante ao longo da interface plana. Esta pressão pode ser calculada a partir das densidades das fases obtidas com a Equação (2.65). Conhecidas as densidades das fases, pode-se calcular a pressão como $p_{xx} = p_{EOS}(\rho_v, T) = p_{EOS}(\rho_l, T)$ para uma dada temperatura T . Assim, pode-se discretizar as derivadas espaciais com diferenças finitas e utilizar o método de Newton-Raphson (ATKINSON, 1989) para a solução do sistema não-linear. Utilizando este procedimento, obtém-se o perfil de densidades da interface plana que satisfaz esta equação para a pressão normal. A partir do perfil de densidades, pode-se calcular a tensão superficial teórica para a interface plana através da Equação (5.8).

Para a solução do sistema não-linear é necessária a adoção de condições de contorno

nas fronteiras. Uma primeira consideração é adotar que numa fronteira a densidade é igual ao do vapor saturado para uma determinada temperatura e na outra fronteira, a densidade do líquido saturado. Porém, como o método do pseudopotencial considera uma interface difusa, onde o valor correspondendo ao estado saturado é alcançado apenas “no infinito”, os valores de densidade na fronteira foram levemente ajustados para permitir a convergência. Para uma temperatura $T_r = 0.7$ adotou-se $\rho_g = 0.0094$ e $\rho_l = 0.3581$ nas bordas, valores próximos aos do estado saturado $\rho_g = 0.0093$ e $\rho_l = 0.3581$. Este procedimento foi realizado e o perfil de densidades para os casos $a = 1/4$ e $a = 1/16$ foram obtidos considerando $T_r = 0.7$. Na Figura 30 é apresentado o perfil de densidades obtido pela solução da Equação (5.27) para o caso $a = 1/4$ utilizando-se três malhas diferentes, com espaçamentos entre os nós de tamanhos $\Delta x = 0.1$, $\Delta x = 0.05$ e $\Delta x = 0.025$. Através desta análise chegou-se ao resultado que a tensão superficial para uma interface plana, γ_{IP} , depende do parâmetro A_3 através da relação $\gamma_{IP} = 0.0096A_3$ quando $a = 1/4$ e $\gamma_{IP} = 0.0048A_3$ quando $a = 1/16$.

Figura 30 – Perfil de densidades teórico para uma interface plana. Adotou-se $a = 1/4$, $\epsilon = 1.94$ e $T_r = 0.7$.



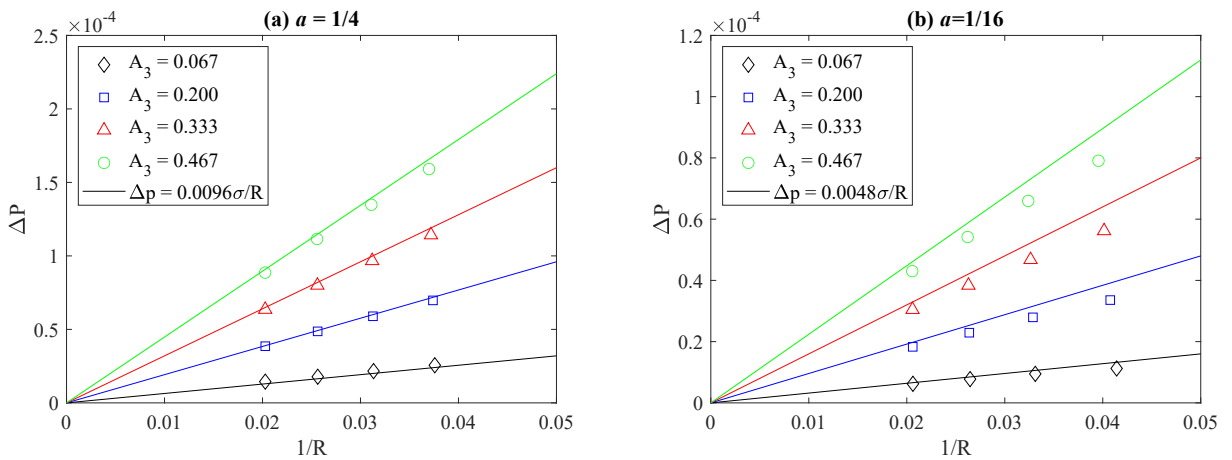
Fonte: Elaborado pelo autor.

Após a obtenção da solução de referência, foram realizadas comparações entre esta solução e os resultados numéricos obtidos através das simulações. Os resultados para o caso $a = 1/4$ são apresentados na Figura 31.a, enquanto que os resultados para $a = 1/16$ são mostrados na Figura 31.b. De maneira geral, pode-se observar que os resultados numéricos ficaram bem próximos dos resultados esperados, mostrando a consistência do método. Para o caso $a = 1/16$, na Figura 31.b, observa-se que para valores de curvatura $1/R$ mais altos, a tensão superficial variou levemente em relação ao resultado teórico.

É importante considerar que o resultado teórico foi obtido para uma interface plana em que a pressão ao longo da interface é constante. Para uma gota, a tensão superficial

altera a pressão ao longo da interface. Desta forma, a solução teórica derivada constitui apenas uma aproximação do caso real. Assim, considerou-se que as diferenças observadas não configuram nenhuma inconsistência. Para valores pequenos de curvatura, quando o raio da gota tende ao infinito, a diferença de pressão entre o interior e o exterior da gota começam a ficar desprezíveis e a solução deve tender ao de uma interface plana. Considerando este fato, observa-se na Figura 31.b que para $1/R \approx 0.02$, os resultados numéricos ficaram mais próximos ao de uma interface plana, confirmando o comportamento esperado.

Figura 31 – (a) Tensão superficial para $a = 1/4$ e (b) para $a = 1/16$ considerando diferentes valores de A_3 .



Fonte: Elaborado pelo autor.

No caso anterior, avaliou-se como a tensão superficial variou com o parâmetro A_3 e com o raio da gota. No próximo teste, buscou-se avaliar como a tensão superficial afeta as densidades de fase do método. Anteriormente, mostrou-se que a curva de coexistência para uma interface plana no método do pseudopotencial depende do parâmetro ϵ . A força de interação proposta foi desenvolvida de forma a permitir a alteração de A_3 sem afetar o parâmetro ϵ e consequentemente as densidades das fases para uma interface plana. Porém, no caso de uma interface curva como uma gota estática, variações ainda podem ocorrer. Para quantificar este efeito, foram realizadas diversas simulações considerando uma gota de raio fixo $R = 50$ para $T_r = 0.7$. A tensão superficial foi alterada por meio do parâmetro A_3 e as densidades das fases foram registradas. Os resultados são apresentados na Tabela 1.

De forma a avaliar se os resultados das densidades das gotas são consistentes, calculou-se uma solução analítica com base na teoria termodinâmica. Considerou-se um sistema isolado de um componente contendo uma gota de líquido cercada de vapor. Neste caso, o trabalho realizado pelo sistema devida uma variação de área dA da interface é $\delta W_{int} = -\gamma dA$. Para uma gota bidimensional, este termo pode ser reescrito como $\delta W_{int} = -\gamma dV/R$, em que R e V são o raio e o volume da gota, respectivamente. A

condição de maximização da entropia para a equação fundamental na forma entrópica fornece as seguintes condições de equilíbrio:

$$T_{in} = T_{out}, \quad p_{in} = p_{out}, \quad \mu_{in} = \mu_{out}, \quad (5.28)$$

sendo que os subscritos *in* e *out* significam dentro e fora da gota, T é a temperatura, p a pressão, γ a tensão superficial e μ o potencial químico. O potencial químico é equivalente à energia livre de Gibbs específica e a seguinte relação é válida:

$$d\mu = -sdT + vdp, \quad (5.29)$$

sendo s a entropia específica e v o volume específico. Como a temperatura no interior e exterior da gota são iguais devido o equilíbrio químico, é possível computar a mudança do potencial químico integrando num caminho de temperatura constante:

$$\mu(\text{Estado } 2) - \mu(\text{Estado } 1) = \int_{\text{Estado } 1}^{\text{Estado } 2} vdp. \quad (5.30)$$

Como a equação de estado fornece uma relação entre p e v , é conveniente reescrever a equação acima usando $vdp = d(vp) - pdv$:

$$\mu(\text{Estado } 2) - \mu(\text{Estado } 1) = (pv)|_{\text{Estado } 2} - (pv)|_{\text{Estado } 1} - \int_{\text{Estado } 1}^{\text{Estado } 2} pdv. \quad (5.31)$$

Escrevendo a equação acima em termos da densidade e substituindo as condições de equilíbrio, obtém-se:

$$\frac{p(T, \rho_{in})}{\rho_{in}} - \frac{p(T, \rho_{out})}{\rho_{out}} + \int_{\rho_{in}}^{\rho_{out}} \frac{p(T, \rho)}{\rho^2} d\rho = 0, \quad (5.32)$$

$$p(T, \rho_{in}) - p(T, \rho_{out}) = \frac{\gamma}{R},$$

para uma equação de estado específica $p = p_{EOS}(T, \rho)$, a equação anterior pode ser resolvida numericamente para ρ_{in} e ρ_{out} . Esta solução será chamada de solução termodinâmica e as densidades das fases obtidas a partir delas são representadas por ρ_v^t e ρ_l^t . Os valores das densidades termodinâmicas são apresentados na Tabela 1, calculados a partir das tensões superficiais γ medidas nas simulações numéricas.

Comparando as densidades do vapor simuladas ρ_v e as calculadas pela teoria termodinâmica ρ_v^t , pode-se observar um comportamento distinto. À medida que se reduz a tensão superficial, o valor de ρ_v^t diminui. Este resultado é consistente, pois à medida que a tensão superficial é reduzida, a pressão dentro e fora da gota tendem ao mesmo valor e assim a solução se aproxima do esperado para uma interface plana. Porém, as densidades de vapor simuladas aumentam de valor a medida que se reduz a tensão superficial, fornecendo um resultado inconsistente.

Tabela 1 – Resultados para diferentes propriedades (tensão superficial e densidades das fases) obtidos em simulações de gotas estáticas com raio $R = 50$ a uma temperatura reduzida $T_r = 0.7$ em função da escolha dos parâmetros a e A_3 . Também apresentou-se os valores das densidades termodinamicamente consistentes para as fases vapor e líquido no caso de uma gota estática, ρ_v^t e ρ_l^t .

a	A_3	γ	ρ_v	ρ_v^t	ρ_l	ρ_l^t
1/4	1.333	0.0128	0.0097	0.0098	0.3609	0.3609
1/4	0.667	0.0063	0.0104	0.0096	0.3596	0.3595
1/4	0.333	0.0031	0.0108	0.0094	0.3590	0.3588
1/4	0.167	0.0016	0.0109	0.0094	0.3587	0.3585
1/4	0.083	8.44e-04	0.0110	0.0093	0.3585	0.3583
1/4	0.042	4.94e-04	0.0111	0.0093	0.3585	0.3582
1/16	1.333	0.0064	0.0095	0.0104	0.3636	0.3636
1/16	0.667	0.0030	0.0109	0.0098	0.3610	0.3608
1/16	0.333	0.0015	0.0116	0.0095	0.3598	0.3595
1/16	0.167	7.42e-04	0.0120	0.0094	0.3592	0.3588
1/16	0.083	3.76e-04	0.0122	0.0094	0.3588	0.3585
1/16	0.042	1.89e-04	0.0122	0.0093	0.3587	0.3583

Fonte: Elaborado pelo autor.

As densidades de fase para o caso da interface plana foram obtidas no método do pseudopotencial resolvendo-se a Equação 5.27, que pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$c_s^2 \rho + G\psi^2 + G \left[A_1 \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \frac{1}{2} \psi \frac{d^2\psi}{dx^2} \right] = cte, \quad (5.33)$$

pois a componente da pressão p_{xx} é constante ao longo da interface plana e $A_2 + A_3 = 1/2$. Para uma gota estática, quando $A_3 = 0$ e, conseqüentemente, a tensão superficial é igual a zero, as densidades das fases deveriam ser iguais às de uma interface plana pela teoria termodinâmica. No equilíbrio estático, a equação de conservação de quantidade de movimento resulta em $\partial_\beta p_{\alpha\beta} = 0$ na ausência de forças externas, sendo $p_{\alpha\beta}$ dado pela Equação (5.23). Para aplicar esta expressão no caso de uma gota estática, deve-se escrevê-la em coordenadas cilíndricas:

$$\partial_r \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + G \left[A_1 \left(\frac{d\psi}{dr} \right)^2 + \frac{1}{2} \psi \frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{1}{2} \frac{\psi}{r} \frac{d\psi}{dr} \right] \right) = 0, \quad (5.34)$$

na expressão acima, já considerou-se $A_3 = 0$ e as derivadas nas direções diferentes da radial iguais a zero. Este resultado implica que o termo entre parênteses deve ser uma constante ao longo da interface. Esta equação é muito similar à Equação (5.33) porém com um termo adicional $0.5(\psi/r)(d\psi/dr)$. Isto prova que para $A_3 = 0$, numa simulação de gota estática, o método do pseudopotencial fornece uma solução diferente da solução da interface plana a não ser que o raio da gota tenda ao infinito.

5.3.4 Testes Dinâmicos: Oscilação de uma gota

O próximo caso será um teste dinâmico que consiste na oscilação de um gota elíptica num meio de vapor. A descrição desse teste está apresentada na seção 4.5.4. As simulações são conduzidas para uma temperatura $T_r = 0.7$. Como discutido anteriormente, quando o valor de a é reduzido na equação de estado, uma melhor concordância é obtida para uma interface plana. Porém, para uma gota, um valor de a menor aumenta o erro da densidade do vapor. Assim, $a = 1/4$ é escolhido para evitar erros significativos para as densidades da gota. Os dados da simulação são: $R_{max} = 30$, $R_{min} = 27$, $(N_x, N_y) = (200, 200)$ e $\tau = 0.55$. O teste de Young-Laplace foi realizado para uma gota de raio $R = 30$ com o intuito de medir a tensão superficial a uma temperatura $T_r = 30$ e diferentes valores de A_3 . O parâmetro de ajuste da curva de saturação foi de $\epsilon = 1.94$. Os resultados de tensão superficial obtidos neste teste são mostrados na Tabela 2. Estes valores foram utilizados para inicializar o perfil elíptico.

Tabela 2 – Densidades de saturação e tensão superficial obtidas para uma gota estática a uma temperatura $T_r = 0.7$ usando a E-CS. Utilizou-se $a = 1/4$ e $\epsilon = 1.94$.

σ	ρ_v	ρ_l	γ
1.333	0.0097	0.3627	0.0133
0.667	0.0109	0.3606	0.0064
0.333	0.0115	0.3596	0.0032
0.167	0.0118	0.3591	0.0016

Fonte: Elaborada pelo autor.

A solução analítica é a apresentada por Lamb (1932). Essa solução é baseada em um caso ideal em que a gota elíptica oscila imersa em vácuo. Uma solução que assume a gota oscilando em um outro meio fluido foi proposta por Miller e Scriven (1968) e já foi utilizada como caso de comparação em outro modelo baseado no MBR (PREMNATH; ABRAHAM, 2005). Esta solução seria mais apropriada como um caso de comparação neste teste, porém ela foi desenvolvida para uma gota tridimensional. Como a simulação realizada neste momento é bidimensional, a solução de Lamb (1932) será usada como um caso aproximado. O período analítico de oscilação da gota é dado pela relação:

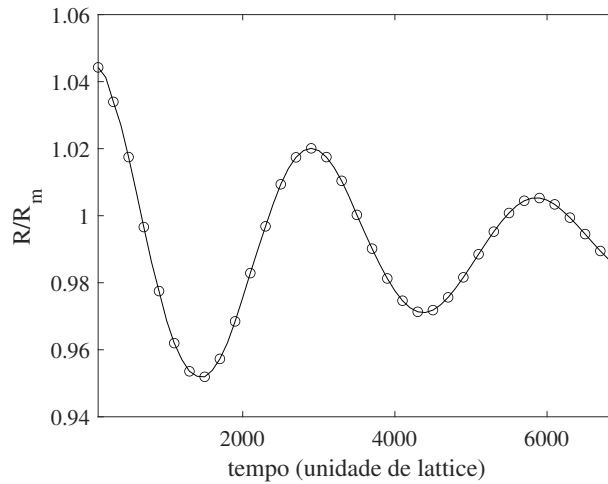
$$T_a = 2\pi \left[n(n^2 - 1) \frac{\gamma}{\rho_l R_m^3} \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.35)$$

em que $R_m = \sqrt{R_{max} R_{min}}$ e $n = 2$ para um perfil elíptico (LI; LUO; LI, 2013; MUKHERJEE; ABRAHAM, 2007).

Nas simulações, a distância entre a extremidade direita da elipse e o seu centro foi medida a cada 100 passos de tempo. O período analítico de oscilação para $T_r = 0.7$ e $\sigma = 1$ é $T_a \approx 4200$. O período numérico de oscilação foi $T_n = 4000$ o que representa um erro relativo de 4.8% em relação à solução analítica. Alterando-se o valor de A_3 é possível

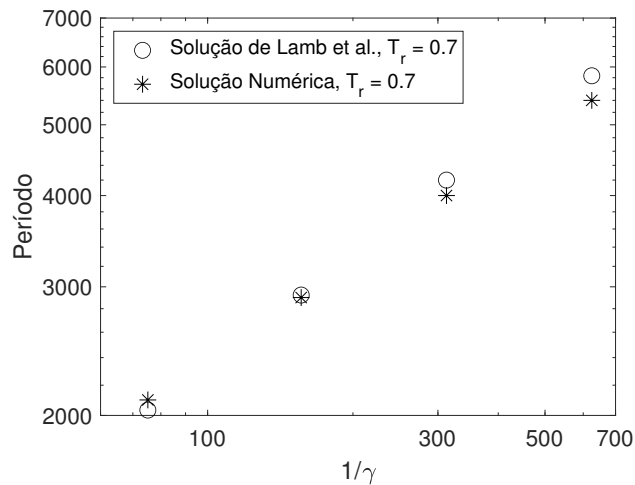
conduzir simulações com diferentes tensões superficiais. Na Figura 32 é apresentado o perfil de oscilação para $T_r = 0.7$ e $A_3 = 0.667$. Os resultados numéricos considerando vários valores de tensão superficial (aqueles apresentados na Tabela 2) estão contidos na Figura 33. Observa-se uma boa concordância entre os resultados numéricos e analíticos, o máximo desvio de ≈ 7.5 foi observado para $A_3 = 0.167$.

Figura 32 – Oscilação de uma gota elíptica para um fluido modelado pela E-CS a $T_r = 0.7$. Os parâmetros usados para calcular a força foram $\epsilon = 1.94$ e $A_3 = 0.667$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 33 – Comparação entre solução numérica e analítica para a oscilação de uma gota. Simulações utilizaram a E-CS com $T_r = 0.7$ e $\epsilon = 1.94$ para diferentes valores de tensão superficial.



Fonte: Elaborado pelo autor.

5.3.5 Testes Dinâmicos: Impacto de uma gota

Para avaliar a estabilidade do método proposto em condições mais severas (em termos de razão de densidade e altas velocidades), realizou-se dois testes de impacto de uma gota em uma parede sólida. A descrição deste teste encontra-se na seção 4.5.5. Os dados de simulação são $(N_x, N_y) = (400, 201)$, $W = 5$, $h = 150$, $R = 40$, $\tau_v = 0.65$ e $\tau_l = 0.53$. Para a fase vapor, utilizou-se uma maior viscosidade cinemática para aumentar a estabilidade da simulação (LI; LUO; LI, 2013).

As duas simulações são realizadas utilizando a E-CS com os mesmos parâmetros das seções anteriores. Na primeira simulação utilizou-se $a = 1/4$, $\epsilon = 1.94$ e $A_3 = 0.67$. A temperatura reduzida foi escolhida como $T_r = 0.37$ o que implica nas densidades de fase $\rho_v = 2.164 \times 10^{-4}$ e $\rho_l = 0.5212$ para uma simulação de gota estática (com um raio de 40 nós). Isto resulta numa razão de densidades de $\rho_l/\rho_v = 2408$. A tensão superficial medida com a relação de Young-Laplace é $\gamma = 0.0203$. Foi observado que para uma temperatura $T_r = 0.35$ a método torna-se instável. Observa-se na Figura 28 que esta condição está além do limite de acurácia do método; porém, o objetivo deste teste é “apenas” verificar o limite de estabilidade num caso dinâmico sem se preocupar com a acurácia do método.

O instante inicial do impacto foi definido quando a gota chega a uma distância pré-estabelecida da parede. Mais precisamente, o contorno da gota é definido como a região onde a densidade do fluido é igual a $\rho_m = (\rho_v + \rho_l)/2$. Quando a menor distância entre o contorno da gota e a fronteira inferior é menor do que 5 nós, considera-se que o impacto começou. A velocidade de impacto foi medida como $U = 0.0467$. Com essas informações é possível calcular os números adimensionais:

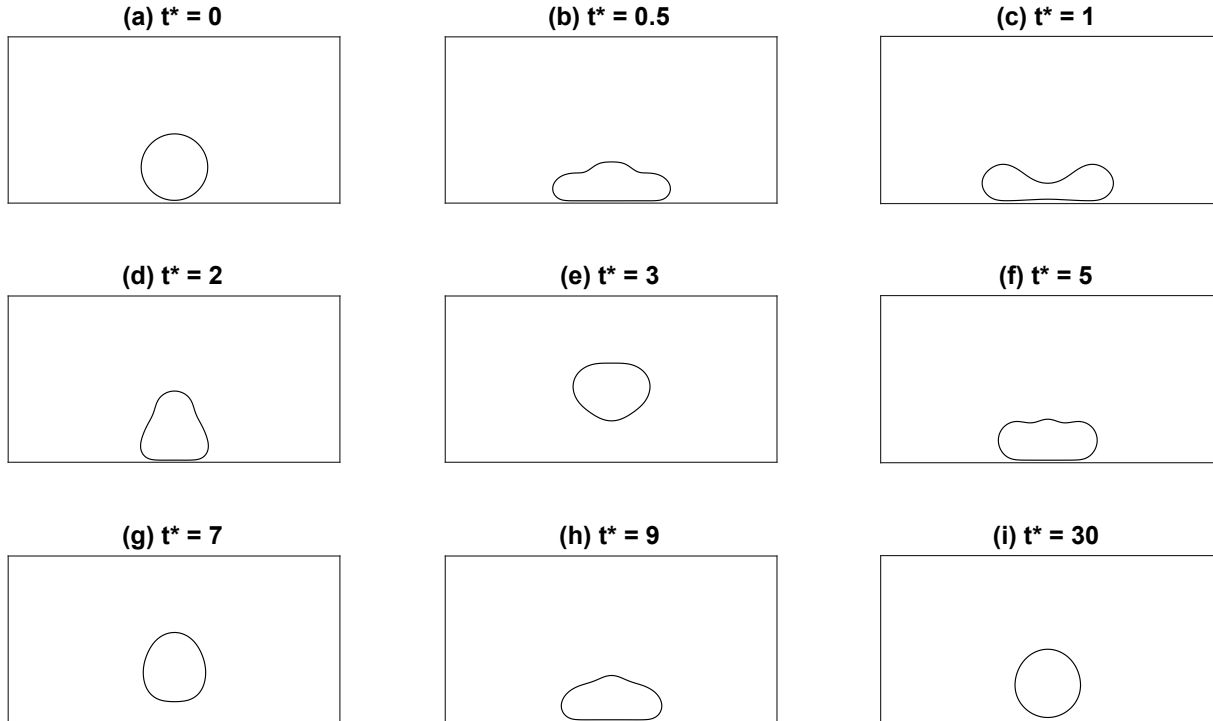
$$We = \frac{\rho_l U^2 D}{\gamma}; \quad Re = \frac{UD}{\nu_l} \quad (5.36)$$

em que We e Re são os números de Weber e Reynolds, respectivamente, e D o diâmetro da gota. Para este caso $We \approx 4.5$ e $Re \approx 373$.

Na segunda simulação definiu-se $a = 1/4$, $\epsilon = 1.94$ e $A_3 = 0.167$. Para uma temperatura de $T_r = 0.37$ uma simulação de gota estática resulta nas densidades $\rho_v = 2.930 \times 10^{-4}$ e $\rho_l = 0.5201$; e uma tensão superficial $\gamma = 0.0055$. A razão de densidades para essa simulação é $\rho_l/\rho_v = 1775$. É observado para essas simulações, assumindo extremamente baixas temperaturas, que a densidade do gás é mais sensível à variação do parâmetro A_3 . Neste caso, é medida uma velocidade de impacto de $U = 0.047$, o que resulta em $We \approx 16.7$ e $Re \approx 376$.

Começando a partir do impacto da gota, diversas imagens da simulação são salvas para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$, em que t é o tempo em unidades de rede. Os resultados da primeira simulação podem ser observados na Figura 34. Após o impacto inicial, a gota começa a deformar alcançando uma deformação máxima em $t^* = 1$. A razão de extensão é definida como a razão entre o comprimento da linha de contato da gota na

Figura 34 – Imagens de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$. Simulações foram realizadas para $\epsilon = 1.94$, $A_3 = 0.67$ e $T_r = 0.37$, resultando numa razão de densidades de aproximadamente 2408. Os números adimensionais são $Re \approx 373$ e $We \approx 4.5$.

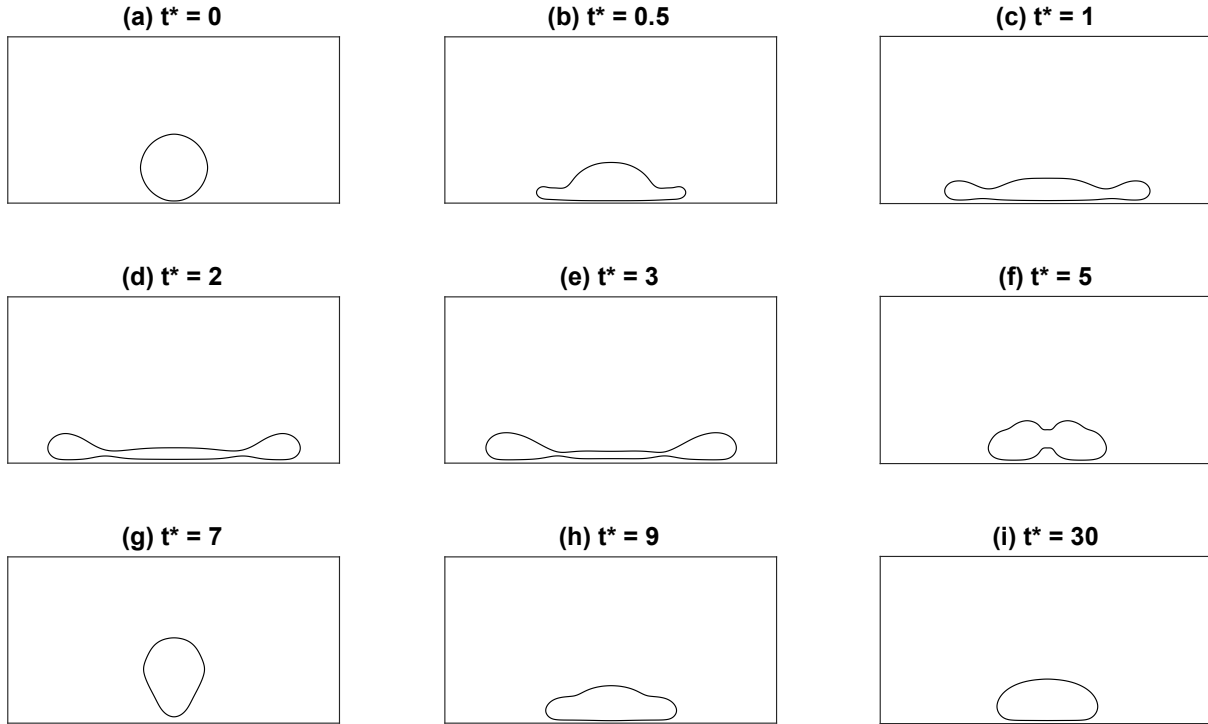


Fonte: Elaborado pelo autor.

parede sólida e o seu diâmetro inicial (GUPTA; KUMAR, 2011). Neste caso, a máxima razão de extensão foi 1.47. Após a gota atingir a sua máxima deformação, ela começa a contrair. Como a viscosidade usada na simulação é muito baixa, observa-se apenas uma pequena dissipação viscosa. Assim, após a colisão, a gota ainda possui energia cinética suficiente para contrair e subir novamente, afastando-se da parede sólida como observado no tempo $t^* = 3$. A gota então colide novamente com a parede sólida e continua a se deformar em $t^* = 5$. Observa-se mais um movimento ascendente em $t^* = 7$.

Na segunda simulação, a tensão superficial foi reduzida por um fator de aproximadamente 3.7. Diversas imagens para instantes de tempos distintos são mostrados na Fig. 35. Devido ao maior número de Weber, a gota se deforma muito mais em relação ao caso anterior. A máxima razão de extensão é de 3.47. No tempo $t^* = 3$, observa-se que maior parte do líquido está nas extremidades da gota e a espessura no seu centro é muito pequena. Após este instante, a gota começa a se contrair e, devido a baixa dissipação viscosa, possui energia suficiente para iniciar um movimento ascendente em $t^* = 7$. Finalmente, a gota atinge a parede novamente e continua a se deformar como em $t^* = 9$ e $t^* = 30$. Estes resultados mostram a estabilidade do método em simulações mais severas.

Figura 35 – Imagens de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$. Simulações foram realizadas para $\epsilon = 1.94$, $A_3 = 0.167$ e $T_r = 0.37$, resultando numa razão de densidades de aproximadamente 1775. Os números adimensionais são $Re \approx 376$ e $We \approx 16.7$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

5.4 Abordagem da Pressão: Desenvolvimento Teórico

5.4.1 Análise do esquema de pressão

Nesta seção será discutida a abordagem de pressão. Esta ainda não foi utilizada no contexto do método do pseudopotencial, o que será feito neste trabalho. Abordagens de pressão foram desenvolvidas no contexto do método da energia livre, sendo uma primeira formulação proposta por Swift, Osborn e Yeomans (1995). Posteriormente, Holdych *et al.* (1998) propôs novas correções para a abordagem de Swift *et al.*, a fim de se reduzir efeitos de erros de discretização que faziam o método violar a invariância de Galileo. No esquema proposto por Swift *et al.*, a EMBR assume o seguinte formato:

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - f_i(t, \mathbf{x}) = \frac{\Delta t}{\tau} (f_i^{eq} - f_i + S_i), \quad (5.37)$$

sendo os momentos do termo fonte S_i dados pelas expressões:

$$\begin{aligned}
\sum_i S_i &= 0, \\
\sum_i c_{i\alpha} S_i &= 0, \\
\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} S_i &= A_{\alpha\beta}.
\end{aligned} \tag{5.38}$$

No trabalho original, Swift *et al.* definiram $A_{\alpha\beta} = p'_{\alpha\beta}$. É conhecido na literatura que esta abordagem gera erros de discretização que afetam os resultados finais do método. Assim, neste momento não será especificado o formato de $A_{\alpha\beta}$. Primeiramente será realizada uma análise das equações macroscópicas resultantes das Equações (5.37) e (5.38). Após os erros de discretização desta formulação terem sido identificados, uma definição apropriada para o termo $A_{\alpha\beta}$ será adotada. Assim, será criado um método consistente para a introdução de um novo tensor de pressão $p'_{\alpha\beta}$ nas equações macroscópicas.

Uma análise do esquema numérico composto pelas Equações (5.37) e (5.38) já foi realizada por Wagner (2006). Neste trabalho, esta análise será feita novamente e um resultado um pouco diferente do apresentado por estes autores será obtido. A análise será feita usando o procedimento de substituição recursiva desenvolvido por Wagner (1997). Expandindo a Equação (5.37) em séries de Taylor:

$$\sum_k \frac{(\Delta t)^k}{k!} (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha)^k f_i = \frac{\Delta t}{\tau} (f_i^{eq} - f_i + S_i). \tag{5.39}$$

O termo do lado esquerdo da equação representa uma soma de infinitos termos. Através do truncamento em um número finito de termos, pode-se obter diferentes aproximações para esta equação como as mostradas a seguir:

$$\Delta t (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i + O(\Delta t^2) = \frac{\Delta t}{\tau} (f_i^{eq} - f_i + S_i), \tag{5.40a}$$

$$\Delta t (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i + \frac{\Delta t^2}{2} (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha)^2 f_i + O(\Delta t^3) = \frac{\Delta t}{\tau} (f_i^{eq} - f_i + S_i). \tag{5.40b}$$

Para se obter as equações de conservação de massa e quantidade de movimento correspondentes, é necessário calcular os momentos de ordem 0 e 1 das Equações (5.40a) e (5.40b), respectivamente. Para a Equação (5.40b), necessita-se do conhecimento de momentos da função de distribuição de ordem 2, como por exemplo $\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i$. Porém, este momento é desconhecido, o que exige alguma estratégia para tornar-se possível a determinação das equações de conservação. O procedimento utilizado neste trabalho consiste numa substituição recursiva (WAGNER, 1997).

O ponto de partida consiste em reescrever a Equação (5.40a) na seguinte forma:

$$f_i = f_i^{eq} + S_i - \tau (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i + O(\tau \Delta t). \tag{5.41}$$

Note-se que, ao invés de se escrever apenas $O(\Delta t)$, optou-se por considerar a influência do tempo de relaxação τ na ordem do esquema. Agora será explicado o porque desta escolha. Considere o tempo de relaxação em unidades de rede $\tau_u = \tau/\Delta t$. Na prática, este parâmetro não assume valores arbitrários. Este sempre deve ser superior a 0.5, pois abaixo deste valor o método torna-se instável. Por outro lado, este valor também não deve muito superior a 1, pois isto faz os erros numéricos do método se tornarem maiores (KRÜGER *et al.*, 2017). De maneira geral, nos trabalhos de MBR encontrados na literatura $\tau_u < 2$, sendo na maioria dos casos $\tau_u < 1$. Desta forma, pode-se concluir que $\tau = O(\Delta t)$. Assim, a Equação (5.41), pode ser escrita como:

$$f_i = f_i^{eq} + S_i - \tau_u \Delta t (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) f_i + O(\Delta t^2). \quad (5.42)$$

Esta expressão é então substituída recursivamente nela mesma. Assim, obtém-se uma expressão para f_i em termos de f_i^{eq} e S_i :

$$f_i = f_i^{eq} + S_i - \tau_u \Delta t (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) (f_i^{eq} + S_i) + O(\Delta t^2). \quad (5.43)$$

Assim, obteve-se uma aproximação para f_i que permite o cálculo dos momentos anteriormente desconhecidos. Inserindo a Equação (5.43) no lado esquerdo da Equação (5.40b), pode-se reescrevê-la em termos de f_i^{eq} e S_i :

$$\begin{aligned} (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) (f_i^{eq} + S_i) - \Delta t (\partial_t + c_{i\alpha} \partial_\alpha) \hat{\tau}_u (\partial_t + c_{i\beta} \partial_\beta) (f_i^{eq} + S_i) + O(\Delta t^2) \\ = \frac{1}{\tau} (f_i^{eq} - f_i + S_i), \end{aligned} \quad (5.44)$$

sendo:

$$\hat{\tau} = \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right); \quad \hat{\tau}_u = \frac{\hat{\tau}}{\Delta t} = \left(\tau_u - \frac{1}{2} \right). \quad (5.45)$$

O lado direito da Equação (5.44) depende de f_i , em que os momentos de ordem 0 e 1 são conhecidos. Já o lado esquerdo depende exclusivamente de f_i^{eq} e S_i , que possuem momentos conhecidos. Assim, os momentos de ordem 0 e 1 de toda esta expressão podem ser calculados de forma explícita. Calculando o momento de ordem zero desta equação, obtém-se:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) - \Delta t \left[\partial_t (\hat{\tau}_u \partial_t \rho + \hat{\tau}_u \partial_\alpha (\rho u_\alpha)) \right. \\ \left. + \partial_\alpha (\hat{\tau}_u \partial_t (\rho u_\alpha) + \hat{\tau}_u \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \hat{\tau}_u \partial_\beta A_{\alpha\beta}) \right] + O(\Delta t^2) = 0, \end{aligned} \quad (5.46)$$

esta equação também pode ser reescrita nos seguintes formatos:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) + O(\Delta t) = 0, \quad (5.47a)$$

$$\Delta t [\partial_t (\hat{\tau}_u \partial_t \rho + \hat{\tau}_u \partial_\alpha (\rho u_\alpha))] = O(\Delta t^2). \quad (5.47b)$$

Note-se que a Equação (5.47b) é obtida através da multiplicação da Equação (5.47a) por $\hat{\tau}_u$ e então derivando no tempo todos os termos. Usando a Equação (5.47b) para substituir o primeiro termo entre parenteses na Equação (5.46), obtém-se:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) - (\Delta t) \partial_\alpha \left[\hat{\tau}_u \left(\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + A_{\alpha\beta}) \right) \right] + O(\Delta t^2) = 0. \quad (5.48)$$

Antes de continuar a análise da equação de conservação de massa, será calculado o momento de ordem 1 da Equação (5.44):

$$\begin{aligned} & \partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + A_{\alpha\beta}) \\ & - \Delta t \left[\partial_t (\hat{\tau}_u \partial_t (\rho u_\beta) + \hat{\tau}_u \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \hat{\tau}_u \partial_\alpha A_{\alpha\beta}) \right. \\ & + \partial_\alpha (\hat{\tau}_u \partial_t (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \hat{\tau}_u \partial_\gamma (\rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}))) \\ & \left. + \partial_\alpha (\hat{\tau}_u \partial_t A_{\alpha\beta}) \right] + O(\Delta t^2) = 0. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Esta equação pode ser reescrita nos seguintes formatos, considerando apenas os termos de ordem menor que $O(\Delta t)$:

$$\partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + A_{\alpha\beta}) + O(\Delta t) = 0, \quad (5.50a)$$

$$\Delta t \left[\partial_t (\hat{\tau}_u \partial_t (\rho u_\beta) + \hat{\tau}_u \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \hat{\tau}_u \partial_\alpha A_{\alpha\beta}) \right] = O(\Delta t^2). \quad (5.50b)$$

Olhando cuidadosamente para a Equação (5.50a), nota-se que esta é equivalente ao termo entre parênteses da Equação (5.48). Assim, pode-se simplificar esta última expressão para obter a equação de conservação de massa com segunda ordem de acurácia:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) + O(\Delta t^2) = 0. \quad (5.51)$$

Retornando a análise da equação de quantidade de movimento, observa-se que a Equação (5.50b) foi obtida através da multiplicação da Equação (5.50a) por $\hat{\tau}_u$, depois tomando-se a derivada temporal de toda a expressão e, por fim, multiplicando tudo por Δt . Substituindo a Equação (5.50b) em (5.49), obtém-se:

$$\begin{aligned} & \partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} + A_{\alpha\beta}) - (\Delta t) \partial_\alpha \left[\hat{\tau}_u \left(\partial_t (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) \right. \right. \\ & \left. \left. + \partial_\gamma (\rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta})) \right) + \partial_t A_{\alpha\beta} \right] + O(\Delta t^2) = 0. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Os dois primeiros termos dentro dos colchetes podem ser reescritos na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \partial_t(\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \partial_\gamma(\rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta})) \\
&= \overbrace{c_s^2 \delta_{\alpha\beta} (\partial_t \rho + u_\gamma \partial_\gamma \rho + \rho \partial_\gamma u_\gamma)}^{\text{Termo 1}} \\
&+ \overbrace{u_\alpha u_\beta (\partial_t \rho + u_\gamma \partial_\gamma \rho + \rho \partial_\gamma u_\gamma)}^{\text{Termo 2}} \\
&+ \overbrace{u_\alpha (\rho \partial_t u_\beta + \rho u_\gamma \partial_\gamma u_\beta + \partial_\beta \rho c_s^2)}^{\text{Termo 3}} \\
&+ \overbrace{u_\beta (\rho \partial_t u_\alpha + \rho u_\gamma \partial_\gamma u_\alpha + \partial_\alpha \rho c_s^2)}^{\text{Termo 4}} \\
&+ \overbrace{\rho c_s^2 (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) - \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)}^{\text{Termo 5}}.
\end{aligned} \tag{5.53}$$

Na expressão acima, os termos 1 e 2 podem ser simplificados usando a equação de conservação de massa, Equação (5.51). Os termos 3 e 4 podem ser simplificados usando-se a aproximação para equação de quantidade de movimento, Equação (5.50a). Seguindo este procedimento, obtém-se o seguinte resultado:

$$\begin{aligned}
& \partial_t(\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + \partial_\gamma(\rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta})) = \rho c_s^2 (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) \\
& - u_\alpha \partial_\gamma A_{\beta\gamma} - u_\beta \partial_\gamma A_{\alpha\gamma} - \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma) + O(\Delta t).
\end{aligned} \tag{5.54}$$

Além disso, o último termo entre colchetes da Equação (5.52) pode ser reescrito com a ajuda da equação de conservação de massa:

$$\partial_t A_{\alpha\beta} = \partial_\rho A_{\alpha\beta} \partial_t \rho = -\partial_\rho A_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma). \tag{5.55}$$

Então, substituindo-se as Equações (5.54) e (5.55) em (5.52), obtém-se a seguinte equação de conservação de quantidade de movimento:

$$\begin{aligned}
& \partial_t(\rho u_\beta) + \partial_\alpha(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha \left[c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + A_{\alpha\beta} + \hat{\tau} (u_\beta \partial_\alpha A_{\alpha\gamma} + u_\alpha \partial_\beta A_{\beta\gamma} + \partial_\rho A_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma)) \right] \\
& + \partial_\alpha (\mu (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)) - \partial_\alpha (\hat{\tau} \partial_\gamma (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)) + O(\Delta t^2),
\end{aligned} \tag{5.56}$$

sendo $\mu = \rho c_s^2 \hat{\tau}$ a viscosidade dinâmica do fluido.

5.4.2 Abordagem de pressão melhorada

Observando em mais detalhes a Equação (5.56), nota-se que o esquema numérico resultou no seguinte tensor de pressão:

$$p_{\alpha\beta} = c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta} + A_{\alpha\beta} + (\Delta t) \hat{\tau}_u (u_\beta \partial_\gamma A_{\alpha\gamma} + u_\alpha \partial_\gamma A_{\beta\gamma} + \partial_\rho A_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma)), \tag{5.57}$$

lembrando que $\hat{\tau} = \hat{\tau}_u \Delta t$. Agora serão analisadas algumas estratégias para substituir o tensor de pressão original da EMBR, $c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta}$, por um novo tensor de pressão $p_{\alpha\beta}^{new}$.

Uma primeira aproximação consiste em selecionar $A_{\alpha\beta} = p'_{\alpha\beta} = p_{\alpha\beta}^{new} - c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta}$ na expressão acima, procedimento equivalente ao esquema de pressão original proposto por Swift, Osborn e Yeomans (1995). O tensor de pressão resultante é dado por:

$$p_{\alpha\beta} = p_{\alpha\beta}^{new} + (\Delta t) \hat{\tau}_u \left(u_\beta \partial_\gamma p'_{\alpha\gamma} + u_\alpha \partial_\gamma p'_{\beta\gamma} + \partial_\rho p'_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \right), \quad (5.58)$$

observa-se termos de erro em relação ao resultado desejado que seria $p_{\alpha\beta} = p_{\alpha\beta}^{new}$. Pode-se reduzir a ordem destes termos de erro através da seguinte escolha:

$$A_{\alpha\beta} = p'_{\alpha\beta} - (\Delta t) \hat{\tau}_u \left(u_\beta \partial_\gamma p'_{\alpha\gamma} + u_\alpha \partial_\gamma p'_{\beta\gamma} + \partial_\rho p'_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \right). \quad (5.59)$$

Substituindo esta expressão na Equação (5.57), obtém-se o seguinte tensor de pressão:

$$p_{\alpha\beta} = p_{\alpha\beta}^{new} + O(\Delta t^2), \quad (5.60)$$

o que consiste numa forma mais precisa.

Agora, considera-se o caso em que se deseja inserir uma equação de estado qualquer na EMBR: $p_{\alpha\beta}^{new} = p_{EOS} \delta_{\alpha\beta}$. Definiu-se as seguintes relações: $p'_{\alpha\beta} = p' \delta_{\alpha\beta}$ em que $p' = p_{EOS} - c_s^2 \rho$. Desta forma, obtém-se a seguinte expressão para $A_{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned} A_{\alpha\beta} &= p' \delta_{\alpha\beta} - \hat{\tau} u_\alpha \partial_\gamma p' \delta_{\beta\gamma} - \hat{\tau} u_\beta \partial_\gamma p' \delta_{\alpha\gamma} - \hat{\tau} \partial_\rho p' \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \\ &= p' \delta_{\alpha\beta} - \hat{\tau} u_\alpha \partial_\beta p' - \hat{\tau} u_\beta \partial_\alpha p' - \hat{\tau} \partial_\rho p' \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Os termos que correspondem a derivadas de p' podem ser discretizados utilizando os momentos definidos no começo deste capítulo. Como p' é uma função da densidade, o termo $\partial_\rho p'$ pode ser determinado analiticamente, desde que haja uma expressão explícita para $p_{EOS} = p_{EOS}(\rho)$. No caso de um sistema multifásico de um componente, o tensor de pressão que deseja-se impor ao método é o dado pela Equação (5.5). Como o tensor natural do MBR é igual a $p_{\alpha\beta} = c_s^2 \rho \delta_{\alpha\beta}$, a componente $p'_{\alpha\beta}$ que deve ser inserida dentro do método para converter este tensor natural no tensor desejado é dada pela seguinte expressão:

$$p'_{\alpha\beta} = \left(G\psi^2 + A_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + A_2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (5.62)$$

O termo $A_{\alpha\beta}$ é calculado usando a Equação (5.59). Alguns dos termos dessa equação dependem de derivadas do tensor de pressão, como por exemplo $\partial_\gamma p'_{\alpha\gamma}$. Porém, alguns termos de $p'_{\alpha\beta}$ já constituem derivadas de ordem 2. Assim, as derivadas de ordem mais alta de $\partial_\gamma p'_{\alpha\gamma}$ não podem ser calculadas apenas utilizando nós vizinhos. Uma alternativa é desprezar os gradientes de $\partial_\gamma p'_{\alpha\gamma}$ neste cálculo e assim utilizar as aproximações:

$$u_\beta \partial_\gamma p'_{\alpha\gamma} \approx u_\beta \partial_\gamma (G\psi^2) \delta_{\alpha\gamma}; \quad u_\alpha \partial_\gamma p'_{\beta\gamma} \approx u_\alpha \partial_\gamma (G\psi^2) \delta_{\beta\gamma}; \quad \partial_t p'_{\alpha\beta} \approx \partial_t (G\psi^2) \delta_{\alpha\beta}; \quad (5.63)$$

Dessa forma $A_{\alpha\beta}$ é dado por:

$$\begin{aligned} A_{\alpha\beta} &= \left(G\psi^2 + A_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + A_2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi \\ &\quad - \hat{\tau} u_\alpha \partial_\beta (G\psi^2) - \hat{\tau} u_\beta \partial_\alpha (G\psi^2) + \hat{\tau} \partial_t (G\psi^2) \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Seguindo o padrão adotado ao longo de todo o trabalho, as simulações numéricas são realizadas em unidades de rede. Por simplificação, nas próximas seções não serão feitas distinções para as variáveis quanto o seu sistema de unidades. Por exemplo, ao invés de se referir a τ_u e $c_{s,u}^2$, serão apenas utilizados τ e c_s^2 , e estes já estarão em unidades de rede.

5.5 Abordagem da Pressão: Testes de Validação

5.5.1 Teste da oscilação suave de um gás ideal

Como afirmado anteriormente, as abordagens baseadas na pressão foram desenvolvidas no contexto do método da energia livre. Neste trabalho, buscou-se melhorar este método eliminando erros de discretização e aplicando-o no contexto do método do pseudopotencial. Nesta subseção, serão comparados os três esquemas de pressão: o proposto por Swift, por Holdych e o apresentado neste trabalho. Para comparar diferentes métodos, faz-se necessário um problema em que a solução é conhecida. Neste trabalho, selecionou-se o problema de oscilação suave de um fluido modelado por um gás ideal. Este teste é descrito na seção (4.5.7). A comparação entre os diferentes métodos será feita para um caso isotérmico.

O primeiro modelo a ser comparado com a solução analítica é o proposto por Swift. Este modelo será usado para adicionar uma nova equação de estado ao método, substituindo a tradicional $p = \rho c_s^2$ por uma nova equação de gás-ideal isotérmica $p = \rho R_g T_0$, porém com $R_g T_0 = 1/5$ que difere-se do caso anterior em que $c_s^2 = 1/3$. Assim, o termo $A_{\alpha\beta}$ toma o seguinte formato:

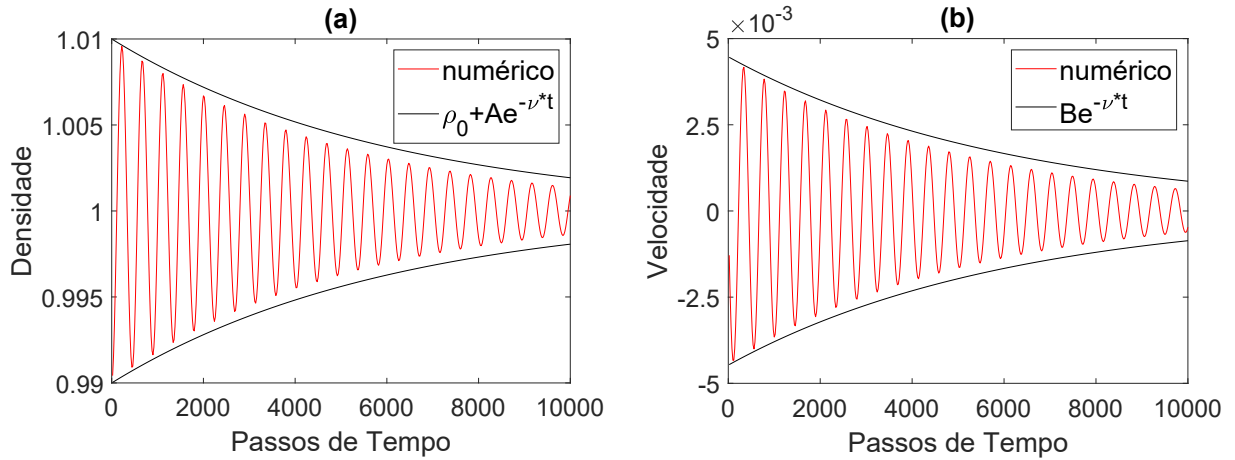
$$A_{\alpha\beta} = (\rho R_g T_0 - \rho c_s^2) \delta_{\alpha\beta}. \quad (5.65)$$

Os parâmetros de simulação são: $L = 200$, $\rho_0 = 1$, $\tau = 1$, $R_g T_0 = 1/5$ e $A = 0.01$. Com estes valores, os outros parâmetros da solução analítica descrita na seção (4.5.7) podem ser calculados. Estes são $B = 0.0045$, $\nu = 1.649 \times 10^{-4}$, $\omega = 0.0140$ e $\theta_1 = 0.0117$.

Na simulação com o modelo de Swift, acompanhou-se os valores da densidade e da velocidade do fluido numa determinada posição do domínio $L_x = 50$. As oscilações destes valores numéricos ao longo do tempo foram comparadas com a solução analítica. Estes resultados são mostrados na Figura 36. O parâmetro ν está relacionado ao decaimento da solução analítica. Como pode-se observar, o decaimento da solução numérica não coincidiu com o da analítica. Este resultado indica que os erros presentes no método de Swift estão causando uma alteração não desprezível no comportamento físico do método.

O próximo modelo testado é o proposto por Holdych *et al.* (1998). Este se assemelha em partes ao que propõe a Equação (5.61). Porém, nos termos de correção que possuem derivadas como $\partial_\beta p'$, foi utilizada a aproximação $p' = -c_s^s \rho$ ao invés de $p' = p_{EOS} - c_s^2 \rho$. Como o modelo foi desenvolvido para problemas multifásicos, os autores argumentaram que os gradientes de densidade entre as duas fases são mais relevantes do que os gradientes

Figura 36 – Comparação da solução numérica do MBR com o modelo do Swift e a solução analítica para: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido na mesma posição.



Fonte: Elaborado pelo autor.

de pressão. Desta forma, os termos na forma $\partial_\beta p_{EOS}$ seriam desprezados e apenas os termos $\partial_\beta(c_s^2\rho)$ seriam considerados.

A hipótese de Holdych *et al.* foi feita para a interface, mas não foram realizados estudos de como isto afeta as regiões monofásicas. Esta avaliação será feita neste teste, em que o método de Holdych *et al.* será utilizado para modelar um fluido monofásico, mais especificamente um gás-ideal. Neste caso, o termo $A_{\alpha\beta}$ é dado por:

$$A_{\alpha\beta} = (\rho R_g T_0 - \rho c_s^2) \delta_{\alpha\beta} + \hat{\tau} c_s^2 (u_\alpha \partial_\beta \rho + u_\beta \partial_\alpha \rho + \partial_\gamma (\rho u_\gamma) \delta_{\alpha\beta}). \quad (5.66)$$

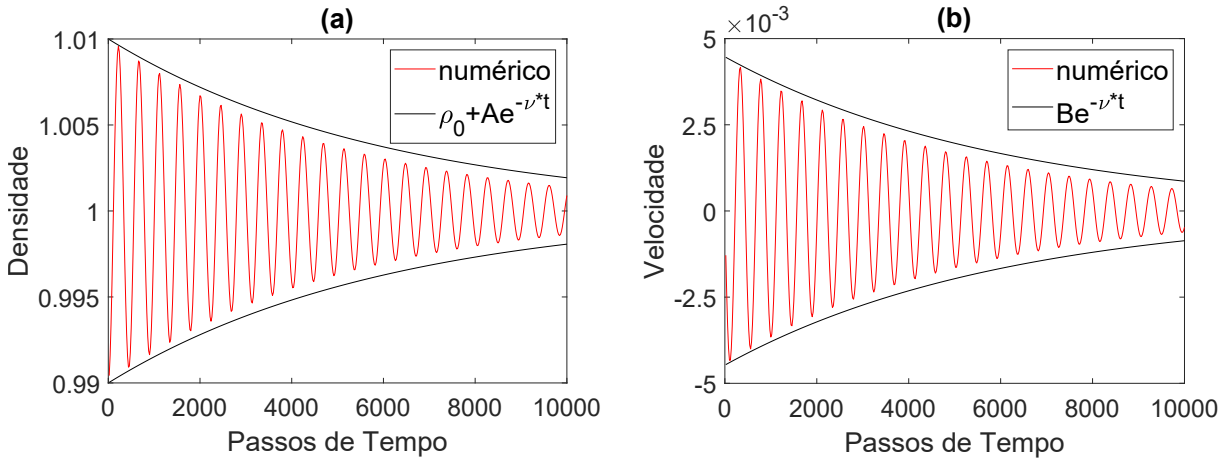
Todos os parâmetros são os mesmos utilizados no teste do modelo de Swift *et al.* e a solução analítica também é a mesma. Os resultados são apresentados na Figura 37. Pode-se observar que o decaimento da amplitude de oscilação na simulação não coincidiu com a solução analítica. Isto indica que os termos de correção propostos por Holdych *et al.* não são suficientes para garantir uma solução consistente na região monofásica.

O último modelo testado é o proposto neste trabalho que, neste caso, é dado pela Equação (5.61). Os resultados deste caso são apresentados na Figura 38. Observa-se que uma excelente concordância entre o resultado numérico e o analítico, mostrando que os termos de correção propostos foram suficientes para garantir a consistência da solução.

As simulações realizadas até agora foram todas casos isotérmicos. Falta agora testar um caso com transferência de calor. Para isto, é necessário combinar o MBR com uma equação de conservação de energia (ECE). Para um caso unidimensional, a ECE em termos de energia interna (ECE-I) na forma não conservativa pode ser escrita como:

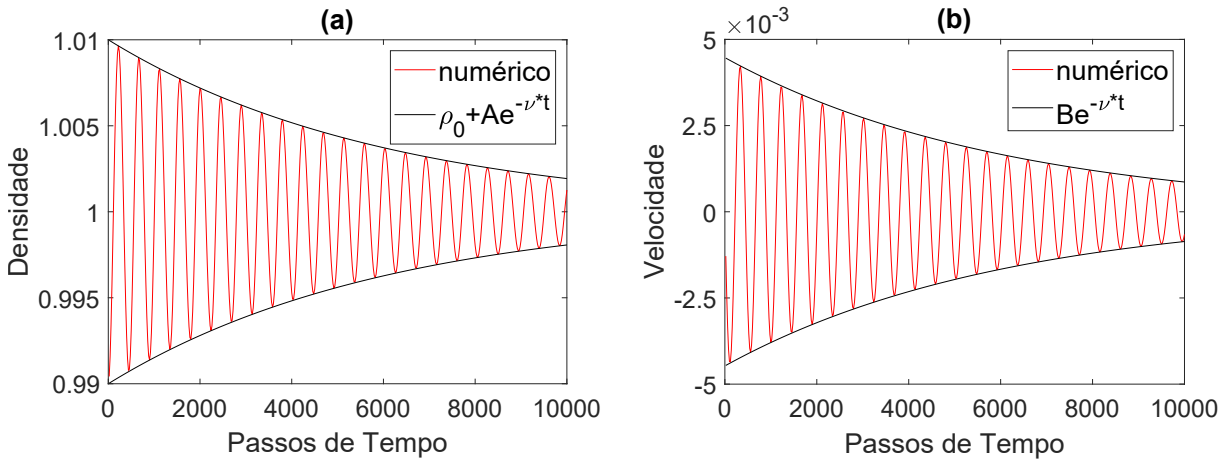
$$\rho \frac{de_i}{dt} = \partial_x (\kappa \partial_x T) - p \partial_x u_x + 2\mu (\partial_x u_x)^2, \quad (5.67)$$

Figura 37 – Comparação da solução numérica do MBR com o modelo do Holdych e a solução analítica para: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido na mesma posição.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 38 – Comparação entre solução numérica do MBR com o modelo proposto neste trabalho e a solução analítica para: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) velocidade do fluido na mesma posição.



Fonte: Elaborado pelo autor.

sendo e_i a energia interna. Para um gás-ideal $e_i = c_v T$ e $p = \rho R_g T$. Considerando $\kappa = cte$, a ECE-I assume a seguinte forma:

$$\partial_t T = -u_x \partial_x T + \alpha \partial_x^2 T - \frac{p}{\rho c_v} \partial_x u_x + 2 \frac{\nu}{c_v} (\partial_x u_x)^2, \quad (5.68)$$

em que $\alpha = \kappa / (\rho c_v)$. O próximo passo é a discretização das derivadas espaciais e temporais desta equação. As derivadas espaciais foram discretizadas utilizando esquemas centrais de

segunda ordem:

$$\partial_x \phi(x) \approx D_x \phi = \frac{\phi(x + \Delta x) - \phi(x - \Delta x)}{\Delta x}, \quad (5.69a)$$

$$\partial_x^2 \phi(x) \approx D_x^2 \phi(x) = \frac{\phi(x + \Delta x) - 2\phi(x) + \phi(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2}. \quad (5.69b)$$

Nas expressões acima, utilizou-se $D_x \phi(x)$ e $D_x^2 \phi(x)$ para referir-se aos procedimentos de diferenciação discreta. Para a discretização no tempo, é utilizado o método previsor-corretor de segunda ordem de acurácia:

$$\partial_t \phi(t) = \mathcal{F}(t, \phi(t)), \quad (5.70a)$$

$$\phi^p(t + \Delta t) = \phi(t) + \Delta t \mathcal{F}(t, \phi(t)), \quad (5.70b)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi(t) + \frac{\Delta t}{2} [\mathcal{F}(t, \phi(t)) + \mathcal{F}(t + \Delta t, \phi^p(t + \Delta t))]. \quad (5.70c)$$

Note-se que o problema em questão envolve muitas variáveis e não apenas uma. Por este motivo, será explicado em mais detalhes como ocorre esta discretização. Considere que ϕ_j^n corresponde a uma variável numa determinada variável na posição x_j e no tempo t_n . Considere também que ϕ_{j+1}^{n+1} corresponde a mesma variável na posição $x_j + \Delta x$ e no tempo $t_n + \Delta t$. O esquema numérico pode ser escrito no seguinte formato:

$$D_t T_j^n = -u_j^n D_x T_j^n + \alpha D_x^2 T_j^n - \frac{p_j^n}{\rho_j^n c_v} D_x u_j^n + 2 \frac{\nu}{c_v} (D_x u_j^n)^2, \quad (5.71a)$$

$$T_j^{p,n+1} = T_j^n + \Delta t \cdot D_t T_j^n, \quad (5.71b)$$

$$D_t T_j^{p,n+1} = -u_j^{n+1} D_x T_j^{p,n+1} + \alpha D_x^2 T_j^{p,n+1} - \frac{p_j^{n+1}}{\rho_j^{n+1} c_v} D_x u_j^{n+1} + 2 \frac{\nu}{c_v} (D_x u_j^{n+1})^2, \quad (5.71c)$$

$$T_j^{n+1} = T_j^n + \frac{\Delta t}{2} [D_t T_j^n + D_t T_j^{p,n+1}], \quad (5.71d)$$

ou seja, a partir da aproximação para a derivada temporal $D_t T_j^n$ no tempo t_n , calcula-se uma predição para a temperatura $T_j^{p,n+1}$ no tempo $t_n + \Delta t$. Então, também calcula-se uma predição para a derivada temporal da temperatura $D_t T_j^{p,n+1}$ neste mesmo instante de tempo. Com estes dados, calcula-se por fim o valor final da temperatura T_j^{n+1} no instante $t_n + \Delta t$. Os valores de ρ_j^{n+1} e u_j^{n+1} são obtidos a partir da resolução do MBR.

Um último detalhe sobre a resolução do MBR em conjunto com a ECE-I está relacionado ao acoplamento entre os métodos. Isto se dá através da equação de estado $p_{EOS} = f(\rho, T)$ que é uma função também da temperatura. Na Equação (5.55), relacionou-se a derivada parcial temporal do termo $A_{\alpha\beta}$ com a derivada temporal da densidade. Porém, isto é válido apenas para casos isotérmicos. Em problemas com transferência de calor, deve-se levar também em consideração a variação da temperatura:

$$\partial_t A_{\alpha\beta} = \partial_\rho A_{\alpha\beta} \partial_t \rho + \partial_T A_{\alpha\beta} \partial_t T = -\partial_\rho A_{\alpha\beta} \partial_\gamma (\rho u_\gamma) + \partial_T A_{\alpha\beta} \partial_t T. \quad (5.72)$$

Com isto, a Equação (5.61) pode ser reescrita no seguinte formato:

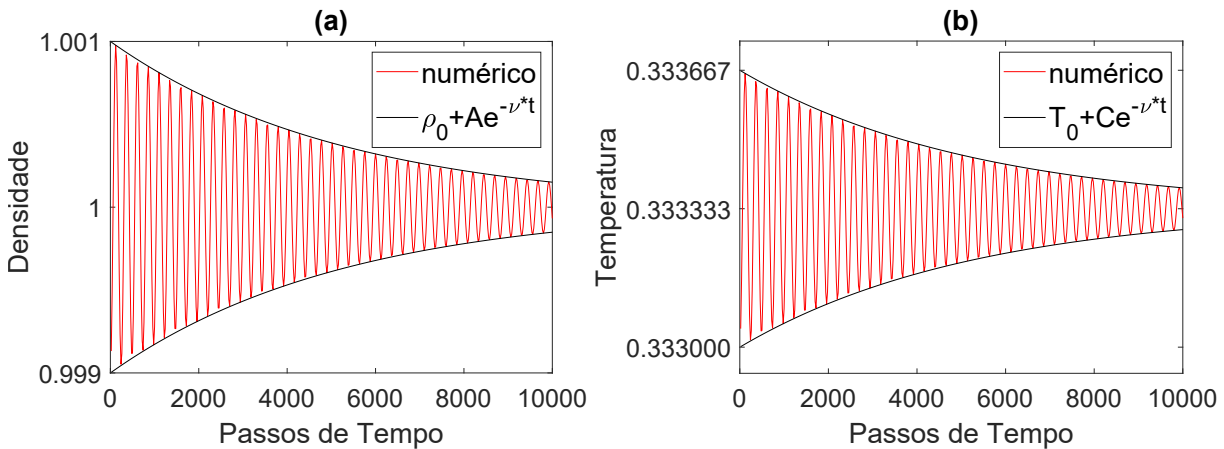
$$A_{\alpha\beta} = p'\delta_{\alpha\beta} - \hat{\tau}u_\alpha\partial_\beta p' - \hat{\tau}u_\beta\partial_\alpha p' - \hat{\tau}\partial_\rho p'\partial_\gamma(\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} + \hat{\tau}\partial_T p'\partial_t T\delta_{\alpha\beta}. \quad (5.73)$$

A derivada parcial temporal da temperatura $\partial_t T$ pode ser calculada através da Equação (5.71a). Como p' depende da equação de estado $p' = p_{EOS} - \rho c_s^2$, sua derivada com relação a temperatura é conhecida. Para ser mais exato, para a E-CS, valem as relações:

$$\partial_T p' = \partial_T(p_{EOS} - c_s^2\rho) = \partial_T p_{EOS} = \rho R_g \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3}. \quad (5.74)$$

O procedimento descrito constitui um modelo híbrido entre o MBR para a parte hidrodinâmica e diferenças finitas para a energia. A seguir, este modelo é testado para o problema da oscilação suave unidimensional de um gás-ideal. Os dados da simulação são: $L = 200$, $\rho_0 = 1$, $\tau = 1$, $T_0 = 1/3$, $R_g = 1$, $c_v = 1$, $\alpha = 1$ e $A = -0.001$. Os outros parâmetros da solução analítica podem ser calculados conforme descrito na seção 4.5.7. Estes são $B = 8.1651 \times 10^{-4}$, $C = -3.3334 \times 10^{-4}$, $\nu = 1.8917 \times 10^{-4}$, $\omega = 0.0257$, $\theta_1 = 0.0074$ e $\theta_2 = 1.5746$. Novamente, acompanhou-se os valores da densidade e da velocidade do fluido numa determinada posição do domínio $L_x = 50$. A comparação entre o resultado numérico e a solução analítica é mostrada na Figura 39. Observa-se uma excelente concordância entre as duas soluções. Neste caso optou-se por mostrar a solução para a temperatura ao invés da velocidade, para evidenciar o problema térmico. Os resultados apresentados corroboram com a consistência do esquema desenvolvido.

Figura 39 – Comparação entre solução do MBR com o modelo proposto neste trabalho e a solução analítica para um caso com transferência de calor. São mostrados os campos de: (a) densidade do fluido na posição $L_x = 50$ e (b) temperatura do fluido na mesma posição.



Fonte: Elaborado pelo autor.

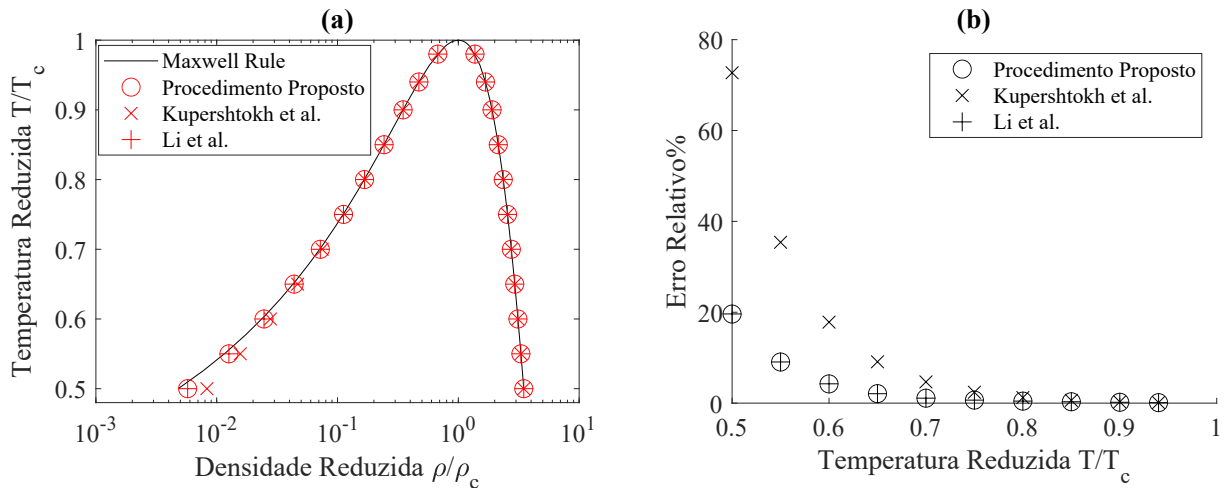
5.5.2 Teste da Interface Plana

Nesta subseção, a abordagem da pressão será utilizada para resolver um teste bifásico dentro do contexto do método do pseudopotencial. Esta abordagem será denominada de MBR-P-P (método de Boltzmann em rede do pseudopotencial - pressão). O teste selecionado foi o teste da interface plana. A implementação deste teste foi descrita em detalhes na seção 4.5.2. Porém, ao invés de se utilizar uma força de interação e um esquema de força, o tensor de pressão do método do pseudopotencial é inserido dentro do MBR através da Equação (5.64). Vale lembrar que as derivadas espaciais são discretizadas usando os esquemas numéricos da Equação (5.3) e a derivada temporal pode ser reescrita usando $\partial_t \psi^2 = -\partial_\rho \psi^2 \partial_\gamma (\rho u_\gamma)$. Assim, o esquema numérico final pode ser escrito como:

$$A_{\alpha\beta} = \left(G\psi^2 + A_1 G \frac{M_\gamma^{(1)}(\psi)}{c_s^2} \frac{M_\gamma^{(1)}(\psi)}{c_s^2} + A_2 G \psi \frac{M_{\gamma\gamma}^{(2)}(\psi)}{c_s^4} \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G \psi \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4} - \hat{\tau} u_\alpha 2G \frac{M_\beta^{(1)}(\psi)}{c_s^2} - \hat{\tau} u_\beta 2G \frac{M_\alpha^{(1)}(\psi)}{c_s^2} - \hat{\tau} G \partial_\rho \psi^2 \frac{M_\gamma^{(1)}(\rho u_\gamma)}{c_s^2} \delta_{\alpha\beta}. \quad (5.75)$$

No teste realizado, utilizou-se os seguintes parâmetros: $(N_x, N_y) = (20, 201)$, $W = 5$,

Figura 40 – (a) Curva de coexistência numérica simulada para o MBR-P-P, e os métodos propostos por Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) e Li, Luo e Li (2013). (b) Erros relativos da densidade do vapor em comparação com a curva de Maxwell para cada método.



Fonte: Elaborado pelo autor.

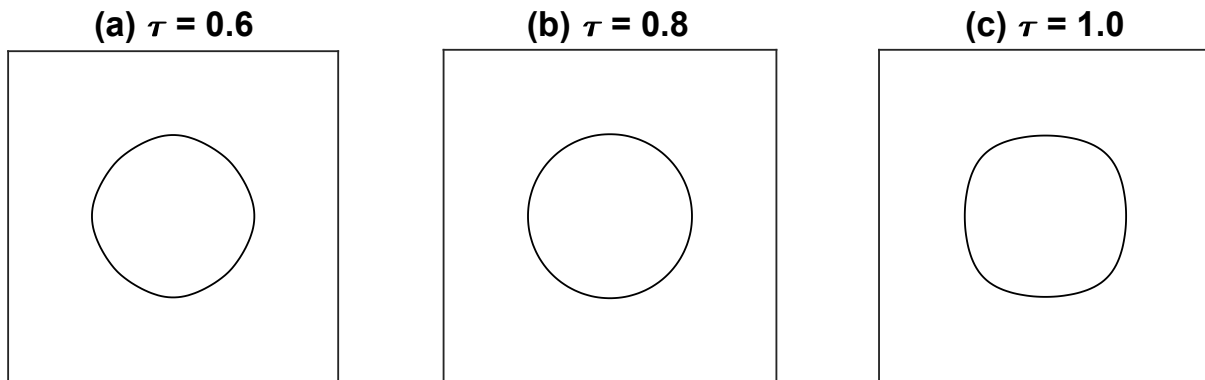
$\tau = 1$, $a = 1/4$, $\epsilon = 1.94$, e $A_3 = 1/3$. Os resultados das densidades das fases para várias temperaturas reduzidas são apresentados na Figura 40.a. Os erros relativos da densidade do vapor com relação a curva de Maxwell são apresentados na Figura 40.b. Como pode-se observar, o MBR-P-P apresentou um desempenho superior com relação aos resultados do MBR-P-F mostrados na Figura 28. Vale lembrar que para o teste

da interface plana, o método de Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) apresentou resultados equivalentes ao MBR-P-F. O erro relativo do MBR-P-P para uma temperatura $T_r = 0.5$ foi de aproximadamente 20 %, enquanto que o método de Kupershtokh *et al.* apresentou um erro de 72 %. Além disso, os resultados do MBR-P-P para o teste da interface plana foram equivalentes aos do esquema proposto por Li e Luo (2013), que trata-se de um procedimento híbrido que utiliza a força de Shan-Chen e uma modificação no esquema de força de Guo *et al.*

5.5.3 Teste da Gota Estática

O próximo teste é o de uma gota estática em equilíbrio. A descrição deste teste é apresentada na seção 4.5.3. Os parâmetros de simulação escolhidos foram: $(N_x, N_y) = (100, 100)$, $R = 25$, $W = 5$, $a = 1/4$, $\epsilon = 1.94$ e $A_3 = 1/3$. Optou-se por testar três valores distintos de tempo de relaxação $\tau = 0.6$, 0.8 e 1.0. Estes valores resultam nas viscosidades cinemáticas: $\nu \approx 0.033$, 0.1 e 0.333. Os contornos das gotas em equilíbrio são apresentados na Figura 41. Estes contornos foram definidos como a região em que o fluido possui uma densidade média $\rho_m = 0.5(\rho_v + \rho_l)$ entre o vapor e o líquido. Como pode-se observar, o formato da gota foi influenciado pelo tempo de relaxação, o que é um resultado inconsistente pois o formato de equilíbrio deveria ser o circular independentemente da viscosidade do fluido.

Figura 41 – Formato das gotas para diferentes τ com o MBR-P-P.

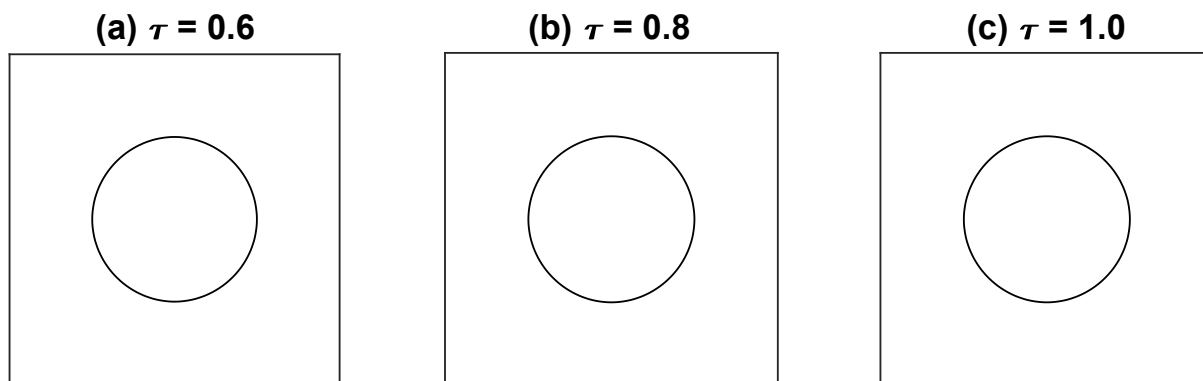


Fonte: Elaborado pelo autor.

Para efeito de comparação, o mesmo teste foi realizado utilizando o MBR-P-F e os resultados foram apresentados na Figura 42. Observa-se que o MBR-P-F não apresenta esta inconsistência física. Uma possível explicação para este comportamento é que foi realizada uma análise de segunda ordem no desenvolvimento do MBR-P-P, enquanto que o MBR-P-F é baseado numa análise de terceira ordem. Isto implica que erros de discretização não identificados podem estar presentes no método da pressão, erros que provavelmente dependem do tempo de relaxação. Assim, ao se ajustar o valor de τ , estes possíveis erros

estão alterando o formato da gota. Desta forma, conclui-se que o método da pressão como proposto não é adequado para simulações de sistemas bifásicos, sendo necessários novos estudos para que se identifique os possíveis erros.

Figura 42 – Formato das gotas para diferentes τ o MBR-P-F.



Fonte: Elaborado pelo autor.

6 RESULTADOS: EQUAÇÃO DE ESTADO

Os resultados apresentados ao longo deste capítulo foram publicados na revista *Physical Review E* com o título “*Shaping the equation of state to improve numerical accuracy and stability of the pseudopotential lattice Boltzmann method*” (CZELUSNIAK *et al.*, 2022). Alguns dos estudos também serviram como base para a publicação realizada no congresso *18th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering* com o título “*Numerical study of the pseudopotential lattice Boltzmann method thermodynamic consistency for flat interface*” (CZELUSNIAK; CABEZAS-GÓMEZ; WAGNER, 2020). No capítulo 5, apresentou-se duas novas formas de discretização das forças de interação do MBR-P. A abordagem de força mostrou-se adequada para simulações de sistemas bifásicos enquanto que a abordagem da pressão apresentou algumas deficiências que demandam mais estudos. A abordagem da força inclui os termos de correção para ajustar a curva de mudança de fase do método a partir do controle do parâmetro ϵ . Apesar da correção da consistência teórica do modelo, ainda são observadas discrepâncias entre as densidades das fases simuladas com relação às densidades esperadas a partir da relação de estabilidade mecânica, Equação (2.65), para baixas temperaturas. Foi observado na Figura 28 que a redução do parâmetro a da E-Cs reduz o efeito desses erros de discretização. Isto fato pode estar relacionado ao aumento da espessura da interface como observado na Figura 29. Estas observações sobre o papel do parâmetro a na precisão do método foram feitas anteriormente por Lycett-Brown e Luo (2015). Também Li, Luo e Li (2013) observaram que a redução do valor a aumenta a espessura da interface e contribui para o método ficar mais estável.

Um outro trabalho envolvendo alterações da equação de estado foi realizado por Peng *et al.* (2020). Para uma determinada equação de estado p_{EOS} , a força original proposta por Shan e Chen não garantia consistência termodinâmica. Ao invés dos autores proporem termos de correção na força de interação, ele propuseram uma alteração na equação de estado. Esta alteração parte do seguinte princípio. Considera-se que um determinado usuário do método deseja simular um escoamento em que o fluido seja bem modelado por uma determinada equação de estado p_{EOS} . Se este usuário utilizar a força original proposta por Shan e Chen, as densidades das fases irão divergir grandemente das densidades esperadas pela regra de Maxwell. A ideia proposta por Peng *et al.* (2020) seria então adicionar uma equação de estado diferente de p_{EOS} no método do pseudopotencial e esta equação de estado seria ajustada para que método forneça as densidades desejadas. A equação p_{EOS} seria então substituída por uma nova $p(\rho)$:

$$\begin{aligned}
 p(\rho) &= p_{EOS}(\rho) & \rho &\leq \rho_v, \\
 p(\rho) &= p_0 + \theta(\rho - \rho_v)(\rho - \rho_l)(\rho - \rho_m) & \rho_v &< \rho < \rho_l, \\
 p(\rho) &= p_{EOS}(\rho) & \rho &\geq \rho_l,
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

sendo o parâmetro ρ_m calculado numericamente para satisfazer a condição de equilíbrio mecânico para as densidades desejadas, que seriam as densidades obtidas aplicando a regra de Maxwell a p_{EOS} . O parâmetro θ pode ser usado para controlar a espessura da interface e a tensão superficial (mas não os dois de maneira independente). Peng *et al.* (2020) relacionaram θ a velocidade do som na região de vapor e líquido saturado através de um parâmetro auxiliar r_θ :

$$\theta = \frac{1 - r_\theta}{(\rho_v - \rho_m)(\rho_v - \rho_l)} \left. \frac{dp_{EOS}}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_v} + \frac{r_\theta}{(\rho_l - \rho_m)(\rho_l - \rho_v)} \left. \frac{dp_{EOS}}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_l}. \quad (6.2)$$

Para $r_\theta = 1$ a velocidade do som é contínua na região do líquido, enquanto que para $r_\theta = 0$ a velocidade do som será contínua na região do vapor.

Estes achados indicam que a equação de estado pode ter um papel muito importante tanto na precisão quanto na estabilidade do método do pseudopotencial. Porém, não há ainda na literatura um estudo detalhado sobre os possíveis impactos de modificações nesta equação sobre os resultados do método. Geralmente, quando deseja-se incrementar a precisão de um método numérico, utiliza-se um número maior de nós para o cálculo das derivadas espaciais. A utilização de esquemas mais complexos com maior número de nós agrega mais complexidade e custo computacional ao método, reduzindo a sua atratividade. A possibilidade de ter esses ganhos de performance apenas modificando a equação de estado sem alterar a complexidade do método é muito promissora. Desta forma, esta seção é dedicada ao estudo do impacto que algumas alterações na equação podem ter sobre a acurácia e estabilidade do método do pseudopotencial.

6.1 Análise da curva de coexistência do método do pseudopotencial

Há algumas estratégias propostas na literatura envolvendo modificações em equações de estado para aumento de desempenho do método do pseudopotencial. Nesta seção, será feita uma comparação criteriosa da acurácia de cada uma dessas estratégias com relação à curva de coexistência do método obtida com diversas simulações de interface plana. Após a análise dos procedimentos encontrados na literatura, será proposta uma nova forma de modificar a equação de estado inspirada no método de Peng *et al.* (2020). Esta nova equação será muito útil em simulações de interface curva e testes dinâmicos que serão apresentadas nas próximas seções.

O teste de interface plana utilizado ao longo desta seção é descrito na seção 4.5.2. O domínio computacional é dado por uma malha de $(N_x, N_y) = (2, 200)$ nós. O parâmetro W foi fixado como 4.3 para a inicialização da interface plana. Para cada temperatura, os valores de ρ_v e ρ_l são definidos como as densidades de saturação obtidas por meio da regra de Maxwell. A EMBR foi resolvida usando o operador de colisão MRT e todos os tempos de relaxação foram fixados iguais a 1. Conduziu-se as simulações até o equilíbrio ter se estabelecido.

Seguindo o trabalho de Lycett-Brown e Luo (2015), os valores ϵ foram computados antes das simulações, sem nenhum tipo de ajuste empírico. Esta estratégia já havia sido adotada no capítulo anterior, em que procurou-se um valor ϵ que permitia um bom ajuste de toda a curva de saturação. Porém, diferentemente do que foi feito naquele capítulo, aqui para cada temperatura é encontrado um valor para este parâmetro que faz as densidades dadas pela Equação (2.65) coincidirem com as densidades da regra de Maxwell. Os valores calculados para ϵ foram usados nas simulações do método do pseudopotencial para recuperar a curva de coexistência correta.

Deseja-se avaliar, ao longo desta seção, qual é o erro de cada procedimento envolvendo equações de estado com relação ao resultado dado pela regra de Maxwell. Pode-se comparar tanto as densidades da fase vapor quanto da fase líquida. Em geral, o desvio percentual da densidade do vapor com relação ao valor de referência tende a ser muito maior do que a diferença na densidade do líquido. Isto ocorre pelo seguinte motivo: no equilíbrio, a pressão das duas fases devem ser iguais. Porém, a fase líquida é muito menos compressível do que a fase vapor. Assim, se há algum desvio da pressão de equilíbrio com relação ao resultado da regra de Maxwell, esta variação de pressão está associada a uma maior variação de densidade na fase vapor. Desta forma, definiu-se o erro que compara a densidade do vapor medida na simulação ρ_v com a densidade teórica dada pela regra de Maxwell ρ_v^M :

$$E_v(T_r) = 100 \frac{\rho_v - \rho_v^M}{\rho_v^M}. \quad (6.3)$$

6.1.1 Equações de estado e acurácia numérica

Na Tabela 3 são mostrados os erros $E_v(T_r)$ para diferentes métodos para algumas temperaturas reduzidas. Na segunda coluna da tabela são mostrados os erros para a força de Shan-Chen com o esquema de força de Guo *et al.* e $a = 0.5$ na E-CS. Para $T_r = 0.8$ o erro é de aproximadamente 65%. Para temperaturas mais baixas, as simulações se tornaram instáveis e nenhum outro resultado é mostrado aqui. Uma melhoria em relação ao esquema de força de Guo *et al.* é obtida quando emprega-se o esquema de força de (LI; LUO; LI, 2013) (com $a = 0.5$ na E-CS). Por simplicidade, este será chamado apenas de esquema de Li *et al.* Estes resultados estão na terceira coluna da Tabela 3. Os erros relativos são muito pequenos para temperaturas acima de $T_r = 0.7$. Entretanto, abaixo deste valor, os erros começam a crescer rapidamente e atingem aproximadamente 52% para $T_r = 0.5$. Este desvio nos resultados do esquema de Li *et al.* mostram que, apesar dos termos de correção que dão consistência ao modelo, ainda há a presença de erros de discretização. Note-se que o esquema de força de Guo *et al.* não possui nenhum parâmetro livre; assim, a condição de estabilidade mecânica também é fixa (não pode-se ajustar o parâmetro ϵ). Já o esquema de Li *et al.* permite este ajuste, o que explica os melhores resultados.

Dado os erros observados, avaliou-se como modificações na equação de estado

Tabela 3 – Resultados do erro relativo $E_v(T_r)$ para diferentes temperaturas reduzidas T_r e para os métodos discutidos ao longo do texto. Para o esquema de Li *et al.* variou-se o parâmetro a da E-CS e para o método de Peng *et al.* variou-se o parâmetro r_θ .

T_r	Guo	Esquema de Li <i>et al.</i>			Método de Peng <i>et al.</i>			
	$a = 0.5$	$a = 0.5$	$a = 0.363$	$a = 0.215$	$a = 0.141$	$r_\theta = 0.290$	$r_\theta = 0.122$	$r_\theta = 0.040$
0.80	65.5	0.42	0.309	0.184	0.122	1.8e-4	2.2e-4	4.0e-4
0.75		0.41	0.304	0.182	0.121	2.4e-4	5.4e-5	1.3e-4
0.70		0.18	0.117	0.061	0.036	4.3e-4	3.4e-4	2.0e-4
0.65		2.26	1.610	0.932	0.606	4.5e-4	0.001	0.001
0.60		7.75	5.503	3.173	2.063	0.004	0.004	0.001
0.55		20.83	14.64	8.397	5.415	0.020	0.005	0.007
0.50		51.68	35.67	20.07	12.84	0.120	0.086	0.035

Fonte: Elaborada pelo autor.

influenciaram nestes resultados. O procedimento mais simples foi proposto por Li, Luo e Li (2013) e consiste em reduzir o parâmetro a para aumentar a espessura da interface. No mesmo trabalho, os autores mostraram que este procedimento é equivalente a multiplicar a equação de estado por um fator pequeno. Os autores testaram o procedimento para aumentar a estabilidade do método em simulações dinâmicas. Porém, neste trabalho será avaliado se este afeta a acurácia do método. Implementou-se três valores de a na E-CS utilizando o esquema de Li *et al.* Os três valores de a foram selecionados para que resultassem em interfaces com espessuras $W = 3.1, 3.7$ e 4.5 como mostrado na Tabela 4. Os resultados considerando estes três valores de a são mostrados na Tabela 3. Observa-se

Tabela 4 – Parâmetros selecionados para atingir a espessura de interface W desejada para uma temperatura $T_r = 0.5$. O parâmetro a foi usado na E-CS com esquema de Li *et al.*, r_θ no método de Peng *et al.*, α e α^n na E-Smooth.

	$W = 3.1$	$W = 3.7$	$W = 4.5$
a	0.363	0.215	0.141
r_θ	0.290	0.122	0.040
α	0.610	0.342	0.216
α^n	0.554	0.322	0.207

Fonte: Elaborada pelo autor.

que o erro relativo da densidade do vapor decresceu à medida que a espessura da interface foi aumentada. Para $T_r = 0.5$, quando $a = 0.363$ ($W = 3.1$) o erro foi de aproximadamente 36%. Este erro decresceu para aproximadamente 13% para $a = 0.141$ ($W = 4.5$).

Em seguida, testou-se o método de Peng *et al.* Três parâmetros r_θ foram selecionados de forma que para $T_r = 0.5$ as espessuras da interface eram de $W = 3.1, W = 3.7$ e $W = 4.5$, como mostrado na Tabela 4. Os erros relativos para diferentes temperaturas são

mostrados na Tabela 3. Para $T_r = 0.5$ e $r_\theta = 0.290$ ($W = 3.1$), a simulação resultou num erro de 0.12% enquanto que para maiores espessuras de interface este erro foi inferior a 0.1%. Desta forma, observa-se que os erros apresentados pelo método de Peng *et al.* foram muito inferiores aos obtidos pelas outras abordagens.

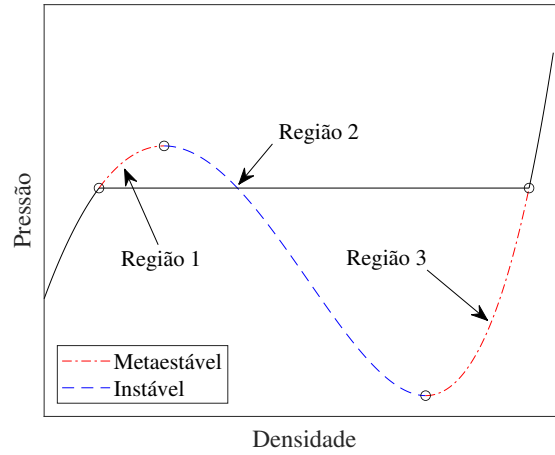
6.1.2 Nova equação de estado

Nesta subsecção é apresentada uma terceira estratégia. Será mostrado posteriormente que o método de Peng *et al.* apresentou problemas com relação à estabilidade em testes dinâmicos e testes estáticos com interface curva. Consequentemente, faz-se necessário o desenvolvimento de uma estratégia que combine bons resultados em termos de acurácia e que ainda mantenha a estabilidade do método para altas razões de densidade. Nesta nova equação de estado proposta, as regiões metaestável e instável são substituídas por uma função mais suave seguindo o procedimento proposto por Peng *et al.* Entretanto, diferentemente deste trabalho, a nova equação de estado deverá satisfazer a regra de Maxwell para as mesmas densidades da equação de estado original (sem a modificação das regiões metaestável e instável). Desta forma, o método deve ser implementado com o esquema de força de Li *et al.*, para assegurar a consistência termodinâmica. Outra condição imposta foi a continuidade da velocidade.

Agora será descrito como a nova equação de estado foi desenvolvida. Por simplificação, as regiões metaestável e instável da equação de estado serão chamadas de *loop* de van der Waals, como foi denominado por Peng *et al.* (2020). Na Figura 43, o *loop* de van der Waals foi dividido em três regiões. A primeira região é uma porção metaestável da curva entre os pontos que definem o vapor saturado na pressão de saturação (ρ_v, p_{sat}) e o ponto de máxima pressão (ρ_{max}, p_{max}) . A segunda região é a porção de instabilidade termodinâmica e estende-se do ponto de máxima pressão (ρ_{max}, p_{max}) até o ponto de mínima pressão (ρ_{min}, p_{min}) . Por fim, a terceira região também é uma porção metaestável da curva que começa no ponto de mínima pressão e termina no ponto que define a condição de líquido saturado (ρ_l, p_{sat}) . Um *loop* de van der Waals customizado pode ser criado substituindo estas três regiões por funções interpoladoras. A pressão de saturação é mantida, mas as pressões máxima e mínima podem ser alteradas para suavizar a curva.

O próximo passo é definir as funções interpoladoras. A escolha mais simples seria um polinômio cúbico. Esta função requer a definição de quatro parâmetros, que podem ser obtidos especificando-se o valor da função nos pontos extremos que definem cada região e também a velocidade do som nessas posições (equivalente a definir a derivada da curva). Porém, há um requerimento adicional que precisa ser satisfeito: a função deve ser monotônica em cada região específica da Figura 43. Infelizmente, observou-se que o polinômio cúbico não satisfaz esta condição para as regiões metaestáveis em alguns testes. Desta forma, buscou-se outras formas de interpolar estas regiões e observou-se que uma

Figura 43 – Ilustração das diferentes regiões de uma equação de estado genérica para uma determinada temperatura.



Fonte: Elaborado pelo autor.

função geradora de uma elipse respeitadora os critérios impostos.

A região 1 foi substituída por uma função geradora de uma elipse:

$$p(\rho) = p_{max} - b_1 + b_1 \sqrt{1 - \frac{(\rho - \rho_{max})^2}{a_1^2}}; \quad \rho_v < \rho \leq \rho_{max}, \quad (6.4a)$$

sendo:

$$\begin{aligned} a_1^2 &= -\frac{k^2}{2k + (\rho_{max} - \rho_v)^2}, \\ k &= \frac{(p_{max} - p_{sat})(\rho_{max} - \rho_v)}{\frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho_v)} - (\rho_{max} - \rho_v)^2, \\ b_1 &= \frac{p_{max} - p_{sat}}{1 - \sqrt{1 - \frac{(\rho_{max} - \rho_v)^2}{a_1^2}}}. \end{aligned} \quad (6.4b)$$

Na Equação 6.4b, a seguinte condição deve ser satisfeita para que a_1 seja um número real: $\frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho_v) > 2(p_{max} - p_{sat})/(\rho_{max} - \rho_v)$. Adotou-se ρ_{max} igual a densidade de máxima pressão na E-CS original $\rho_{max} = \rho_{max}^{C-S}$ para cada temperatura e observou-se que não foi violada a condição anterior.

A região 2, em que configura-se a instabilidade termodinâmica, foi substituída por um polinômio cúbico:

$$p(\rho) = a_2(\rho - \rho_{max})^3 + b_2(\rho - \rho_{max})^2 + c_2(\rho - \rho_{max}) + d_2; \quad \rho_{max} < \rho < \rho_{min}, \quad (6.5a)$$

com

$$\begin{aligned}
 d_2 &= p_{max}, \\
 c_2 &= 0, \\
 b_2 &= 3(p_{min} - p_{max}), \\
 a_2 &= 2(p_{max} - p_{min}),
 \end{aligned} \tag{6.5b}$$

sendo ρ_{min} igual à densidade de pressão mínima na equação de estado original $\rho_{min} = \rho_{min}^{C-S}$ para cada temperatura. A região 3 foi substituída por uma função geradora de uma elipse:

$$p(\rho) = p_2 + b_3 - b_3 \sqrt{1 - \frac{(\rho - \rho_2)^2}{a_3^2}}; \quad \rho_{min} \leq \rho < \rho_l, \tag{6.6a}$$

com:

$$\begin{aligned}
 a_3^2 &= -\frac{k^2}{2k + (\rho_l - \rho_{min})^2}, \\
 k &= \frac{(p_{sat} - p_{min})(\rho_l - \rho_{min})}{\frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho_l)} - (\rho_l - \rho_{min})^2, \\
 b_3 &= \frac{p_{sat} - p_{min}}{1 - \sqrt{1 - \frac{(\rho_l - \rho_{min})^2}{a_3^2}}},
 \end{aligned} \tag{6.6b}$$

Os seguintes parâmetros são definidos como exatamente os mesmos da equação de estado original:

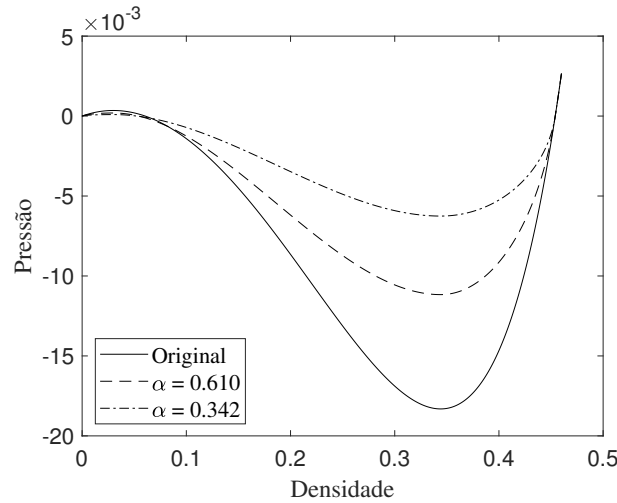
$$\rho_v; \quad \rho_{min}; \quad \rho_{max}; \quad \rho_l; \quad p_{sat}; \quad \frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho_v); \quad \frac{\partial p}{\partial \rho}(\rho_l). \tag{6.7}$$

O valor da pressão mínima é deixado como um parâmetro livre usado para controlar o grau de suavidade do novo *loop* de van der Waals. Esta pressão mínima foi relacionada com a pressão mínima da equação de estado original através de um parâmetro α da seguinte forma:

$$\alpha = \frac{p_{sat} - p_{min}}{p_{sat}^{C-S} - p_{min}^{C-S}}. \tag{6.8}$$

O único parâmetro ainda não especificado foi a pressão máxima a qual é calculada numericamente para garantir que a nova equação de estado satisfaça a regra de Maxwell para ρ_v e ρ_l . A nova equação de estado é referida ao longo deste trabalho como “E-*Smooth*”. Para ilustrar todo o desenvolvimento anterior, será mostrada a forma da nova equação de estado obtida a partir de Carnahan-Starling (com $a = 0.5$) considerando $\alpha = 0.610$ e $\alpha = 0.342$. As curvas pressão-densidade para a E-*Smooth* são mostradas na Figura 44.

Os resultados para a E-*Smooth* foram testados considerando três valores de α de acordo com a Tabela 4. Os erros para as densidades do vapor são mostrados na Tabela 5 com o símbolo α . Os erros foram menores em comparação com a equação de estado original (resultados para o esquema de Li *et al.* da Tabela 3) considerando as mesmas espessuras de interface. A explicação para a diferença entre estes resultados pode estar na velocidade do som na região do vapor. Quando o parâmetro a foi reduzido, o efeito é o mesmo que multiplicar a equação de estado por um fator pequeno. Desta forma, a espessura da

Figura 44 – Curva pressão-densidade para a *E-Smooth*.

Fonte: Elaborado pelo autor.

interface é aumentada, melhorando a precisão do modelo. Porém, a compressibilidade do vapor também é aumentada (velocidade do som diminuída devido ao a menor), o que torna a densidade do vapor mais sensível em relação a erros na pressão de saturação. Já na *E-Smooth*, o *loop* de van der Waals é suavizado sem alterações na velocidade do som no vapor; assim, o vapor é menos compressível e sua densidade varia menos significativamente.

Tabela 5 – Resultados do erro relativo $E_v(T_r)$ para a *E-Smooth* com as duas abordagens discutidas no texto. As duas abordagens usam $a = 0.5$ na região do líquido. A notação α indica que foi utilizado $a = 0.5$ na região do vapor e α^n indica $a = 2$ na região do vapor.

T_r	<i>Smooth</i>			<i>Smooth</i> (vel. som no vap. aumentada)		
	$\alpha = 0.610$	$\alpha = 0.342$	$\alpha = 0.216$	$\alpha^n = 0.554$	$\alpha^n = 0.322$	$\alpha^n = 0.207$
0.80	0.177	0.050	0.018	0.035	0.010	0.004
0.75	0.129	0.033	0.014	0.018	0.004	0.003
0.70	0.233	0.073	0.027	0.074	0.021	0.007
0.65	1.365	0.425	0.179	0.363	0.110	0.045
0.60	4.261	1.394	0.595	1.152	0.368	0.157
0.55	11.14	3.753	1.605	3.150	1.058	0.458
0.50	27.22	9.215	3.954	8.002	2.800	1.227

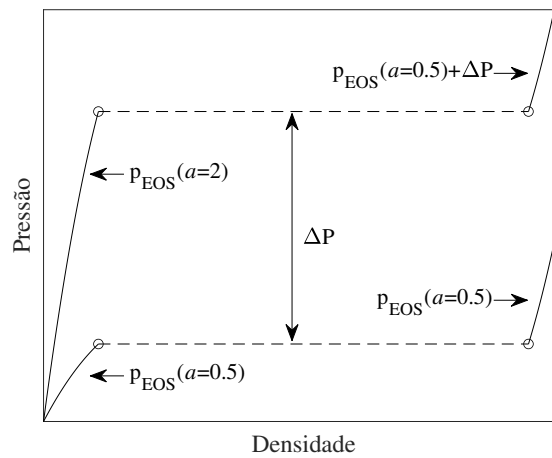
Fonte: Elaborada pelo autor.

6.1.3 Nova equação de estado com velocidade do som no vapor aumentada

Notou-se que a velocidade do som no vapor (relacionada à incompressibilidade do vapor) tem um grande impacto nos erros do método do pseudopotencial. Desta forma, será testada uma modificação na *E-Smooth*. Esta modificação consiste basicamente em aumentar a velocidade do som na região de vapor. Para isso, a região do vapor será dada

pela E-CS com $a = 2$, enquanto que a região de líquido continuará sendo dada pela E-CS com $a = 0.5$. Estas duas equações serão conectadas por um *loop* de van der Waals construído com a *E-Smooth*. Como as pressões na região do vapor são maiores agora, a pressão de saturação também será elevada. Para compensar este efeito na região do líquido sem alterar a velocidade do som, é adicionado um termo $\Delta P = p(\rho_v, a = 2) - p(\rho_v, a = 0.5)$ na região do líquido, conforme esquematizado na Figura 45. Isto permite uma variação na velocidade do som no vapor sem modificá-la para o líquido.

Figura 45 – Ilustração de como foi construída a *E-Smooth* com velocidade do som no vapor aumentada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Utilizou-se o símbolo α^n (ao invés de α) para se referir a *E-Smooth* com velocidade do som aumentada. Note-se que o parâmetro α era calculado em relação à pressão mínima da equação de estado original. Porém, agora utiliza-se uma equação de estado com $a = 2$ na região do vapor e outra com $a = 0.5$ para a região do líquido. Utilizou-se como referência para o cálculo de α^n a pressão mínima da E-CS com $a = 0.5$:

$$\alpha^n = \frac{p_{sat} - p_{min}}{p_{sat}^{C-S}(a = 0.5) - p_{min}^{C-S}(a = 0.5)}. \quad (6.9)$$

Os valores de α^n utilizados nas simulações são mostrados na Tabela 4. Os resultados para os erros da densidade do vapor obtidos nos testes de interface plana estão na Figura 5. Conclui-se que de fato, o aumento da velocidade do som no vapor melhora a acurácia numérica do método nos testes de interface plana.

6.2 Testes estáticos para interfaces curvas

Na subseção anterior testou-se a *E-Smooth* e comparou-se os resultados obtidos com outros métodos. O teste realizado foi a verificação das densidades de equilíbrio no caso de uma interface plana. Nesta seção, estes testes serão estendidos para o caso de

interfaces curvas como, por exemplo, simular o equilíbrio de gotas e bolhas estáticas. Avaliou-se a tensão superficial, densidades de equilíbrio e correntes espúrias. Os testes foram implementados conforme descritos na seção 4.5.3. O domínio computacional consiste em uma malha de $(N_x, N_y) = (200, 200)$ nós.

6.2.1 Lei de Laplace

O primeiro teste consiste na comparação da tensão superficial de gotas/bolhas (simuladas com o MBR-P) com o resultado analítico para uma interface plana. Em princípio, a tensão superficial depende da curvatura da interface (LULLI *et al.*, 2022). Para pequenas curvaturas, este valor pode ser bem aproximado pela tensão superficial de uma interface plana. Desta forma, para a determinação da solução analítica, foi negligenciada a dependência da curvatura na tensão superficial. Para uma interface plana, a tensão superficial pode ser calculada pela Equação 5.8. Como aqui está sendo utilizado o esquema de força de Li *et al.*, pode-se substituir o parâmetro A_3 pelo respectivo valor dado pelo esquema de força. Fazendo esta substituição e manipulando a equação, obtém-se:

$$\gamma = -\frac{Gc^4}{6} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 dx = -\frac{Gc^4}{6} \int_{\rho_v}^{\rho_l} \left(\frac{d\psi}{dx} \right) \dot{\psi} d\rho. \quad (6.10)$$

Na expressão acima, converteu-se a integral em relação a coordenada espacial para uma integral na densidade. O termo $(d\psi/dx)$ pode ser calculado através de uma manipulação no tensor de pressão dado pela Equação 2.60a, utilizando o procedimento descrito em Krüger *et al.* (2017):

$$\left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 = \frac{2A\psi^\epsilon}{Gc^4(A_2 + A_3)} \int_{\rho_g}^{\rho} (p_0 - p_{EOS}) \frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\epsilon}} d\rho, \quad (6.11)$$

sendo que para forças construídas com base em interações entre nós vizinhos $A_2 + A_3 = 1/2$ em unidades de rede. Note-se que a equação acima apenas permite o conhecimento do quadrado de $(d\psi/dx)$. Por simplicidade, assume-se que este valor é sempre positivo ($d\psi/dx > 0$) e que a interface é monotônica ($d\rho/dx > 0$). Estas hipóteses também implicam em $\dot{\psi} = d\psi/d\rho > 0$. Nos testes de interface plana realizados na seção anterior, observou-se que as interfaces se comportaram de maneira monotônica para todas as escolhas de parâmetros da equação de estado.

Usando-se da definição do potencial de interação, dado pela Equação 2.57, pode-se determinar uma expressão para $\dot{\psi}$:

$$\dot{\psi} = -\frac{2}{Gc^2} \frac{1}{\psi} \left(c_s^2 - \frac{dp_{EOS}}{d\rho} \right). \quad (6.12)$$

Como adotou-se $G = -1$, o termo acima é positivo quando $c_s^2 > dp_{EOS}/d\rho$. Observou-se que quando adota-se a E-CS com um alto valor de a como, por exemplo, $a = 0.5$, a expressão acima resultará em $\dot{\psi} = 0$ para alguma densidade na faixa $\rho_v < \rho < \rho_l$ e baixas

temperaturas reduzidas. De forma a evitar a violação das hipóteses realizadas no cálculo de $d\psi/dx$, escolheu-se $a = 0.363$ na E-CS. Para a E-*Smooth*, embora o *loop* de van der Waals tenha sido modificado, as regiões monofásicas continuam sendo dadas pela E-CS. Assim, utilizou-se $a = 0.363$ na região do líquido para evitar problemas com o cálculo de $\dot{\psi}$. Porém, na região do vapor adotou-se $a = 2$, pois o aumento da velocidade do som nesta região mostrou-se benéfico para a acurácia do método. Também testou-se a equação de estado proposta por Peng *et al.* (2020). Neste caso, para as regiões monofásicas tanto de vapor e líquido utilizou-se $a = 0.363$. Os parâmetros r_θ e α^n utilizados para o cálculo das equações de estado foram definidos de forma que todas as simulações resultem na mesma espessura de interface para uma determinada temperatura.

Performou-se simulações de gotas e bolhas estáticas considerando diferentes raios e mediu-se a tensão superficial utilizando a lei de Laplace para o caso bidimensional:

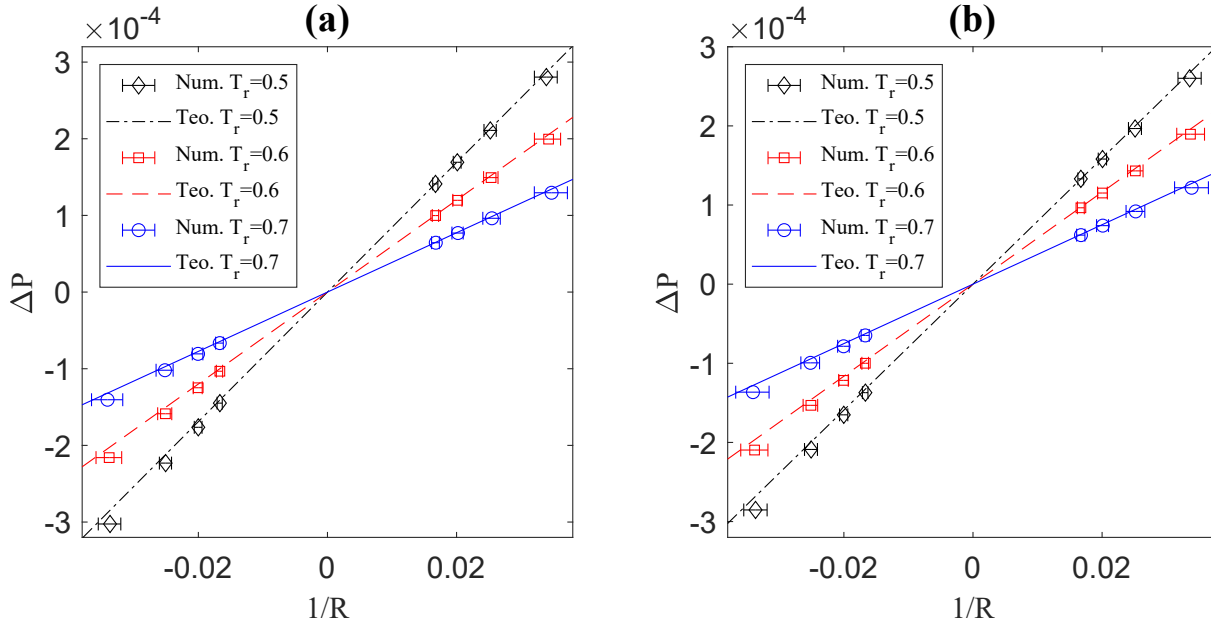
$$p(T, \rho_{in}) - p(T, \rho_{out}) = \frac{\gamma}{R}, \quad (6.13)$$

em que $p(T, \rho_{in}) - p(T, \rho_{out})$ é a diferença de pressão entre o interior e o exterior da gota/bolha. Definiu-se o raio como sendo igual à distância entre o centro da gota/bolha e a coordenada radial em que o fluido possui uma densidade média $\rho_m = (\rho_v + \rho_l)/2$ entre o vapor e o líquido. Estes resultados são apresentados na Figura 46. De forma a mostrar os resultados para bolhas e gotas na mesma figura, definiu-se que valores negativos de raio representam as simulações das bolhas, e os positivos correspondem as gotas. Também definiu-se à diferença de pressão $\Delta p = p_l - p_v$ entre as fases líquido e vapor, a qual é positiva para gotas e negativa para bolhas.

Como o método do pseudopotencial resulta em uma interface difusa, há uma incerteza na definição do raio, pois outras definições diferentes da adotada poderiam prover valores levemente distintos. Neste trabalho considerou-se que a interface é a região em a densidade varia entre $0.12 < (\rho - \rho_v)/(\rho_l - \rho_v) < 0.88$. Esta definição é compatível com a Equação (4.23). Usando esta definição, computou-se as faixas em que os raios das gotas/bolhas podem variar. Desta forma, adicionou-se barras de erro na Figura 46. Observa-se que para valores maiores de curvatura as amplitudes das barras de erro crescem pois, para raios pequenos (altas curvaturas), a incerteza na definição do raio é mais significativa.

Os resultados numéricos obtidos com o MBR foram comparados com as soluções da interface plana obtidas a partir das Equações (6.10) e (6.11), as quais foram calculadas por uma integração numérica. Pode-se observar na Figura 46 que tanto a E-CS quanto a E-*Smooth* forneceram resultados consistentes. Os resultados ficaram muito próximos da solução analítica para raios maiores (pequenas curvaturas). Entretanto, houve um pequeno desvio para pequenos raios, especialmente para gotas. O maior desvio em relação a solução analítica foi de 6.5% para a E-CS e de 6.6% para a E-*Smooth*. Note-se que a solução analítica é baseada na interface plana e é usada apenas como uma referência para

Figura 46 – Tensão superficial numérica (Num.) e teórica (Teo.) para diferentes temperaturas (T_r) considerando: (a) equação C-S e (b) equação Smooth.



Fonte: Elaborado pelo autor.

verificar se os resultados são consistentes; porém, não é requerida uma coincidência exata entre os resultados simulados e os teóricos.

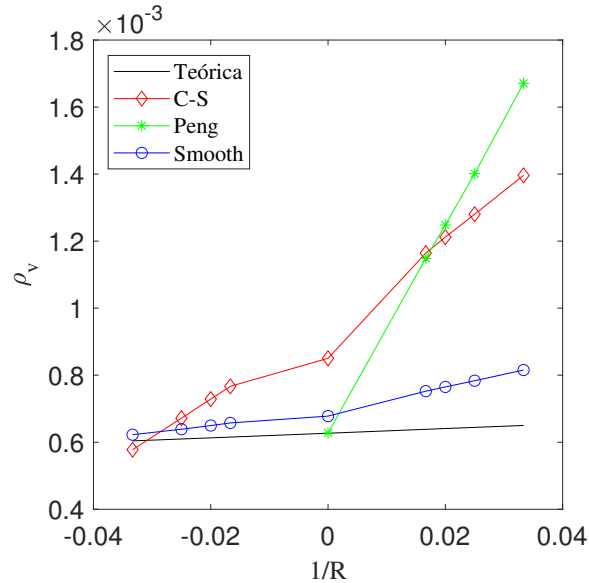
Os valores de tensão superficial para a *E-Smooth* (Figura 46.b) foram ligeiramente inferiores ao da equação original C-S (Figura 46.a) devido a alterações na relação pressão-densidade. Porém, os valores foram consistentes com as suas respectivas soluções de referência. Em um caso em que deseja-se fazer com que os dois métodos resultem na mesma tensão superficial, pode-se utilizar um esquema de força que permite o controle da tensão superficial (LI; LUO, 2013; LYCETT-BROWN; LUO, 2015). Os resultados para o método de Peng *et al.* foram aproximadamente os mesmos obtidos com a E-CS, sendo o máximo desvio observado menor que 1.5%. Desta forma, estes resultados foram omitidos. Entretanto, uma importante diferença foi observada. Para temperatura $T_r = 0.5$, a simulação com o método de Peng *et al.* para uma bolha foi instável. Este comportamento será descrito em mais detalhes na próxima subseção.

6.2.2 Densidades de coexistência

Para gotas/bolhas, as densidades de equilíbrio das fases desviam das obtidas em uma interface plana. Nesta subseção são realizadas simulações utilizando os diferentes métodos descritos até aqui e os resultados das densidades de fase em equilíbrio são comparados com uma solução teórica. As densidades de coexistência podem ser calculadas teoricamente usando o procedimento descrito na Seção 5.3.3. Assume-se que a tensão

superficial é a mesma obtida para uma interface plana dada pela Equação 6.10. Para a primeira comparação entre os diferentes métodos, selecionou-se os resultados para uma temperatura $T_r = 0.5$ variando-se a curvatura das bolhas/gotas. Os resultados obtidos foram expostos na Figura 47.

Figura 47 – Densidades de coexistência do vapor para interfaces curvas de bolhas/gotas para os diferentes métodos a $T_r = 0.5$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Para valores de raio positivos, mostrou-se o resultado para gotas estáticas, enquanto que valores negativos representam bolhas. No ponto central (onde $1/R = 0$), adicionou-se os resultados obtidos para uma interface plana. Os valores teóricos foram calculados considerando a E-CS com $a = 0.363$. Para as simulações usando o MBR, os parâmetros selecionados foram os mesmos usados na subseção anterior no cálculo da tensão superficial. Nota-se que a curva teórica é aproximadamente uma linha reta que continuamente cresce da região de bolhas (considerando as bolhas como tendo curvatura negativa) para a região de gotas (curvatura positiva). Entretanto, esta variação é muito pequena e os valores são muito próximos da densidade obtida pela interface plana $\rho_v^{sat} = 6.27 \times 10^{-4}$ em $1/R = 0$. Os resultados do MBR com a E-CS também apresentam um comportamento de crescimento da densidade com a curvatura; porém, a variação da densidade é muito superior ao esperado e os resultados desviaram significativamente da solução teórica.

O método de Peng *et al.* havia apresentado o melhor desempenho nos testes de interface plana. No teste de interface curva, observa-se que a densidade variou com relação à curvatura de uma forma aproximadamente linear. Porém, a inclinação na curva foi muito superior a dos outros métodos e do resultado teórico. Como consequência, para gotas foi o método que apresentou os maiores desvios em relação ao resultado esperado. Para bolhas

o método foi instável. Uma possível explicação para essa instabilidade pode ser o fato da curva densidade-curvatura do método ser muito inclinada. Se a curva para o método de Peng *et al.* na Figura 47 for extrapolada para a região de bolhas, as densidades seriam muito baixas e próximas ou abaixo de zero. Possivelmente, a simulação torna-se instável ao se aproximar dessas densidades muito baixas. Deve-se afirmar aqui que esta instabilidade foi observada apenas para a temperatura reduzida $T_r = 0.5$. Para temperaturas reduzidas iguais ou superiores a 0.6, o método de Peng *et al.* foi capaz de produzir resultados estáveis para bolhas. A *E-Smooth* foi a que apresentou os melhores resultados com relação à solução termodinâmica. Embora o erro seja maior do que o método de Peng *et al.* para uma interface plana ($1/R = 0$), a densidade não variou tanto em relação à curvatura como ocorreu com os outros métodos.

A performance melhor da *E-Smooth* pode estar relacionada à velocidade do som aumentada, procedimento proposto na Seção 6.1.3. Uma observação similar já havia sido feita por Li e Luo (2014) que estudaram a consistência termodinâmica do MBR-P para interfaces curvas e observaram que uma fase de vapor mais incompressível reduzia os erros. Na Tabela 6 são mostrados os resultados das densidades para outras temperaturas reduzidas, porém mantendo-se o raio da gota fixa ($R = 50$). Observa-se que a *E-Smooth* continuou apresentando os melhores resultados.

Tabela 6 – Erros relativos para a densidade do vapor em porcentagem (%) para gotas circulares ($R = 50$).

T	C-S	Peng	<i>Smooth</i>
0.70	9.810	9.032	2.317
0.60	25.573	23.843	6.240
0.50	89.078	94.741	21.580

Fonte: Elaborado pelo autor.

6.2.3 Correntes espúrias

No último teste estático, mediu-se a magnitude das correntes espúrias das gotas simuladas em que os resultados foram apresentados na Tabela 6. Os resultados estão contidos na Tabela 7. Para cada temperatura, garantiu-se que a espessura da interface fosse a mesma para todos os métodos. Observa-se que as magnitudes das correntes espúrias são da mesma ordem de grandeza para todos os métodos. Estes resultados sugerem que as correntes espúrias estão mais relacionadas à espessura da interface do que a escolha da equação de estado.

6.3 Testes Dinâmicos

Nesta seção, as diferentes equações de estado serão testadas em problemas dinâmicos. Um teste muito popular é o impacto de uma gota contra um filme líquido. Os detalhes

Tabela 7 – Máxima magnitude das correntes espúrias em simulações de gotas circulares com $R = 50$.

T_R	C-S	Peng	Smooth
0.70	0.0020	0.0015	0.0014
0.60	0.0063	0.0064	0.0056
0.50	0.0162	0.0225	0.0162

Fonte: Elaborado pelo autor.

de implementação deste teste são mostrados na seção 4.5.6. O domínio é dado por uma malha $(N_x, N_y) = (600, 250)$ nós e a superfície inferior é coberta por um filme de espessura $h_y = 25$. Uma gota de diâmetro $D = 100$ também é inicializada com uma velocidade inicial de impacto U , enquanto o gás ao redor é mantido a velocidade zero. Também será especificada a razão $\nu_r = \nu_v/\nu_l$, entre as viscosidades cinemáticas da fase vapor e líquido. Nas próximas subseções serão fornecidos os resultados numéricos dos testes de impacto.

6.3.1 Impacto da gota com $Re = 112.5$ e $Re = 300$

Conduziu-se quatro testes considerando os parâmetros na Tabela 8. Os parâmetros usados nas equações de estado e os respectivos valores de tensão superficial estão contidos na Tabela 9. Os valores de tensão superficial foram calculados para uma interface plana usando a Equação 6.10. Como a tensão superficial foi ligeiramente diferente para equação de estado, ajustou-se os valores U e τ_l afim de se manter os mesmos números de Reynolds e Weber para todas as simulações. Considerando a E-CS, empregou-se $U = 0.075$ e $\tau_l = 0.7$ quando $Re = 112.5$ (testes 1 e 2). Também utilizou-se $U = 0.1$ e $\tau_l = 0.6$ quando $Re = 300$ (testes 3 e 4).

Tabela 8 – Parâmetros usados nas simulações dinâmicas: Número de Reynolds $Re = U/\nu_l$; Weber $We = \rho_l U^2 D/\gamma$; temperatura reduzida T_r ; razão de viscosidade ν_r ; e espessura da interface W .

Teste	Re	We	T_r	ν_r	W
1	112.5	39.3	0.6	5	3.5
2	112.5	28.7	0.5	1	3.1
3	300	69.9	0.6	1	3.5
4	300	51.6	0.5	1	3.1

Fonte: Elaborado pelo autor.

Para uma comparação criteriosa entre os resultados obtidos com diferentes métodos, é necessário que a velocidade do som no líquido seja a mesma em todas as simulações. Para assegurar isso, as regiões de líquido e vapor no método de Peng *et al.* foram construídas com a E-CS usando os mesmos valores para o parâmetro a mostrados na Tabela 9. A mesma abordagem foi utilizada para a E-*Smooth* na região do líquido. Para a região do vapor, utilizou-se a velocidade do som aumentada com $a = 2$, conforme discutido na

Tabela 9 – Parâmetros das equações de estado (r_θ , a , e α^n) e tensão (γ_θ , γ_a , e γ_α) para as equações de Peng, C-S e *Smooth*, respectivamente, para $T_r = 0.6, 0.5$ e espessuras de interfaces $W = 3.5$ e 3.1 .

T_r	r_θ	$\gamma_\theta \times 10^3$	a	$\gamma_\alpha \times 10^3$	α^n	$\gamma_\alpha \times 10^3$
0.6 ($W = 3.5$)	0.45	6.5	0.387	6.5	0.834	6.3
0.5 ($W = 3.1$)	0.44	8.8	0.363	8.9	0.775	8.3

Fonte: Elaborado pelo autor.

Seção 6.1.3. Neste caso, a velocidade do som na região do vapor será diferente em relação aos outros métodos. Porém, isto não terá muita significância pois, devido à baixa inércia e viscosidade, a fase de vapor não impactará tanto nos resultados.

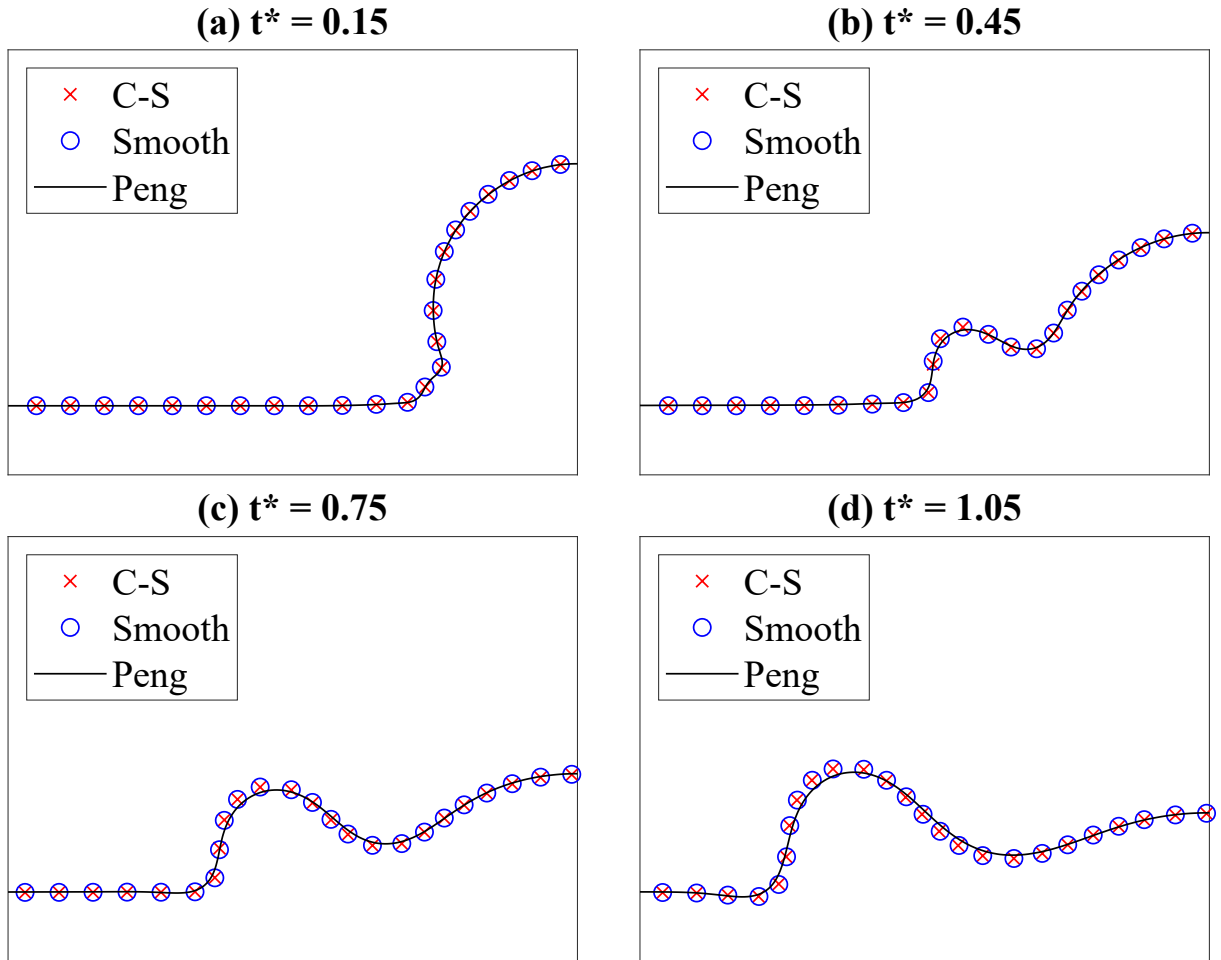
Os resultados do primeiro teste são apresentados na Figura 48. Os resultados para as diferentes equações de estado foram bem similares. A razão de viscosidade para este teste foi fixada em $\nu_r = 5$ pois o método de Peng *et al.* foi instável para valores menores. No segundo teste, o número de Reynolds foi mantido constante, porém a temperatura foi reduzida para $T_r = 0.5$. Os resultados obtidos com a E-CS e *Smooth* foram muito próximos, porém o método do Peng foi instável para qualquer valor de ν_r testado.

No terceiro teste, o número de Reynolds foi aumentado para 300 (para uma temperatura moderada $T_r = 0.6$). Novamente, obteve-se uma boa concordância entre a E-CS e E-*Smooth*, com o método de Peng *et al.* sendo instável. Entretanto, observou-se que aumentando ν_r para 15, obteve-se um resultado estável para este método. Este fato será comentado em mais detalhes na próxima seção. No último teste, a temperatura foi reduzida para $T_r = 0.5$ e os resultados foram similares aos obtidos nos testes anteriores, porém o método de Peng *et al.* foi instável para qualquer escolha de ν_r .

Para o teste considerando $Re = 300$ e $T_r = 0.6$, observou-se que o método de Peng *et al.* é estável quando aumenta-se muito razão de viscosidades ν_r para 15. Desta forma, uma nova comparação entre os diferentes métodos foi realizada considerando estas condições de operação. Os resultados são mostrados na Figura 49. Uma diferença entre o método de Peng *et al.* e os outros é observada, enquanto que uma boa concordância foi observada entre a E-CS e E-*Smooth*.

Tanto a E-CS quanto a E-*Smooth* foram implementadas usando o esquema de força de Li *et al.*, enquanto o método do Peng *et al.* foi implementado utilizando o esquema do Guo *et al.* Embora os esquemas de força sejam distintos, há parâmetros de ajuste como, por exemplo, ϵ e r_θ para que haja concordância nos testes estáticos. Porém, este ajuste não necessariamente garante uma concordância nos testes dinâmicos. Esta hipótese é testada implementando-se uma versão da E-*Smooth* com o esquema de força de Guo *et al.* ao invés de utilizar o esquema de Li *et al.* Esta abordagem será referida como *Mod. Smooth*. Para permitir esta implementação, é necessário recordar que o parâmetro ϵ no esquema de Li *et*

Figura 48 – Capturas de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$ usando as equações de estado C-S, *Smooth* e de Peng para $T_r = 0.6$, $\nu_r = 5$, $We = 39.3$ e $Re = 112.5$.

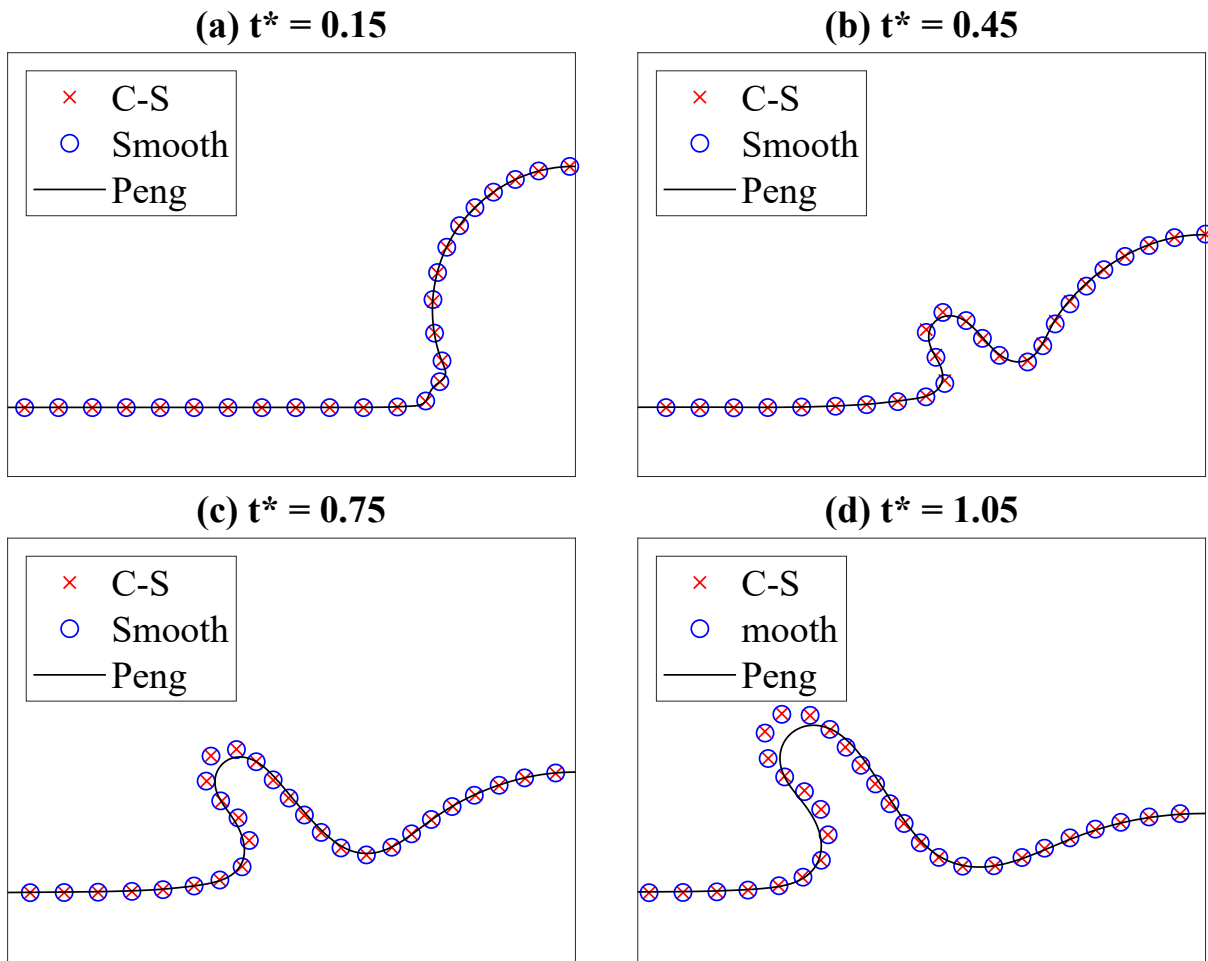


Fonte: Elaborado pelo autor.

al. garante a consistência termodinâmica ao método. Com o esquema de Guo *et al.* não é possível fazer este ajuste. Assim, variou-se o parâmetro livre p_{max} da *E-Smooth* de forma a garantir que as densidades obtidas pelo método sejam as mesmas dos casos anteriores.

Uma comparação com o método do Peng *et al.* foi realizada. A nova equação de estado foi calculada usando $\alpha^n = 0.446$ a $T_r = 0.6$, resultando em uma interface de $w = 3.5$ com $\gamma = 0.0060$. Ao definir a equação *Mod. Smooth* com esse parâmetro α^n , performou-se uma comparação com o método de Peng *et al.* para as mesmas condições simuladas no teste da Figura 49. Estes resultados são apresentados na Figura 50. Um excelente acordo foi obtido entre os métodos, sugerindo que as diferenças observadas na Figura 49 devem-se ao esquema de força usado em cada método. Como o foco deste estudo está no impacto da equação de estado e não dos esquemas de força, uma análise mais profunda sobre essas diferenças será feita num estudo futuro.

Figura 49 – Capturas de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$ usando as equações de estado C-S, Smooth e de Peng para $T_r = 0.6$, $\nu_r = 15$, $We = 69.9$ e $Re = 300$.

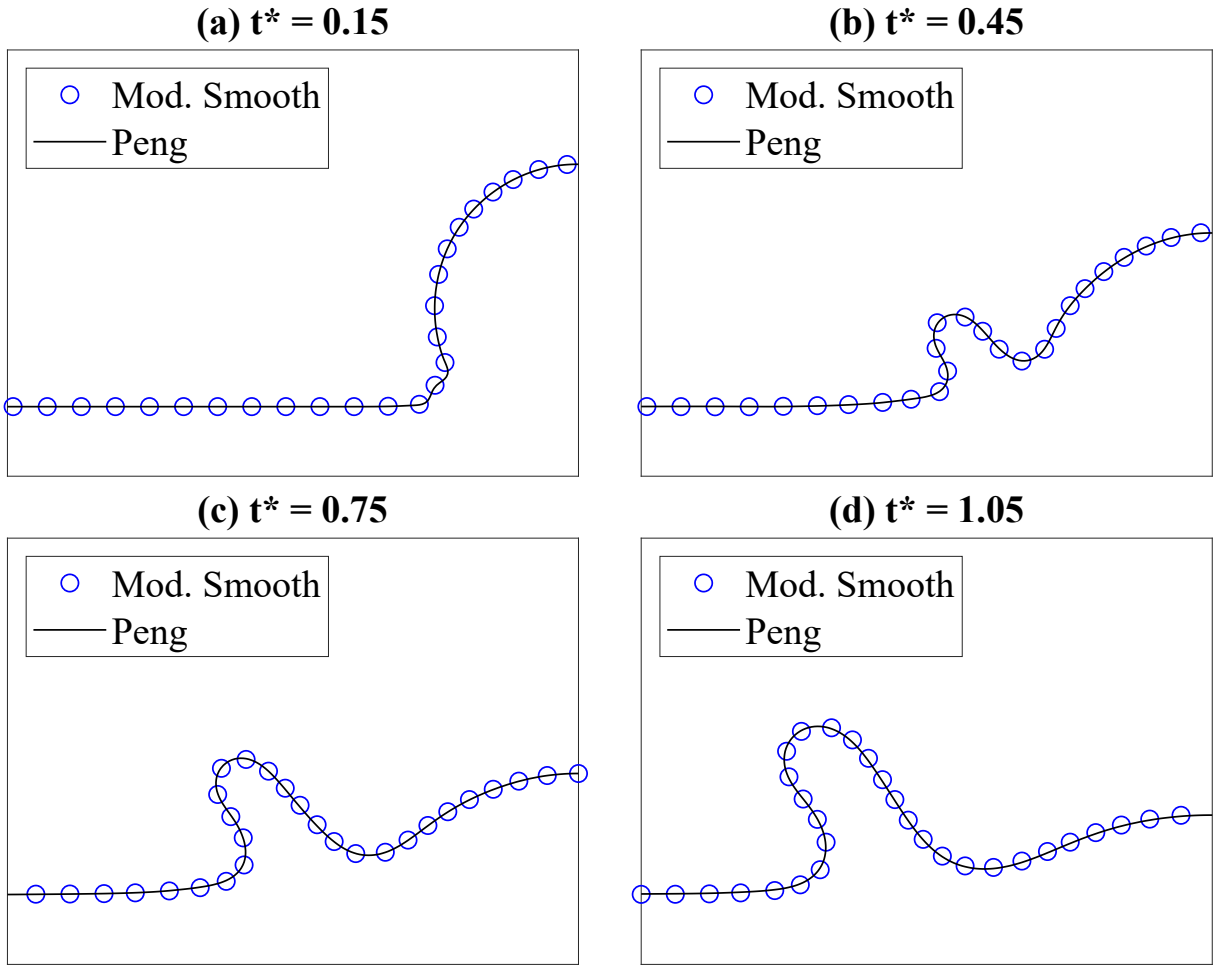


Fonte: Elaborado pelo autor.

6.3.2 Limites de estabilidade

Como observado nos testes anteriores, há uma diferença entre os métodos em relação à estabilidade. Desta forma, buscou-se avaliar os limites de estabilidade de cada método para o teste da gota estática. Diversas simulações são realizadas para a faixa de temperaturas entre $T_r = 0.35$ e $T_r = 0.75$. Como a razão de viscosidade também tem uma influência na estabilidade dos métodos, variou-se a mesma na faixa entre $\nu_r = 2$ a 24 em passos de 2. Para manter este estudo possível, os outros parâmetros foram mantidos fixos. Para a equação C-S fixou-se $a = 0.363$ e para as outras equações de estado os parâmetros foram escolhidos de forma a garantir a mesma espessura de interface para todos os métodos em cada temperatura reduzida. Para a E-CS fixou-se $U = 0.1$ e $\tau_l = 0.6$ resultando em $Re = 300$. Os parâmetros das outras equações foram ajustados para resultar no mesmo números de Reynolds e Weber. Um mapa de estabilidade é apresentado na Figura 51, em

Figura 50 – Capturas de uma gota colidindo contra um filme líquido para diferentes tempos adimensionais $t^* = tU/D$ usando as equações de estado *Mod. Smooth* e de Peng para $T_r = 0.6$, $\nu_r = 15$, $We = 69.9$ e $Re = 300$.

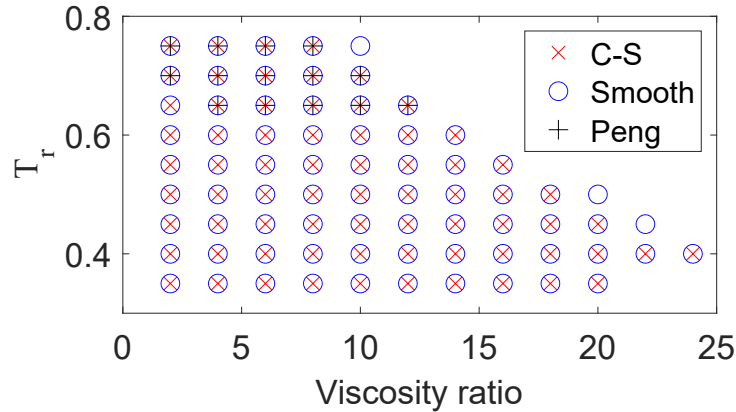


Fonte: Elaborado pelo autor.

que cada ponto representa uma simulação estável que foi obtida para aqueles valores de T_r e ν_r .

As simulações com o método de Peng *et al.* apresentaram estabilidade reduzida para baixas temperaturas $T_r \leq 0.6$. A máxima razão de densidades obtida com o método de Peng *et al.* foi aproximadamente 68 a $T_r = 0.65$. Entretanto, em simulações anteriores obteve-se um resultado estável para $T_r = 0.65$ e $\nu_r = 15$ como na Figura 49. Este comportamento está relacionado aos diferentes parâmetros usados para definir a equação de estado. Na simulação estável a $T_r = 0.65$ adotou-se $a = 0.387$ na E-CS que define as regiões monofásicas. Para o mapa de estabilidade utilizou-se $a = 0.363$. Isto implica em diferentes espessuras de interface que também possuem uma influência na estabilidade do método. As equações C-S e *Smooth* produziram resultados estáveis para temperaturas até $T_r = 0.35$. Abaixo desta temperatura, torna-se difícil de calcular o parâmetro ϵ necessário

Figura 51 – Mapa de estabilidade para diferentes equações de estado com relação a temperatura reduzida T_r e razão de viscosidade ν_r para $Re = 300$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

para consistência das densidades de fase. Desta forma, o estudo não foi realizado para temperaturas mais baixas. A razão de densidades obtida pela *E-Smooth* a $T_r = 0.35$ foi de aproximadamente 3.38×10^4 enquanto que para a *E-CS* foi 8.85×10^3 . A razão das densidades dadas pela regra de Maxwell é 7.85×10^4 .

6.3.3 Resumo dos resultados dinâmicos

Os testes dinâmicos revelaram que o método de Peng *et al.* sofreu com problemas relacionados à estabilidade, apesar dos bons resultados nos testes estáticos de interface plana. Apesar dos grandes erros obtidos nos testes estáticos ao se utilizar a *E-CS*, ela forneceu resultados similares ao da *E-Smooth* nos testes dinâmicos. Isto pode ser explicado pelo fato da região de vapor não impactar muito no resultado destes testes devido à grande diferença de inércia e viscosidade entre as fases líquido e vapor. A equação *E-Smooth* proposta nesse trabalho forneceu bons resultados nos testes estáticos e também nos dinâmicos.

Uma limitação quanto ao uso da *E-CS* está relacionada a multiplicação desta por um fator pequeno. Este procedimento é feito para aumentar a estabilidade do método. Porém, o mesmo afeta a velocidade do som na região de líquido, reduzindo assim o número de Mach da simulação e aumentando os efeitos de compressibilidade. Este efeito pode ser compensado ao se reduzir a velocidade de impacto, mantendo-se o número de Mach constante. Ao se alterar a velocidade de impacto é necessário reescalar o problema para manter todos os adimensionais relevantes constantes. Entretanto, reduzir a velocidade significa também em aumentar o tempo computacional.

A *E-Smooth* não possui esta limitação pois apenas o *loop* de van der Waals é modificado, não sendo necessário mudar as regiões monofásicas. De fato, quando o parâmetro α é alterado, a tensão superficial também é e, por consequência, o número

de Weber. Neste trabalho este efeito foi compensado também reduzindo a velocidade de impacto para manter o número de Weber. Entretanto, é possível controlar a tensão superficial adicionando novos termos no esquema de força (LI; LUO, 2013) e, assim, é possível manter o Weber sem alterar a velocidade de simulação.

6.4 Diferenças finitas para o método do pseudopotencial

Nos resultados observados na Figura 49 houve uma certa discrepância entre a implementação da E-CS com o esquema de força de Li, Luo e Li (2013) em relação à implementação da equação de estado do Peng com o esquema de Guo, Zheng e Shi (2002). Durante este estudo, em algum momento não se sabia se estas diferenças eram devido a erros numéricos ou a alguma particularidade de cada esquema de força. Como o procedimento de Peng *et al.* é muito preciso para interface plana, pensou-se que este desvio poderia estar relacionado a uma falta de precisão da outra implementação. Com essa suspeita, buscou-se um procedimento que permitisse obter a solução exata para o problema. Desta forma, se algum dos modelos apresentasse um resultado distinto da solução de referência, saber-se-ia qual dos dois estaria “errado”. Estes fatos levaram à ideia de se implementar as equações macroscópicas do método do pseudopotencial utilizando um esquema de diferenças finitas (DF). Este tipo de discretização apresenta a vantagem do refinamento de malha ser muito intuitivo e assim se obteria uma solução de referência para o problema com erros de discretização desprezíveis.

Posteriormente descobriu-se que a diferença nos resultados entre os dois procedimentos comentados eram devido a particularidades de cada um e não por erros de discretização. Para manter a exposição dos resultados mais sucinta, optou-se por não adicionar o procedimento de diferenças finitas neste estudo. Porém, na produção desta tese, adotou-se a abordagem de documentar todos os desenvolvimentos realizados ao longo deste trabalho. Mesmo que um determinado desenvolvimento não contribua diretamente para o estudo em questão, a sua documentação pode ser útil para a comunidade servindo como base para algum trabalho futuro. Desta forma, será exposto nesta seção o procedimento de diferenças finitas desenvolvido por motivos de documentação, caso possa ser de interesse de algum leitor.

6.4.1 Equações governantes

As equações de conservação de massa e quantidade de movimento do MBR são dadas pelas Equações (2.39) e (2.40a). Para o método do pseudopotencial o tensor de pressão do MBR é alterado para a forma apresentada na Equação (2.59a). Já a equação de conservação de energia para sistemas bifásicos de um componente é dada pela Equação (2.90). Para facilitar a leitura, estas equações serão repetidas aqui:

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho u_\gamma) = 0, \quad (6.14a)$$

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\beta p_{\alpha\beta} + F_\alpha + \partial_\beta \sigma'_{\alpha\beta}, \quad (6.14b)$$

$$\partial_t T = -u_\gamma \partial_\gamma T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\gamma (\kappa \partial_\gamma T) - \frac{T}{\rho c_v} \left(\frac{\partial p_{EOS}}{\partial T} \right)_\rho \partial_\gamma u_\gamma. \quad (6.14c)$$

O tensor de tensões viscosas $\sigma'_{\alpha\beta}$ é dado pela expressão:

$$\sigma'_{\alpha\beta} = \mu(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \zeta \partial_\gamma u_\gamma. \quad (6.15)$$

O parâmetro μ é o coeficiente de viscosidade dinâmica e ζ é um coeficiente usado para controlar a viscosidade *bulk*. Em geral, os autores definem a viscosidade *bulk* como a combinação $(2/3\mu + \zeta)$ (KRÜGER *et al.*, 2017, p. 6). O tensor de pressão para o método do pseudopotencial assume a forma:

$$p_{\alpha\beta} = (p_{EOS} + A_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + A_2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (6.16)$$

Os coeficientes A_1 , A_2 e A_3 afetam diretamente as densidades de fase e tensão superficial do método para um sistema em equilíbrio.

6.4.2 Discretização no espaço e no tempo

Na seção 5.1.1, apresentou-se as discretizações em diferenças finitas baseadas na notação de momentos do MBR. Estas discretizações estão dispostas na Equação (5.3). Com apenas dois destes momentos é possível discretizar as equações de conservação no espaço, estes momentos são:

$$\frac{M_\alpha^{(1)}(\mathcal{F})}{c_s^2 \Delta t} = \frac{\sum_i w_i c_{i\alpha} \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)}{c_s^2 \Delta t} = \partial_\alpha \mathcal{F} + O(\Delta x^2), \quad (6.17a)$$

$$\frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathcal{F}(\mathbf{x}))}{c_s^4 \Delta t^2} = \frac{\sum_i w_i (c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) \mathcal{F}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)}{c_s^4 \Delta t^2} = \partial_\alpha \partial_\beta \mathcal{F} + O(\Delta x^2). \quad (6.17b)$$

Os parâmetros w_i , \mathbf{c}_i e c_s^2 foram apresentados na seção 2.2.2 para o caso da rede D2Q9. Para facilitar a leitura, estes são repetidos aqui:

$$\mathbf{w}_i = \begin{cases} 4/9, & i = 0, \\ 1/12, & i = 1, \dots, 4, \\ 1/36, & i = 5, \dots, 8, \end{cases} \quad (6.18a)$$

$$\mathbf{c}_i = \begin{cases} (0, 0), & i = 0, \\ \left(\frac{\Delta x}{\Delta t}, 0 \right), \left(0, \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), \left(-\frac{\Delta x}{\Delta t}, 0 \right), \left(0, -\frac{\Delta x}{\Delta t} \right), & i = 1, \dots, 4, \\ \left(\frac{\Delta x}{\Delta t}, \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), \left(-\frac{\Delta x}{\Delta t}, \frac{\Delta x}{\Delta t} \right), \left(-\frac{\Delta x}{\Delta t}, -\frac{\Delta x}{\Delta t} \right), \left(\frac{\Delta x}{\Delta t}, -\frac{\Delta x}{\Delta t} \right), & i = 5, \dots, 8, \end{cases} \quad (6.18b)$$

$$c_s^2 = \frac{1}{3} \left(\frac{\Delta x}{\Delta t} \right)^2. \quad (6.18c)$$

Os esquemas numéricos apresentados podem ser aplicados para a discretização das derivadas espaciais presentes nas Equações (6.14a), (6.14b) e (6.14c):

$$\partial_\gamma(\rho u_\gamma) \approx \frac{M_\gamma^{(1)}(\rho u_\gamma)}{c_s^2 \Delta t}, \quad (6.19a)$$

$$\partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) \approx \frac{M_\beta^{(1)}(\rho u_\alpha u_\beta)}{c_s^2 \Delta t}, \quad (6.19b)$$

$$\partial_\gamma(T) \approx \frac{M_\gamma^{(1)}(T)}{c_s^2 \Delta t}. \quad (6.19c)$$

Para discretizar o termo referente ao tensor de tensões viscosas, primeiro será calculado o seu divergente $\partial_\beta \sigma'_{\alpha\beta}$:

$$\begin{aligned} \partial_\beta \sigma'_{\alpha\beta} &= (\partial_\beta \mu)(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha) + \mu(\partial_\alpha \partial_\beta u_\beta + \partial_\beta \partial_\beta u_\alpha) \\ &+ (\partial_\alpha \zeta) \partial_\gamma u_\gamma + \zeta \partial_\alpha \partial_\beta u_\beta. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Como os coeficientes de viscosidade μ e ζ podem também ser funções da densidade, optou-se por escrever as derivadas $\partial_\beta \mu$ e $\partial_\alpha \zeta$ no seguinte formato:

$$\partial_\beta \mu = (\partial_\rho \mu)(\partial_\beta \rho), \quad \partial_\alpha \zeta = (\partial_\rho \zeta)(\partial_\alpha \rho). \quad (6.21)$$

Assim, a discretização de $\partial_\beta \sigma'_{\alpha\beta}$ pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \partial_\beta \sigma'_{\alpha\beta} &\approx (\partial_\rho \mu) \left(\frac{M_\beta^{(1)}(\rho)}{c_s^2 \Delta t} \right) \left(\frac{M_\alpha^{(1)}(u_\beta)}{c_s^2 \Delta t} + \frac{M_\beta^{(1)}(u_\alpha)}{c_s^2 \Delta t} \right) + \mu \left(\frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(u_\beta)}{c_s^4 \Delta t^2} + \frac{M_{\beta\beta}^{(2)}(u_\alpha)}{c_s^4 \Delta t^2} \right) \\ &+ (\partial_\rho \zeta) \left(\frac{M_\alpha^{(1)}(\rho)}{c_s^2 \Delta t} \right) \left(\frac{M_\gamma^{(1)}(u_\gamma)}{c_s^2 \Delta t} \right) + \zeta \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(u_\beta)}{c_s^4 \Delta t^2}. \end{aligned} \quad (6.22)$$

Na equação de energia, há o termo $\partial_\gamma(\kappa \partial_\gamma)$. Como κ pode ser uma função de outras variáveis como ρ e T , este termo é discretizado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \partial_\gamma(\kappa \partial_\gamma) &= (\partial_\gamma \kappa)(\partial_\gamma T) + \kappa \partial_\gamma \partial_\gamma T \\ &= \frac{M_\alpha^{(1)}(\kappa)}{c_s^2 \Delta t} \frac{M_\alpha^{(1)}(T)}{c_s^2 \Delta t} + \kappa \frac{M_{\gamma\gamma}^{(2)}(T)}{c_s^4 \Delta t^2}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

O último termo com derivada espacial da equação de conservação de quantidade de movimento que falta ser discretizado é $\partial_\beta p_{\alpha\beta}$. Este procedimento será feito em duas etapas. Primeiro será definida uma forma discreta do tensor de pressões:

$$p_{\alpha\beta} \approx \left(p_{EOS} + A_1 G \frac{M_\gamma^{(1)}(\psi)}{c_s^2 \Delta t} \frac{M_\gamma^{(1)}(\psi)}{c_s^2 \Delta t} + A_2 G \psi \frac{M_{\gamma\gamma}^{(2)}(\psi)}{c_s^4 \Delta t^2} \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G \psi \frac{M_{\alpha\beta}^{(2)}(\psi)}{c_s^4 \Delta t^2}. \quad (6.24)$$

Após o cálculo da pressão em cada nó, calcula-se o divergente pela seguinte expressão:

$$\partial_\beta p_{\alpha\beta} \approx \frac{M_\beta^{(1)}(p_{\alpha\beta})}{c_s^2 \Delta t}. \quad (6.25)$$

Note-se que todos os termos relacionados ao método do pseudopotencial foram incorporados ao tensor de pressão. Assim, F_α representa apenas forças de campo externas agindo sobre o fluido como, por exemplo, a força gravitacional.

Com o todos os detalhes da discretização espacial devidamente descritos, resta a discussão da discretização no tempo. Para isso, utiliza-se de um método de Runge-Kutta de segunda ordem. Considera-se que em uma determinada modelagem numérica de um problema bidimensional, dividiu-se o domínio físico em uma malha com $N_x \times N_y$ nós. As variáveis $\rho(t, x, y)$, $u_x(t, x, y)$, $u_y(t, x, y)$ e $T(t, x, y)$ agora são avaliadas em cada nó. Estas variáveis são determinadas pelos índices $1 < i < N_x$; $1 < j < N_y$; e também um índice n para o tempo: $\rho_{i,j}^n$, $u_{x(i,j)}^n$, $u_{y(i,j)}^n$ e $T_{i,j}^n$. Considera-se também que $\boldsymbol{\rho}^n$, \mathbf{u}_x^n , \mathbf{u}_y^n e \mathbf{T}^n representem as matrizes que contêm todos os elementos $\rho_{i,j}^n$, $u_{x(i,j)}^n$, $u_{y(i,j)}^n$ e $T_{i,j}^n$ para todos os valores de i e j . Com estas considerações, pode-se escrever a equação de conservação de massa no formato:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{i,j}^n \approx & - \frac{\sum_k w_k c_{kx} (\rho u_x)_{(i+\bar{c}_{kx}, j+\bar{c}_{ky})}}{c_s^2 \Delta t} \\ & - \frac{\sum_k w_k c_{ky} (\rho u_y)_{(i+\bar{c}_{kx}, j+\bar{c}_{ky})}}{c_s^2 \Delta t}. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Na expressão acima, \bar{c}_{ix} e \bar{c}_{iy} representam as velocidades c_{ix} e c_{iy} em unidades de rede, ou seja, fazendo $\Delta x = 1$ e $\Delta y = 1$ na Equação (6.18b). Esta expressão pode ser interpretada da seguinte forma: a derivada temporal $\partial_t \rho_{i,j}^n$ é uma função das variáveis ρ , u_x , u_y e T avaliadas no nó (i, j) e também nos nós vizinhos. De maneira geral, pode-se escrever $\partial_t \rho_{i,j}^n = f_1(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n)$. Considera-se também que $\partial_t (\rho u_x)_{i,j}^n = f_2(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n)$; $\partial_t (\rho u_y)_{i,j}^n = f_3(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n)$ e $\partial_t T_{i,j}^n = f_4(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n)$. Com estas definições, pode-se escrever o primeiro passo das discretizações de todas essas variáveis no tempo:

$$\rho_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \rho_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_1(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n), \quad (6.27a)$$

$$(\rho u_x)_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = (\rho u_x)_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_2(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n), \quad (6.27b)$$

$$(\rho u_y)_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = (\rho u_y)_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_3(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n), \quad (6.27c)$$

$$T_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = T_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{2} f_4(\boldsymbol{\rho}^n, \mathbf{u}_x^n, \mathbf{u}_y^n, \mathbf{T}^n), \quad (6.27d)$$

sendo que o índice $n + 1/2$ significa que aquela variável é avaliada no instante $t_n + \Delta t/2$. Repetindo este cálculo para todos os índices i e j , determina-se as matrizes: $\boldsymbol{\rho}^{n+1/2}$, $\mathbf{u}_x^{n+1/2}$, $\mathbf{u}_y^{n+1/2}$ e $\mathbf{T}^{n+1/2}$. Com isso, pode-se calcular o segundo passo da discretização:

$$\rho_{i,j}^{n+1} = \rho_{i,j}^n + (\Delta t) f_1(\boldsymbol{\rho}^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_x^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_y^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{T}^{n+\frac{1}{2}}), \quad (6.28a)$$

$$(\rho u_x)_{i,j}^{n+1} = (\rho u_x)_{i,j}^n + (\Delta t) f_2(\boldsymbol{\rho}^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_x^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_y^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{T}^{n+\frac{1}{2}}), \quad (6.28b)$$

$$(\rho u_y)_{i,j}^{n+1} = (\rho u_y)_{i,j}^n + (\Delta t) f_3(\boldsymbol{\rho}^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_x^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_y^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{T}^{n+\frac{1}{2}}), \quad (6.28c)$$

$$T_{i,j}^{n+1} = T_{i,j}^n + (\Delta t) f_4 \left(\rho^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_x^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}_y^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{T}^{n+\frac{1}{2}} \right), \quad (6.28d)$$

A seguir, alguns testes foram realizados para validar o procedimento de diferenças finitas. Utilizou-se $A_2 = \Delta x^2/6$ e $A_3 = \Delta x^2/3$, o que equivale ao modelo de Li, Luo e Li (2013). O valor de A_1 é calculado usando o mesmo procedimento utilizado na seção 5.3.1.

6.4.3 Teste dinâmico: oscilação suave de uma gota

Na subseção anterior, mostrou-se o esquema de diferenças finitas desenvolvido para resolver as equações macroscópicas do método do pseudopotencial. Nesta subseção, este esquema será testado em uma simulação dinâmica da oscilação suave de uma gota. Os detalhes de resolução deste teste foram mostrados na seção 4.5.4. Para facilitar a comparação com o MBR, todos os valores da DF são definidos em unidades de rede, ou seja $\Delta x = 1$ e $\Delta t = 1$. Isto implica em: $A_2 = 1/6$ e $A_3 = 1/3$. Quando o refinamento de malha for realizado em DF, estes valores de A_2 e A_3 continuarão sendo utilizados. Se ao invés disso se utilizasse $A_2 = \Delta x^2/6$ e $A_3 = \Delta x^2/3$ com diferentes valores de Δx , as equações macroscópicas mudariam com a malha e, por consequência, a sua solução. O intuito é manter o mesmo modelo físico e alterar a malha para alcançar convergência de soluções.

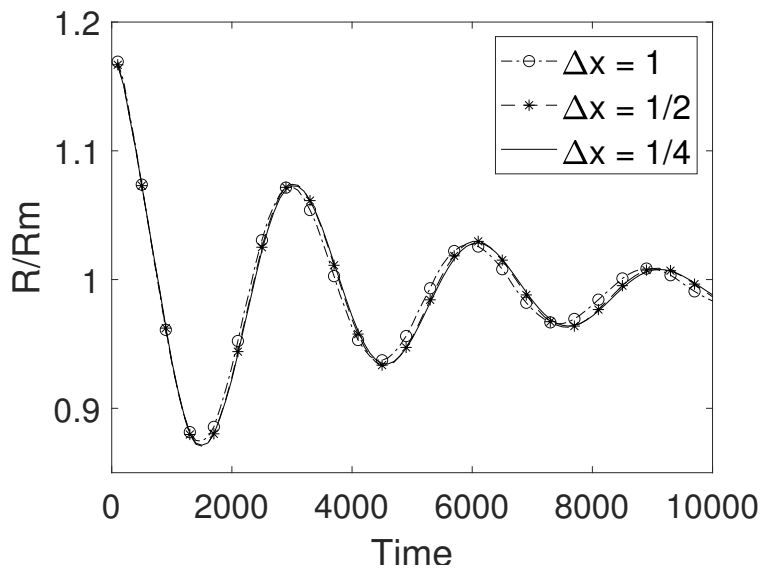
O domínio computacional é dado por uma malha de $(N_x, N_y) = (100, 100)$ nós. Os raios da elipse são $R_{max} = 35$ e $R_{min} = 25$. A E-CS é utilizada com $a = 0.5$ e temperatura reduzida $T_r = 0.6$. Este tipo de simulação requer baixas velocidades para se evitar a dissipação muito rápida das oscilações. Observou-se que $\nu = \mu/\rho = 0.033$ e $\nu_\zeta = \zeta/\rho = 0$ seriam valores apropriados. Porém, as simulações se tornaram instáveis quando tentou-se realizar um refinamento de malha. Na literatura do MBR (LI; LUO; LI, 2013), costuma-se aumentar a estabilidade do método ao se adotar diferentes viscosidades para as fases líquido e vapor. Assim, adotou-se:

$$\nu = \nu_l \left(\frac{\rho - \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \right) + \nu_v \left(\frac{\rho_l - \rho}{\rho_l - \rho_v} \right), \quad (6.29a)$$

$$\nu_\zeta = \frac{\zeta}{\rho} = \nu_{\zeta;l} \left(\frac{\rho - \rho_v}{\rho_l - \rho_v} \right) + \nu_{\zeta;v} \left(\frac{\rho_l - \rho}{\rho_l - \rho_v} \right). \quad (6.29b)$$

Observou-se que os valores $\nu_l = 0.033$, $\nu_v = 0.1$, $\nu_{\zeta;l} = 0.067$ e $\nu_{\zeta;v} = 0$ permitiram simulações estáveis com todas as malhas. Os resultados do raio da gota ao longo do tempo são mostrados na Figura 52. Todas as malhas forneceram valores próximos de amplitude e frequência de oscilação. Também realizou-se simulações com o MBR para se comparar com o esquema de diferenças finitas. Usando os mesmos valores já descritos acima para especificar a simulação nos dois métodos, comparou-se a solução do MBR com a diferenças finitas para $\Delta x = 1/4$. Os resultados são apresentados na Figura 53. Observa-se que as duas simulações apresentaram resultados bem próximos, o que indica que o esquema desenvolvido está resolvendo adequadamente as equações do método do pseudopotencial.

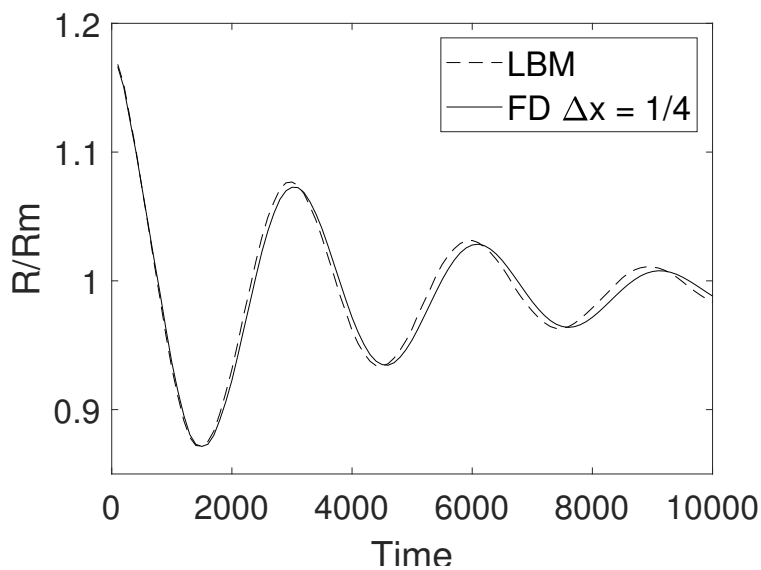
Figura 52 – Raio da gota ao longo do tempo para o teste da oscilação da gota. O raio médio é definido como $R_m = \sqrt{R_{min}R_{max}}$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Apesar da boa concordância, ainda há uma pequena diferença entre os métodos que pode estar relacionada a erros de discretização do MBR, pois esta solução não foi refinada.

Figura 53 – Comparação entre MBR-P e DF-P para o teste da gota oscilando.

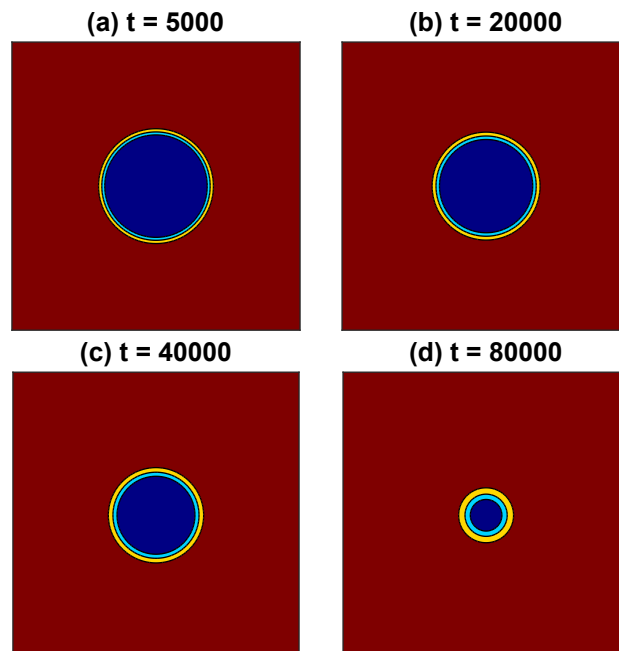


Fonte: Elaborado pelo autor.

6.4.4 Teste dinâmico: Evaporação de uma gota

Neste teste será simulada a evaporação de uma gota de líquido cercada por vapor quente dentro de uma cavidade fechada. Este teste é amplamente utilizado como *benchmark* na literatura do MBR-P (LI *et al.*, 2016; LI; ZHOU; YAN, 2017). O domínio físico é dado por uma caixa de dimensão $(N_x, N_y) = (100, 100)$ e uma gota de raio $R_0 = 20$ é inicializada no centro do domínio. As densidades de saturação são calculadas para uma temperatura $T_{sat} = 0.86T_c$. Na literatura do MBR-P, a equação de Peng-Robinson (P-R) é amplamente utilizada para problemas com mudança de fase. Então, neste teste se utilizou esta mesma equação. Seguindo o trabalho de Li, Zhou e Yan (2017), a temperatura da gota de líquido é inicializada em $T_l = T_{sat}$, enquanto que a região do vapor é inicializada a uma temperatura mais alta $T_v = T_{sat} + \Delta T$, sendo $\Delta T = 0.14T_c$. Como cada fase possui uma temperatura diferente, inicializou-se esta variável usando a função tangente hiperbólica. Desta forma, a temperatura varia continuamente pela interface definida como $W = 5$, similar a testes anteriores. A condutividade térmica é definida como uma constante $\lambda = 2/3$ e o calor específico é $c_v = 5$. Os coeficientes de viscosidade cinemática são definidos como $\nu = 0.1$ e $\nu_\zeta = 0$. Este problema foi resolvido com o DF-P usando duas malhas diferentes $\Delta x = 1$ e $\Delta x = 1/2$.

Figura 54 – Imagens da evaporação de uma gota em diferentes instantes de tempo. Resultado obtido com o FD-P usando $\Delta x = 1/2$.

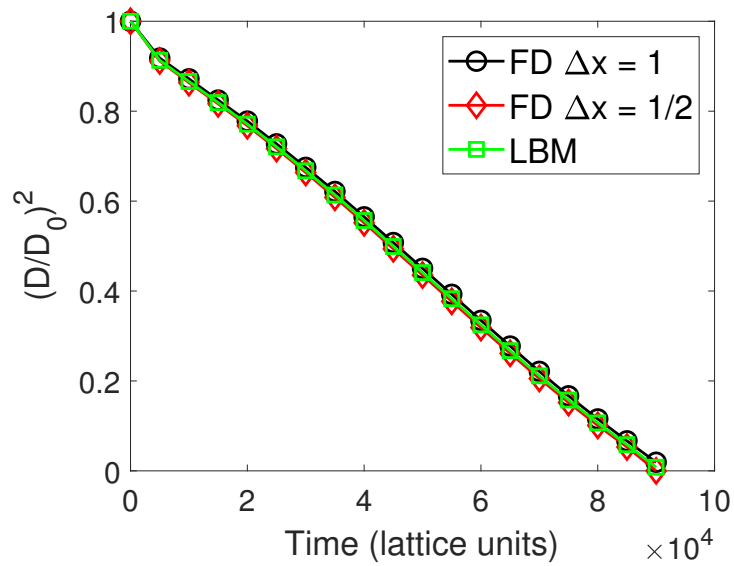


Fonte: Elaborado pelo autor.

Imagens do perfil de densidade do sistema em diferentes momentos no tempo são mostradas na Figura 54 para o DF-P usando $\Delta x = 1/2$. Este teste também foi simulado usando o método do pseudopotencial híbrido comentado no capítulo de fundamentação

teórica e desenvolvido por Li *et al.* (2015). Uma comparação entre o DF-P e o MBR-P é mostrada na Figura 55 para o diâmetro da gota ao longo do tempo. Observa-se que os dois métodos forneceram resultados muito próximos.

Figura 55 – Comparação entre MBR-P e DF-P para o teste da gota evaporando.



Fonte: Elaborado pelo autor.

7 RESULTADOS: ESTUDO FUNDAMENTAL DE EBULIÇÃO NO MBR-P

7.1 Estudo fundamental de ebulição e efeito da força gravitacional

Neste trabalho examinou-se simulações de transferência de calor em sistemas bifásicos com particular interesse no aparecimento de instabilidades termodinâmicas que levam à formação de uma nova fase de vapor ou líquido. Derivou-se as condições termodinâmicas para o início da nucleação em tais sistemas. Nesta análise, observou-se que a maioria dos trabalhos da literatura utilizam uma formulação para a força gravitacional que pode não ser apropriada fisicamente em algumas condições neste tipo de sistema. Uma forma mais natural de gravidade leva a resultados que diferem significativamente com relação ao procedimento adotado na literatura para altos valores de aceleração gravitacional.

7.1.1 Força gravitacional na literatura do método do pseudopotencial

Esta seção é dedicada ao estudo do uso de diferentes forças de gravidade no MBR-P. Entretanto, não há um linha do tempo linear deste uso. Muitos autores do MBR-P baseiam os seus trabalhos em estudos que utilizam outros métodos como, por exemplo, MBRs baseados na equação de Cahn-Hilliard ou até em trabalhos que não utilizam MBR. Assim, nesta seção será feita menção a diferentes tipos de métodos, que não necessariamente são o pseudopotencial. Porém, todos estes trabalhos serviram como base para os estudos que utilizam o pseudopotencial.

De acordo com Chen *et al.* (2014), há três principais maneiras de se introduzir a força de gravidade em MBR multifásicos na literatura. A primeira consiste na forma usual:

$$\mathbf{F}_g = \rho \mathbf{g}. \quad (7.1)$$

Uma outra forma considera a diferença da densidade local com relação a densidade média do domínio $\langle \rho \rangle$:

$$\mathbf{F}_g = (\rho - \langle \rho \rangle) \mathbf{g}. \quad (7.2)$$

Por fim, há alguns trabalhos que utilizam a seguinte formulação:

$$\mathbf{F}_g = -(\rho_l - \rho_g) \mathbf{g}, \quad (7.3)$$

e esta força é aplicada apenas na fase de vapor. Apesar da primeira forma ser aquela encontrada em qualquer livro de física e ser aplicada por alguns trabalhos na literatura do MBR, ela não é o método preferido para simulações de ebulição, como vai ser comentado mais adiante no texto. A terceira formulação de gravidade, dada pela Equação (7.3), pode ser encontrada no trabalho de Márkus e Házi (2011), em que os autores utilizaram o

método do pseudopotencial. A mesma forma é encontrada também no trabalho de Takada *et al.* (2000) com o modelo de fluido binário desenvolvido por Swift *et al.* (1996).

A segunda força de gravidade foi utilizada por Sankaranarayanan *et al.* (1999) para simular a ascensão de uma bolha num domínio composto por líquido com fronteiras periódicas. O MBR multifásico proposto por He e Doolen (2002) foi usado em suas simulações. Os autores usaram esta forma particular de gravidade para evitar acelerar todo o fluido devido a ausência de paredes sólidas para balancear a força aplicada. Desta forma, a Equação (7.2) é mais adequada para domínios completamente periódicos. Alguns artigos de MBR referem-se ao trabalho de Bunner e Tryggvason (2002) quando utilizam esta abordagem para gravidade. Os autores deste artigo (BUNNER; TRYGGVASON, 2002) estudaram o movimento de bolhas em domínios completamente periódicos usando uma discretização baseada em diferenças finitas das equações de Navier-Stokes.

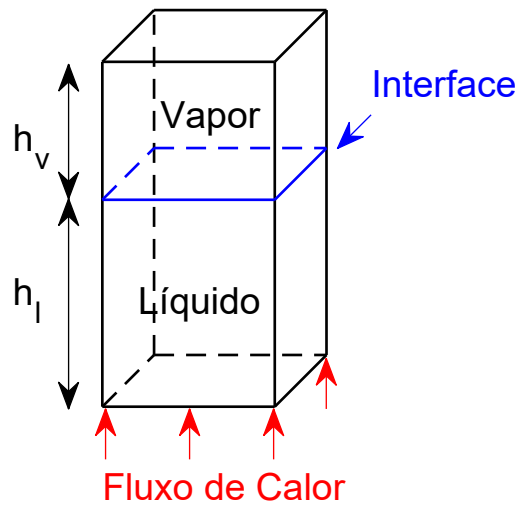
Amaya-Bower e Lee (2010) compararam as três forças da gravidade no problema de ascensão de uma bolha resolvido por um MBR multifásico baseado em Cahn-Hilliard. Utilizou-se um domínio confinado com condição de não-deslizamento em todas as fronteiras. A diferença entre os números de Reynolds terminal foi menor que 1% para todos os casos. A conclusão foi que a forma escolhida para modelar a gravidade possui pouca influência no resultado da simulação. Com o passar do tempo, o MBR-P foi sendo aplicado em casos cada vez mais complexos como, por exemplo, ebulição em piscina ou em escoamentos no interior de canais. Para essas aplicações, a segunda forma de gravidade se tornou amplamente utilizada (LI *et al.*, 2015; GONG; CHENG, 2015; FANG *et al.*, 2017; SUN *et al.*, 2017; CHANG *et al.*, 2019; WANG; LOU; LI, 2020). Chen *et al.* (2014) comentaram que simulações numéricas de uma bolha ascendente num domínio confinado indicam que a maneira de se calcular a força de gravidade afeta a estabilidade do método e que a Equação (7.2) performou melhor para simulações multifásicas com altas razões de densidade.

Apesar de todos estes estudos, ainda não foi discutido na literatura o impacto de cada formulação em simulações envolvendo ebulição. Neste trabalho, mostrou-se que as diferenças podem ser significativas por um simples racional. Cada formulação induz um campo de pressão diferente nas simulações. Em problemas monofásicos, apenas o gradiente da pressão é importante. Porém, para simulações multifásicas, a equação de estado relaciona a pressão com densidade e temperatura. A equação de estado é responsável por induzir uma mudança de fase quando o fluido atinge um estado de desequilíbrio termodinâmico. Desta forma, não apenas o gradiente de pressão importa, como também a magnitude da pressão de fato.

7.1.2 Estudo termodinâmico

Na seção anterior, mostrou-se as principais forças de gravidade utilizadas na literatura do MBR-P. Nesta seção será discutido como essas diferentes formulações afetam o fenômeno de mudança de fase. Esta discussão será feita no contexto de métodos de um componente que usam uma equação de estado para modelar um gás não-ideal. Como nos capítulos anteriores, a equação de estado usada neste trabalho é a E-CS. Utilizou-se $a = 0.5$. Adotou-se como estratégia realizar a análise física de um sistema térmico simplificado para o qual é possível construir soluções analíticas e então prever em quais condições este sistema apresentaria uma mudança de fase. Considerou-se o sistema físico apresentado na Figura 56. Este consiste em um vaso fechado onde duas fases estão separadas por uma

Figura 56 – Esquema do sistema físico utilizado para o estudo termodinâmico.



Fonte: Elaborado pelo autor.

interface plana a temperatura T_i . A uma distância h_l abaixo da interface, há a parede inferior onde é aplicado um fluxo de calor constante q' . A uma distância h_v acima da interface, encontra-se a parede superior. Considera-se que calor pode fluir através desta interface e que o fluxo de calor é constante ao longo de todo o domínio no equilíbrio. A questão que deseja-se resolver é: em quais condições o sistema descrito acima apresentará a formação de uma nova fase? Antes de se resolver esta questão, será determinado os perfis de densidade, pressão e temperatura esperados para este sistema.

7.1.2.1 Perfis de densidade, pressão e temperatura

Considerou-se que a temperatura da interface é um parâmetro conhecido. Se a interface está em equilíbrio, então a pressão e as densidades das fases vapor e líquido nas redondezas deverão ser iguais às obtidas pela regra de Maxwell dada pela Equação (2.68). Estas serão chamadas de densidades e pressão de saturação: ρ_v^{sat} , ρ_l^{sat} e p^{sat} . Definiu-se que a interface fica numa determinada posição h_i . Assim, os campos de densidade, pressão e temperatura podem ser calculados numericamente por meio de uma discretização do domínio. As equações para a região de líquido são dadas por:

$$T(h_i) = T_i; \quad p(h_i) = p_i = p^{sat}(T_i); \quad \rho_l(h_i) = \rho_l^{sat}; \quad (7.4a)$$

$$dh = h_l/N; \quad (7.4b)$$

$$T(h - dh) = T(h) + \frac{q'}{k_l} dh; \quad (7.4c)$$

$$p(h - dh) = p(h) - \mathbf{F}_g(\rho_l(h)) \cdot dh; \quad (7.4d)$$

$$\rho(h - dh) = \text{Density}(T(h - dh), p(h - dh)); \quad (7.4e)$$

sendo N o número de nós em que dividiu-se o domínio, k_l é a condutividade térmica do líquido e $\mathbf{F}_g(\rho)$ pode ser qualquer força gravitacional volumétrica descritas nas Equações (7.1), (7.2) e (7.3). Estas operações podem ser repetidas até que se obtenha as propriedades do fluido na parede inferior $T(h_i - h_l)$, $p(h_i - h_l)$ e $\rho_l(h_i - h_l)$.

Note-se que primeiramente foi calculada a temperatura e a pressão numa certa posição. Então, a densidade, Equação (7.4e), é calculada como uma função das variáveis anteriores. A definição de pressão no método do pseudopotencial é um tema que exige cuidado. A equação de conservação de quantidade de movimento envolve um tensor de pressão definido na Equação (2.59a). Por comodidade esta equação é aqui repetida:

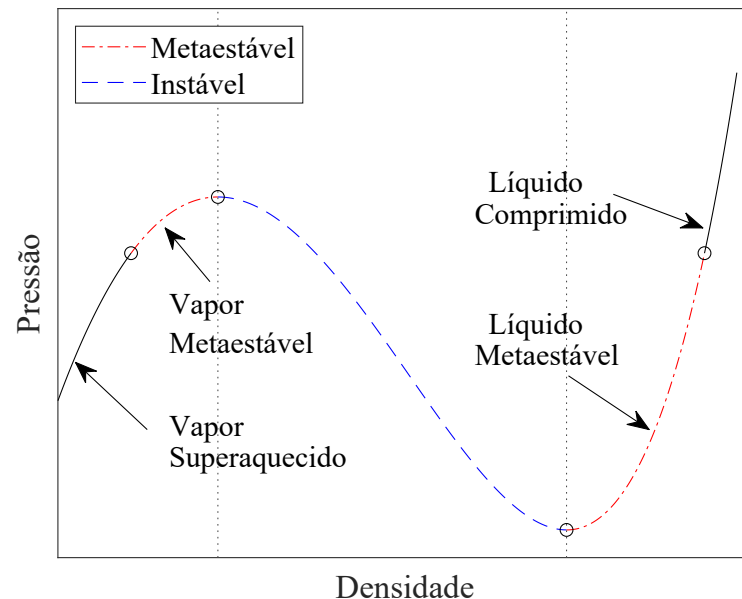
$$p_{\alpha\beta} = \left(c_s^2 \rho + G\psi^2 + A_1 G(\partial_\gamma \psi)(\partial_\gamma \psi) + A_2 G\psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right) \delta_{\alpha\beta} + A_3 G\psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (7.5)$$

O problema físico em questão é tratado como sendo unidimensional. Dessa forma, definindo-se o eixo x como sendo aquele com direção normal à interface, apenas a componente p_{xx} influencia na conservação de quantidade de movimento. Esta componente será chamada de pressão normal ao longo do texto. Assume-se que esta pressão normal, calculada pelo balanço de forças, é igual a pressão dada pela equação de estado p_{EOS} . Como pode-se observar na Equação (7.5), a pressão normal é a soma de p_{EOS} ($p_{EOS} = c_s^2 \rho + G\psi^2$) com outros termos que dependem de gradientes de um potencial de interação. Porém, os termos que dependem de gradientes são mais relevantes na região da interface. Então, assume-se que nas regiões *bulk* a pressão normal pode ser bem aproximada pela componente da equação de estado.

Dessa forma, a função usada para o cálculo da densidade a partir da pressão e temperatura é a equação de estado. Também é necessário inverter a função de $p = f_1(\rho, T)$

para $\rho = f_2(p, T)$. Porém, deve-se tomar cuidado ao se tentar inverter esta função. Na Figura 57 mostrou-se a pressão dada pela E-CS em função da densidade para uma determinada temperatura fixa. Pode-se observar que a densidade não pode ser escrita

Figura 57 – Ilustração da relação pressão-densidade dada pela E-CS para uma determinada temperatura fixa.

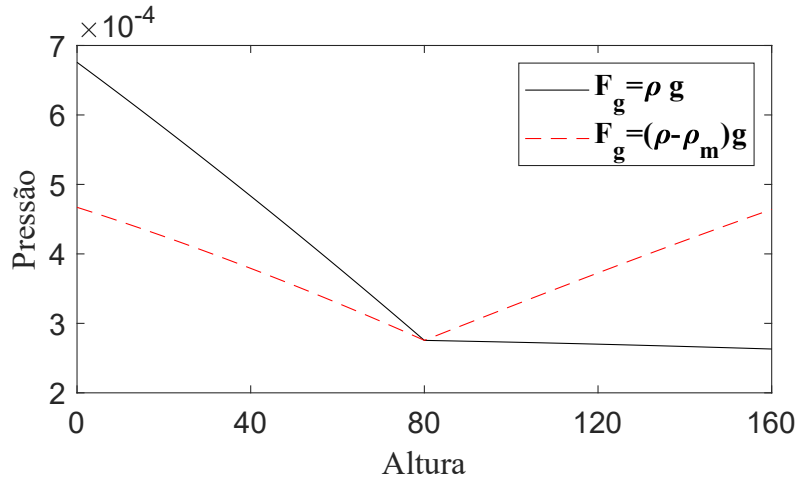


Fonte: Elaborado pelo autor.

como uma função geral da pressão porque há valores em que um único valor de pressão podem corresponder a duas densidades distintas. Porém, é possível inverter partes isoladas desta função. Por exemplo, supõe-se o interesse for a obtenção que retorne a densidade do líquido para uma determinada pressão e temperatura. Isto pode ser feito definindo uma função que é composta pelas regiões de líquido metaestável e comprimido para cada temperatura. Neste trabalho esta inversão é feita numericamente.

Para ilustrar o procedimento comentado, definiu-se o seguinte exemplo: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.5 \times 10^{-5}$, $q'/T_c = 2.5 \times 10^{-5}$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$, sendo k_v a condutividade térmica do vapor. O procedimento para calcular a solução na região de vapor segue a mesma ideia da região de líquido. Os perfis de pressão, considerando as gravidades das Equações (7.1) e (7.2), são mostradas na Figura (58). Observa-se que a forma mais natural de gravidade da Equação (7.1) produz uma variação de pressão muito menor na região do vapor com relação ao líquido devido à grande diferença de densidades entre as fases. Já a formulação da Equação (7.2) resulta num campo de pressão com um formato em “V”.

Figura 58 – Perfil de pressão para um exemplo com $h_v = h_l = 80$, $g = 1.5 \times 10^{-5}$, $q'/T_c = 2.5 \times 10^{-5}$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.



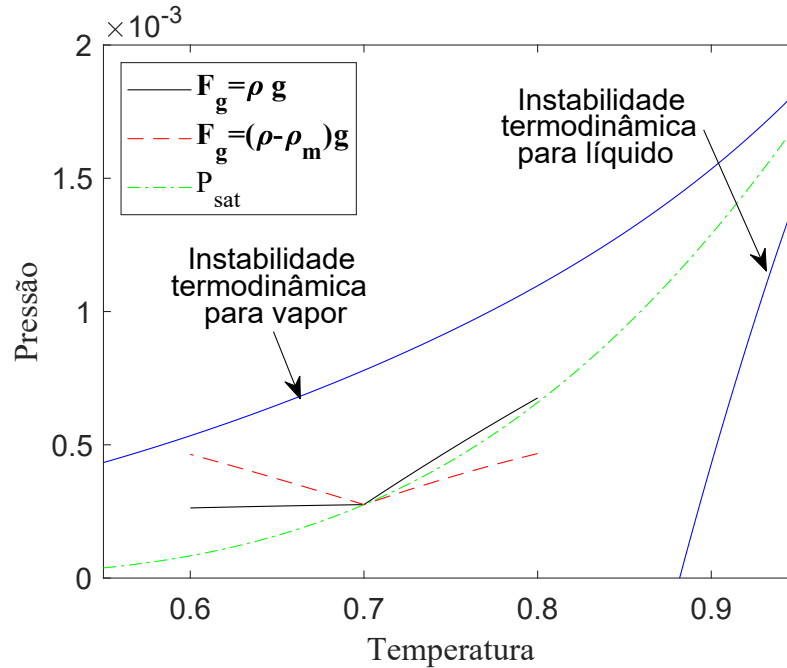
Fonte: Elaborado pelo autor.

7.1.2.2 Condições termodinâmicas para a formação de uma nova fase

Devido ao fluxo de calor aplicado na parede inferior, é observada a temperatura mais alta do domínio nessa localidade denominada de T_{hot} . Como este fluxo é constante ao longo do domínio no equilíbrio, a temperatura decai monotonicamente até que a temperatura mínima T_{cold} é atingida na parede superior. Na Figura 58, mostrou-se como a pressão do sistema varia com a posição do domínio. Mas também é interessante observar a pressão em relação a temperatura de cada ponto. Esta relação pressão-temperatura é mostrada na Figura 59. Também plotou-se como a pressão de saturação p^{sat} varia com a temperatura. Os pontos em que os perfis de pressão do exemplo anterior coincidem com a linha de saturação representam a interface líquido-vapor. Também adicionou-se duas curvas indicadas na figura como regiões de instabilidade termodinâmica.

Analisando a curva pressão-densidade (com T fixo) para a E-CS na Figura 57, observa-se um ponto de máximo local e um de mínimo local. Entre estes dois pontos, há uma região de instabilidade termodinâmica em que $\partial p_{EOS}/\partial \rho < 0$. No exemplo citado, se um determinado ponto na região do líquido atinge o estado de mínimo local para uma certa temperatura, isto significa que aquele ponto está em equilíbrio não estável. Se ocorrer uma pequena perturbação, o fluido pode entrar na região de instabilidade termodinâmica e induzir a formação de uma nova fase. Desta forma, as linhas indicadas como de instabilidade na Figura 59 representam estes máximos e mínimos locais da equação de estado. Se o perfil de pressão do sistema do exemplo citado cruzar uma dessas linhas, isto significa que o fluido não pode atingir um estado de equilíbrio estável e uma nova fase irá se formar.

Figura 59 – Relação pressão-temperatura para o mesmo exemplo da Figura 58. Linhas de instabilidade termodinâmica também foram plotadas.



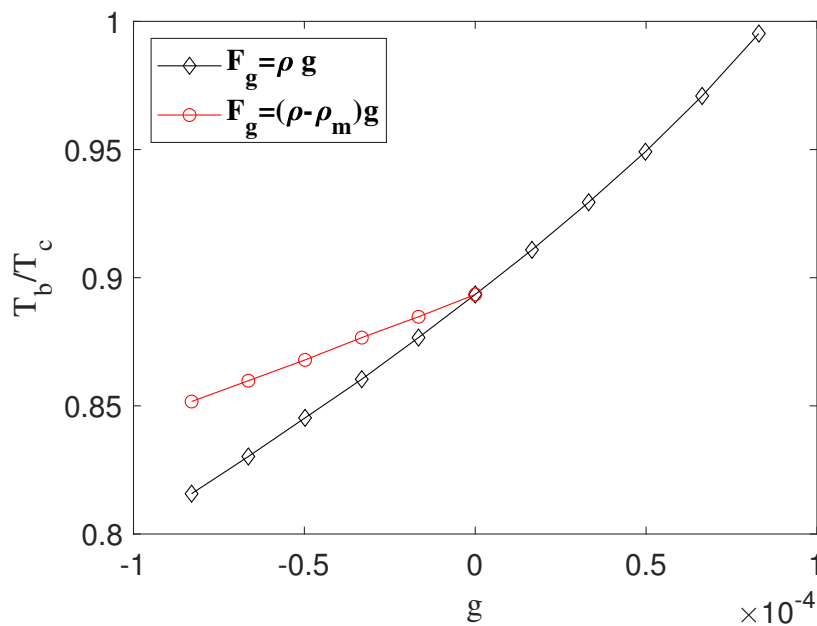
Fonte: Elaborado pelo autor.

Com esse conhecimento é possível analisar como o sistema do exemplo se encaixa nestas condições termodinâmicas. A temperatura da superfície inferior (ou superfície aquecida) é $T_{hot} = 0.8$. Na Figura 59 observa-se que o estado termodinâmico nesta superfície está muito distante da região de instabilidade para qualquer das duas formulações de gravidade. Desta forma, não será observada mudança de fase nesta localidade. Uma importante diferença entre as duas formulações de gravidade é observada na superfície superior em que $T_{cold} = 0.6$. O sistema com gravidade dada pela Equação (7.1) apresenta uma pequena variação da pressão na região do vapor. Devido a este comportamento, o estado do sistema se mantém distante da região de instabilidade. Entretanto, o sistema que usa a gravidade da Equação (7.2) apresenta uma variação muito mais significativa na região de vapor e o estado da parede superior está quase atingindo a região de instabilidade termodinâmica. Este exemplo mostra claramente como o uso de diferentes formulações para a gravidade podem drasticamente afetar os resultados das simulações e uma nova fase pode se formar num caso e no outro não.

Um parâmetro importante para a predição da formação de uma nova fase é a magnitude da aceleração gravitacional. Para um campo gravitacional mais intenso, a pressão na parede inferior será mais elevada e uma temperatura de ebulição mais alta será necessária para a formação de uma nova fase. Avaliou-se o impacto do campo gravitacional considerando um sistema com a seguinte configuração: $h_v = h_l = 80$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$. Testou-se diversas magnitudes para a aceleração gravitacional variando

entre -8.3×10^{-5} e $+8.3 \times 10^{-5}$. Então, calculou-se a temperatura da superfície inferior requerida para se observar a ebulição. Usando o exemplo anterior da Figura 59 para ilustrar este procedimento de cálculo, este seria o mesmo que encontrar os fluxos de calor que fazem o perfil de pressão cruzar a região de instabilidade termodinâmica para o líquido. Com o conhecimento do fluxo de calor, pode-se calcular as temperaturas das superfícies superior e inferior no equilíbrio.

Figura 60 – Temperatura de ebulição como uma função da aceleração da gravidade para um sistema com: $h_v = h_l = 80$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.



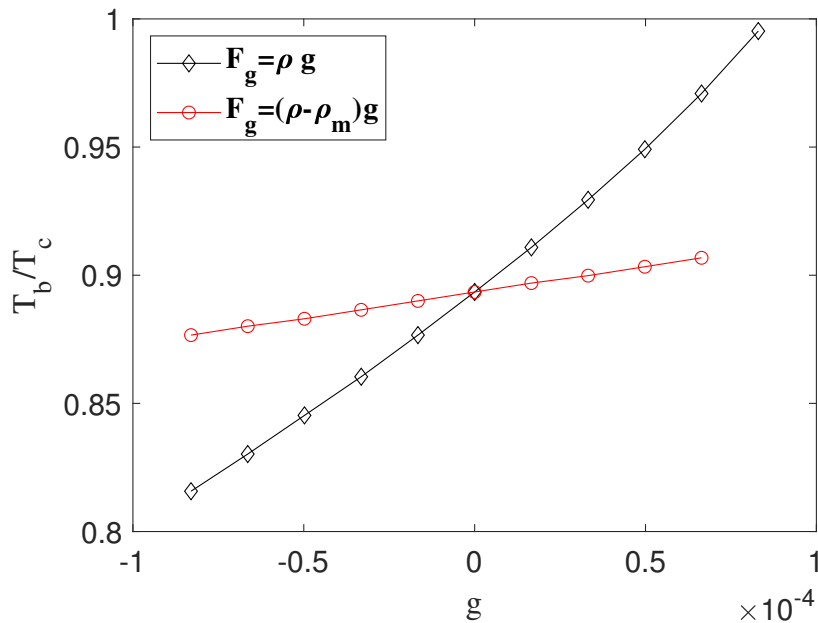
Fonte: Elaborado pelo autor.

A dependência da temperatura de ebulição com relação à aceleração gravitacional para as duas formulações de gravidade em análise são apresentadas na Figura 60. Para a segunda formulação não foram plotados os resultados com gravidade positiva. Para os pontos simulados com $g > 0$, não é possível observar a ebulição na parede inferior porque a condensação ocorre primeiro na parede superior. Já foi observado na Figura 59 que esta formulação de gravidade induz uma maior variação de pressão na região de vapor e o estado termodinâmico na fronteira superior está muito mais próximo da região de instabilidade para o vapor do que a fronteira inferior está com relação à região de instabilidade do líquido. Desta forma, se o fluxo de calor for continuamente aumentado, a condensação na fronteira superior seria observada antes de se atingir o ponto de ebulição. Este problema não foi observado para a primeira formulação da gravidade, pois a variação de pressão na região de vapor é muito pequena.

A ebulição pode ser observada para a segunda formulação através de uma redução

da altura da região de vapor. Como o fluxo de calor é constante ao longo do domínio no equilíbrio, com a redução da altura, a variação de temperatura na região do vapor é menor. Assim, a superfície superior não atingirá as baixas temperaturas requeridas para a condensação. Para ilustrar este fenômeno, testou-se um novo sistema com configuração: $h_v = 20$, $h_l = 80$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$. Os resultados são apresentados na Figura 61. Agora, observa-se que há uma faixa de valores positivos de aceleração gravitacional que permitem a ebulição ocorrer antes da condensação. Para os exemplos das Figuras 60 e 61 a temperatura de ebulição varia mais significativamente com a primeira formulação da gravidade. A razão para este comportamento está relacionada ao fato que a segunda formulação usa $(\rho - \langle \rho \rangle)$ ao invés de ρ , o que implica numa menor força de gravidade e uma menor variação de pressão na região do líquido. Isto faz com que a segunda formulação afete menos significativamente a temperatura de ebulição.

Figura 61 – Temperatura de ebulição como uma função da aceleração da gravidade para um sistema com: $h_v = 20$, $h_l = 80$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Observa-se que a primeira formulação da gravidade promoveu os mesmos resultados nas Figuras 60 e 61 porque utilizou-se o mesmo tamanho no domínio do líquido $h_l = 80$ e as mesmas magnitudes para aceleração gravitacional nos dois testes. Entretanto, a segunda formulação depende da densidade média no domínio, que é afetada pela mudança na altura do domínio de vapor $h_v = 80 \rightarrow h_v = 20$. Para pequenas quantidades de vapor no sistema, a densidade média se aproxima da densidade do líquido, o que implica numa menor variação de pressão ao longo do domínio de líquido. Assim, a temperatura de

ebulição é menos afetada pela mudança na gravidade.

Um último ponto diz respeito ao uso de gravidades negativas nestes exemplos. A ideia é avaliar uma condição semelhante ao que ocorre na cavitação. Neste fenômeno, algum mecanismo reduz a pressão do líquido no sistema. Esta redução de pressão é emulada por uma gravidade negativa. Então, são avaliadas diferentes temperaturas de mudança de fase com base nestas quedas de pressão do fluido. Para uma queda de pressão suficientemente grande, é possível obter uma mudança de fase de líquido para vapor sem o incremento da temperatura do fluido, o que corresponderia ao estado termodinâmico necessário para cavitação.

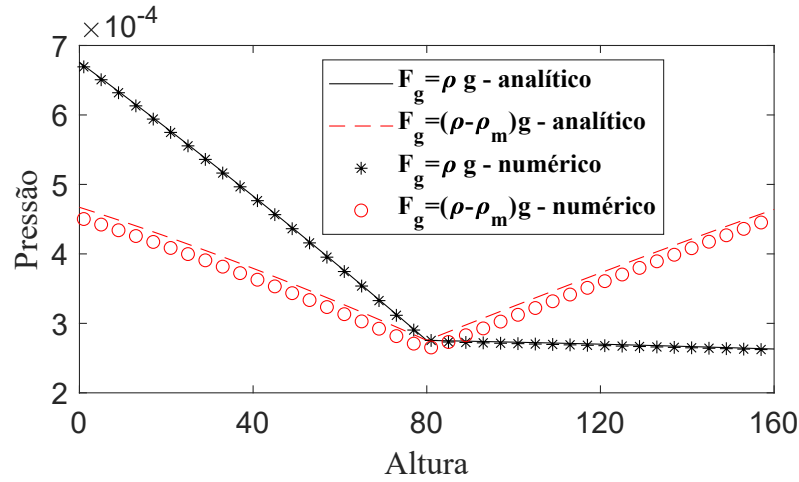
7.1.3 Validação da solução analítica com o MBR-P

O passo seguinte do estudo realizado foi a comparação entre os resultados da análise termodinâmica com as soluções numéricas obtidas com o MBR-P. Para esta comparação selecionou-se o mesmo exemplo apresentado na Figura 58. Utilizou-se da formulação do MBR-P proposta por Li, Luo e Li (2013), descrita ao longo da seção 2.3.5. A ECE segue o mesmo formato da Equação (2.90), com derivadas espaciais sendo discretizadas com os esquemas de diferenças finitas isotrópicos mostrados na Equação (2.93) e discretização no tempo de acordo com o método previsor-corretor apresentado na Equação (5.70). A comparação entre os perfis de pressão numéricos e analíticos pode ser consultada na Figura 62. Observa-se uma grande concordância entre os perfis no caso da formulação de gravidade da Equação (7.1). Para a formulação da Equação (7.2), os dois perfis ficaram muito próximos, mas com o resultado numérico ficando aproximadamente 4% abaixo do teórico. Considerou-se que a análise termodinâmica desenvolvida fornece uma boa previsão para os resultados numéricos obtidos com o MBR.

7.1.4 Avaliação da mudança de fase com o MBR-P

Anteriormente, estimou-se quais seriam as temperaturas de ebulição para diversos valores de aceleração gravitacional. Nesta subseção, realizou-se um teste para verificar se a análise teórica realizada é corroborada pelas simulações com o MBR-P. Selecionou-se o caso: $h_l = h_v = 80$, $T_i/T_c = 0.7$ e $g = 1.66 \times 10^{-5}$. Para a formulação 1 da gravidade, a temperatura de ebulição estimada é $T_b/T_c = 0.9109$. Como o fluxo de calor é constante no equilíbrio, a temperatura do vapor na superfície superior deve ser $T_{cold}/T_c = 0.4891$. A densidade média do sistema é $\rho_m = 0.1555$. Note-se que as soluções analíticas foram desenvolvidas para sistemas em equilíbrio. Neste caso, analisa-se um sistema em equilíbrio que está no limite de se tornar instável, em que qualquer perturbação originaria uma nova fase. Desta forma, a estratégia que será adotada aqui é conseguir simular um sistema que esteja próximo dessa condição limite, mas que ainda seja conhecidamente estável. Ou seja, num primeiro momento será simulado um sistema próximo ao estado desejado, mas ainda estável. Após isso, as condições de contorno serão alteradas para que este sistema

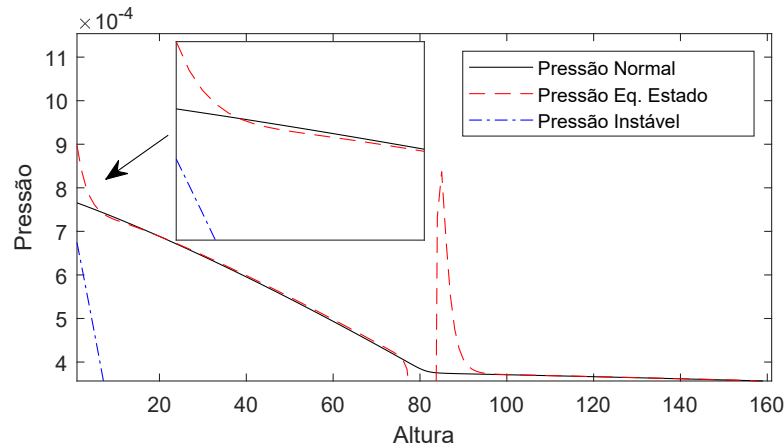
Figura 62 – Comparação entre os Perfis de pressão analítico e numérico para um exemplo com $h_v = h_l = 80$, $g = 1.5 \times 10^{-5}$, $q'/T_c = 2.5 \times 10^{-5}$, $T_i/T_c = 0.7$ e $k_v = k_l = 0.02$ com duas formulações de gravidade.



Fonte: Elaborado pelo autor.

se aproxime suavemente da condição desejada e assim poderá ser analisado se o sistema conseguirá atingir esta condição de maneira estável ou se uma nova fase será formada.

Figura 63 – Perfil de pressão para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9109$ e $T_{cold}/T_c = 0.5891$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

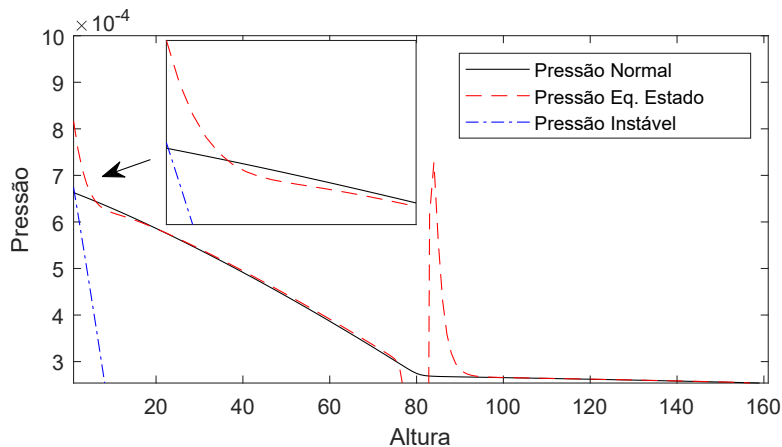
Inicialmente, é criado um sistema isotérmico, com duas fases em equilíbrio para uma temperatura $T_r = 0.7$. A localização da interface desse sistema é convenientemente escolhida para que a densidade média seja equivalente à calculada analiticamente. Este sistema é simulado até que o campo de pressões normais chegue num equilíbrio. Após isso, as condições de temperatura nas bordas são alteradas. Na borda inferior é imposta a temperatura de ebulição $T_b/T_c = 0.9109$. Na borda superior, ao invés de ser aplicada a temperatura $T_{cold}/T_c = 0.4891$, aplicou-se uma temperatura um pouco superior $T_{cold}/T_c =$

0.5891.

Como comentado, a solução analítica é um caso limite de estabilidade. Ao aplicar-se uma temperatura mais alta na borda superior, as temperaturas dentro do domínio serão mais elevadas em relação à solução analítica e, conseqüentemente, as pressões também serão mais elevadas. Esta pressão mais elevada garante que a fase líquida não entre em ebulição neste primeiro momento. Este sistema é então simulado até o equilíbrio. O perfil de densidade, pressão e temperatura obtido nesta simulação será utilizada como condição inicial para os testes de ebulição.

O perfil de pressão obtido com este procedimento é mostrado na Figura 63. A linha contínua preta representa a pressão normal do sistema que balanceia a força da gravidade. Pode-se observar que esta linha varia suavemente nas regiões *bulk* e também na interface, localizada próximo a altura $h = 80$. Já a linha tracejada vermelha representa a pressão dada pela equação de estado. Observa-se que esta sofre uma grande variação na região da interface. Na solução analítica desenvolvida, utilizou-se da aproximação que p_{EOS} seria aproximadamente igual à pressão normal *bulk*. Isto realmente acontece, com exceção da fronteira inferior, onde a interação entre o líquido e o sólido faz com que as duas curvas se diferenciem. Por fim, a linha traço-ponto azul representa a pressão em que a equação de estado é instável para a temperatura do fluido naquele ponto. Note-se que, como desejado, a pressão do sistema está próxima, mas acima desta condição de instabilidade, o que garante uma condição inicial estável para utilizar nos próximos testes.

Figura 64 – Perfil de pressão para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9109$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$.

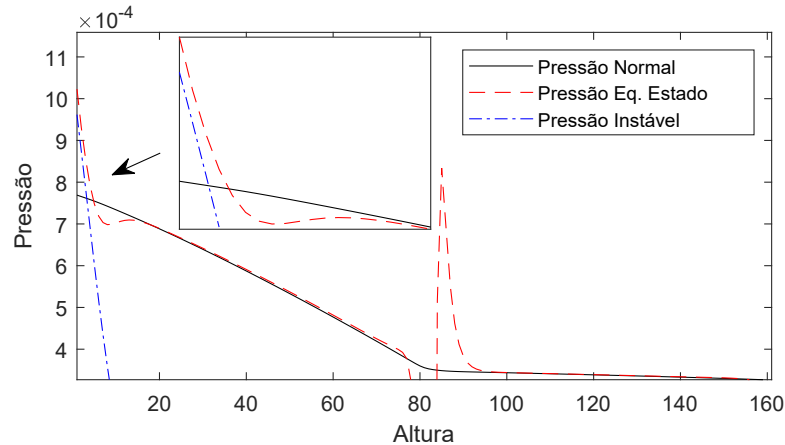


Fonte: Elaborado pelo autor.

Definida uma condição inicial estável, próxima a que se deseja simular de fato, pode-se agora alterar as condições de contorno para que o sistema evolua até o estado desejado. Isto é feito apenas alterando-se a temperatura da superfície superior para $T_{cold}/T_c = 0.4891$. Com isto, a pressão do sistema começa a se reduzir aos poucos enquanto o novo perfil

de temperatura vai se estabelecendo. Observou-se que o sistema conseguiu chegar a um novo estado de equilíbrio. O perfil de pressão neste caso é mostrado na Figura 64. Note-se que a pressão normal do sistema coincidiu com a linha de instabilidade termodinâmica na superfície inferior $h = 0$. Esta condição é exatamente a que foi prevista na solução analítica. Em outras palavras, a solução analítica foi desenvolvida justamente para fornecer as condições de contorno que fariam a pressão normal do sistema coincidir com a linha de instabilidade. Neste ponto, a simulação está em grande acordo com a solução analítica. Porém, não foi observada mudança de fase. Isto ocorreu porque na fronteira p_{EOS} se diferenciou da pressão normal devido à interação sólido-fluido. Assim, não atingiu-se na simulação o estado termodinâmico que representa na equação de estado um ponto de instabilidade.

Figura 65 – Perfil de pressão com $t = 2500$ para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9246$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$.

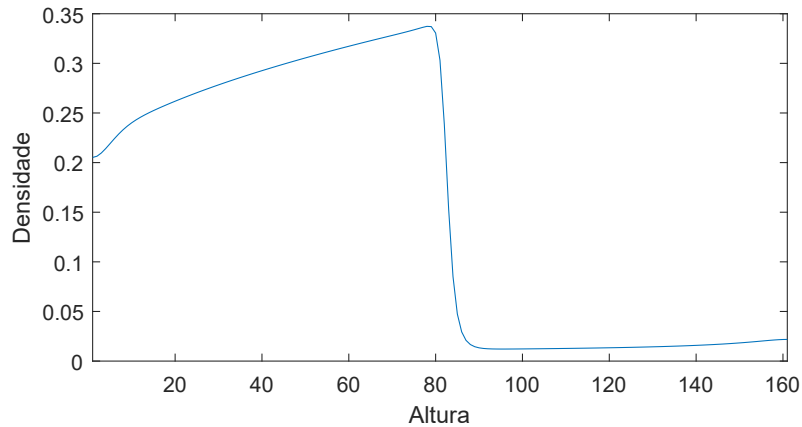


Fonte: Elaborado pelo autor.

De certa forma, esta diferença entre pressão normal e p_{EOS} faz sentido com o que ocorre na natureza. Sabe-se que, dependendo se a superfície for hidrofílica ou hidrofóbica, a ebulição pode ser prejudicada ou favorecida. Os resultados obtidos mostram que no MBR-P algo parecido também acontece. A seguir, realizou-se outra simulação, partindo-se novamente na solução da Figura 63 e impondo-se $T_{cold}/T_c = 0.4891$. Porém, agora, aumentou-se a temperatura na superfície inferior em 1.5%, ou seja, $T_b/T_c = 1.015 \times 0.9109$. O perfil de pressão dessa nova simulação com 2500 passos de tempo é apresentado na Figura 65. Observa-se que, com este pequeno aumento de temperatura, a linha de instabilidade termodinâmica cruza a linha de pressão normal. Porém ainda é inferior à p_{EOS} e, por isso, ainda não observou-se a formação de uma nova fase de vapor na superfície inferior como mostrado na Figura 66.

Estes últimos resultados são para os instantes iniciais da simulação. Ao longo do tempo, devido à redução da temperatura da superfície superior, a temperatura do

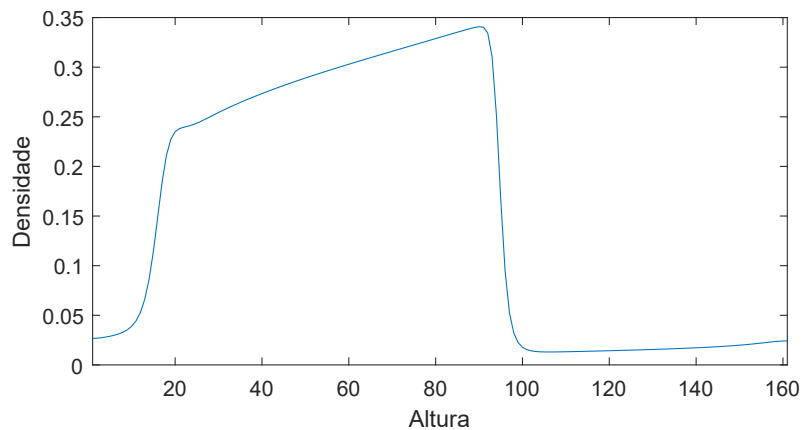
Figura 66 – Perfil de densidade com $t = 2500$ para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9246$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

fluido vai abaixando até atingir o equilíbrio. Como consequência, a pressão do sistema também se reduz e, eventualmente, a pressão dada pela equação de estado atinge a linha de estabilidade. Com 47500 passos de tempo, já se observa que uma nova fase se formou na superfície inferior como mostrado na Figura 66. Este teste mostrou que a solução analítica

Figura 67 – Perfil de densidade com $t = 47500$ para o teste com: $h_v = h_l = 80$, $g = 1.66 \times 10^{-5}$, $\rho_m = 0.1555$, $T_b/T_c = 0.9246$ e $T_{cold}/T_c = 0.4891$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

desenvolvida foi razoavelmente precisa. Foi necessário um ajuste de 1.5% na temperatura de ebulição para se obter uma mudança de fase na região do líquido. A diferença entre o resultado numérico e o analítico foi devido à interação sólido-fluido que não foi levada em consideração na análise termodinâmica realizada anteriormente. Também evidenciou-se que a equação de estado é fundamental para a mudança de fase no MBR-P. Apenas quando um determinado ponto do fluido atinge um estado de instabilidade termodinâmica, observa-se um processo de mudança de fase.

7.2 Simulações de escoamentos em canais com mudança de fase

Adicionalmente, foram realizadas algumas simulações de escoamento em canais com mudança de fase. Algumas dificuldades foram encontradas. As condições de contorno abertas para canais descritas na seção 4.5.8 foram testadas na literatura para escoamentos em que havia gotas de líquido num meio de vapor que escoava no interior do canal. Observou-se que, quando inverteu-se para escoamento de líquido com bolhas de vapor, as condições de contorno tornaram-se mais instáveis, limitando as velocidades de escoamento possíveis de serem simuladas. Outra dificuldade foi gerar a nucleação de bolhas a partir da parede aquecida com a presença do escoamento. Conseguiu-se gerar um pequeno núcleo de vapor nas simulações, mas este não apresentava um crescimento e posterior desprendimento. Estas dificuldades levaram a uma mudança de estratégia e motivaram o estudo mais fundamental de ebulição apresentado no começo deste capítulo. Com este estudo, observou-se a importância de se medir corretamente a pressão da simulação e se verificar se o estado do fluido está atingindo ou não uma região de instabilidade termodinâmica determinada pela equação de estado.

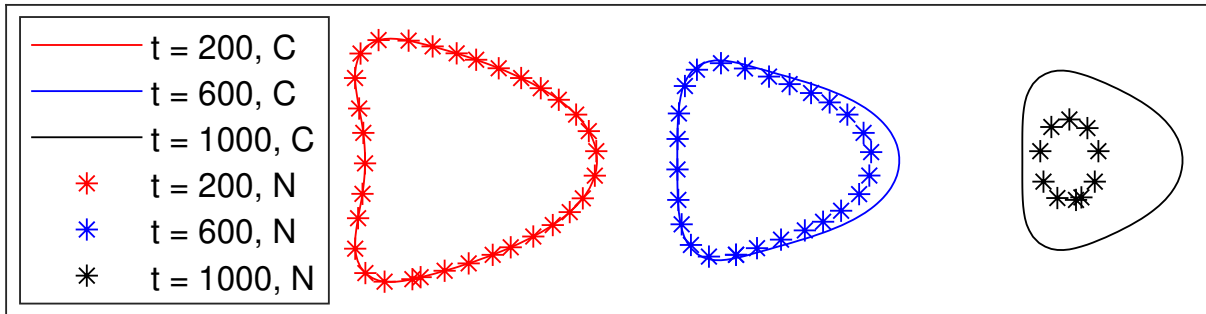
Embora este estudo de escoamento em canais não tenha sido concluído, será continuada a abordagem de se documentar todo o trabalho realizado que originou esta tese. Assim, será feita uma exposição com as simulações realizadas de escoamento em canais e alguns comentários sobre os resultados serão feitos. Espera-se que numa próxima etapa todo o conhecimento adquirido com o estudo fundamental de ebulição com o MBR-P seja aplicado ao estudo de canais e permita um grande avanço técnico neste tipo de simulação. As simulações expostas nesta subseção foram publicadas nos anais do congresso *International Congress of Mechanical Engineering 2021* com o título: “*Boundary conditions effects on the boiling heat transfer problem in channels using the lattice Boltzmann method*” (CZELUSNIAK *et al.*, 2021).

7.2.1 Escoamento de uma bolha sem transferência de calor

O primeiro teste realizado foi o escoamento de uma bolha de vapor num meio líquido escoando no interior de um canal bidimensional. A descrição detalhada da implementação desta simulação foi apresentada na seção 4.5.8. O canal possui dimensões $(L_x, L_y) = (200, 50)$ e o fluido foi inicializado a uma temperatura reduzida $T_r = 0.86$, que implica nas densidades de saturação pela regra de Maxwell: $\rho_v = 0.38$ e $\rho_l = 6.50$. A bolha é inicializada com uma geometria circular de raio $R = 20$ na posição $(L_{bx}, L_{by} = 50, 25)$. Um perfil de velocidades parabólico é inicializado em todo o domínio no instante inicial. O tempo de relaxação é definido como $\tau_v = 0.8$, o que resulta numa viscosidade cinemática $\nu = 0.1$. O número de Reynolds e Weber usados neste teste foram $Re = 80$ e $We = 97$. A temperatura foi mantida constante ao longo da simulação.

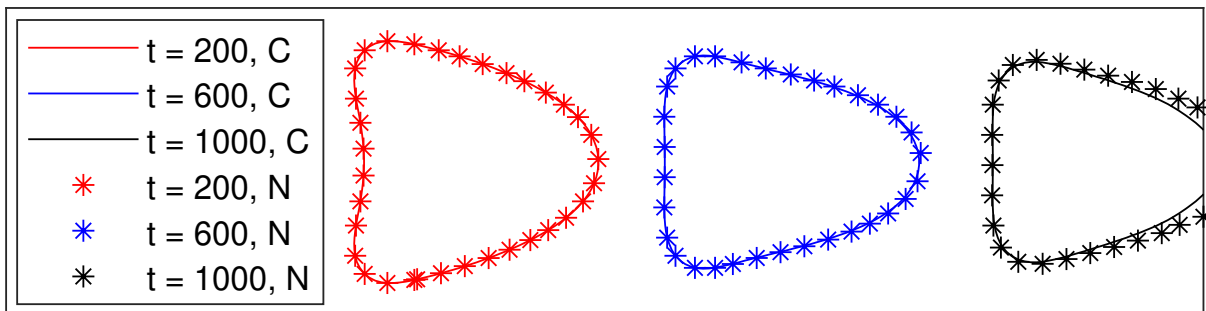
A posição da bolha em diferentes instantes de tempo são mostradas na Figura 68

Figura 68 – Escoamento de uma bolha em diferentes instantes de tempo. Os parâmetros de simulação são: $Re = 80$, $We = 97$ sem a adição da força $F_x = 8\rho\nu_l U_{max}/L_y^2$. A condição convectiva é representada por “C” e a de Neumann nula por “N”.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 69 – Escoamento de uma bolha em diferentes instantes de tempo. Os parâmetros de simulação são: $Re = 80$, $We = 97$ com a adição da força $F_x = 8\rho\nu_l U_{max}/L_y^2$. A condição convectiva é representada por “C” e a de Neumann nula por “N”.



Fonte: Elaborado pelo autor.

tanto para a condição convectiva quanto a de Neumann nula na saída. O tempo é dado em unidades de rede, porém podem ser adimensionalizados através da expressão $t^* = tU_{max}/L_y$, em que $U_{max} = \nu_l Re/L_y$. Nas duas simulações observou-se uma redução do tamanho da bolha ao longo da direção do escoamento. Para a condição de Neumann nula, a bolha desapareceu completamente antes de se chegar na fronteira de saída. Considerou-se que este problema ocorreu por erros de inicialização. Como o MBR é um método pseudo-compressível Krüger *et al.* (2017, p. 55), há uma dependência entre a pressão e a densidade. Assim, ao se inicializar uma densidade constante, não levou-se em consideração a queda de pressão ao longo do canal. Isto fez com que o fluido fosse desacelerado pelo cisalhamento enquanto um fluxo de massa de velocidade constante foi mantido na condição de entrada, acarretando na compressão da bolha.

Um procedimento simples que pode ser utilizado para evitar este problema é adicionar uma força na direção da coordenada x que balanceie a queda de pressão devido

a viscosidade do fluido. Desta forma, adicionou-se a força $F_x = 8\rho\nu_l U_{max}/L_y^2$ a qual é derivada da solução analítica de escoamento de Poiseuille entre duas placas paralelas infinitas. O resultado do escoamento da bolha com a adição desta força é apresentado na Figura 69. Neste caso, o problema da condensação da bolha foi evitado e as duas condições de contorno promoveram resultados muito similares.

7.2.2 Escoamento em canal com transferência de calor

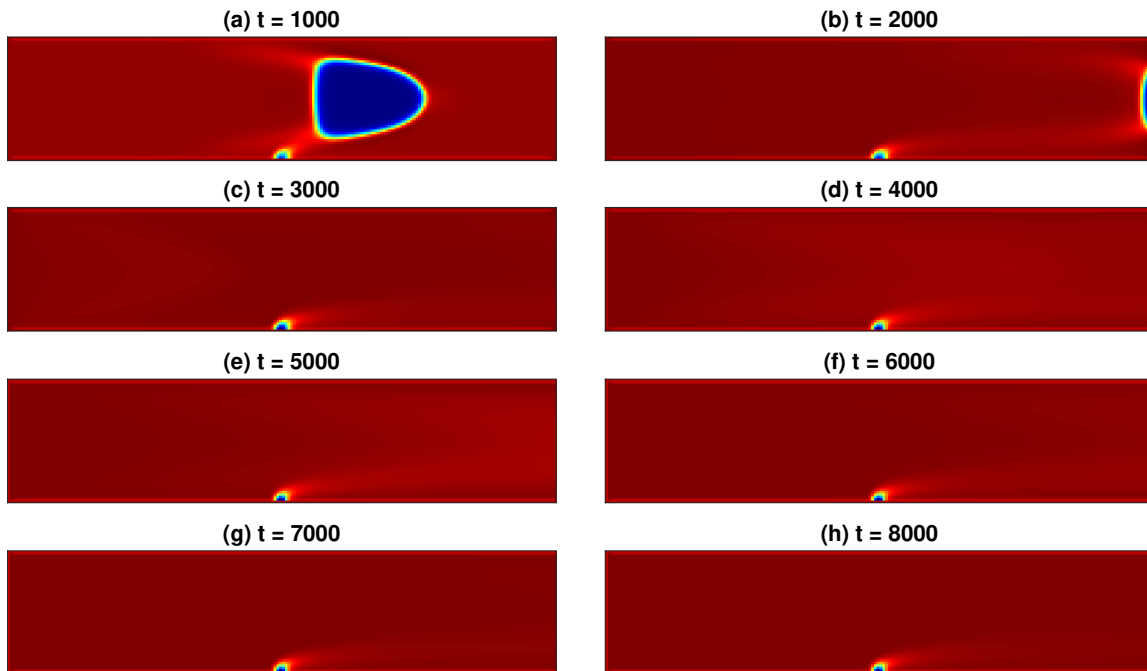
Nesta subseção testou-se como cada condição de contorno impacta na nucleação de uma bolha num escoamento em canal. Simulou-se um canal de mesma geometria do teste anterior. Porém agora considerou-se um aquecedor como mostrado na seção 4.5.8. Neste teste, inicializou-se uma bolha da mesma forma que no teste anterior. Isto foi realizado porque observou-se que a presença de uma fase vapor nos instantes iniciais da simulação ajuda na nucleação a partir da superfície aquecida. Um procedimento usado para nuclear bolhas de forma fisicamente consistente em um domínio completamente preenchido com líquido será investigado em trabalhos futuros.

Neste teste, focou-se em avaliar o efeito das condições de contorno nos resultados. O número de Reynolds foi reduzido para $Re = 50$ para favorecer a nucleação. O número de Weber também foi alterado para $We = 38$ devido à nova velocidade de escoamento. O ângulo de contato usado é $\theta = 90^\circ$. Os números de Péclet e Jacob usados foram $Pe = 83$ e $Ja = 0.42$. O campo de densidades para diferentes instantes de tempo usando a condição convectiva é mostrado na Figura 70. Pode-se observar que um pequeno núcleo de vapor é formado próximo ao aquecedor, porém este núcleo não cresceu nem se despreendeu da superfície.

Notou-se um problema com respeito à condição convectiva. Como a velocidade dos nós na parede são iguais a zero, a função de distribuição nos cantos da fronteira de saída não se alteram com o tempo. Isto ocorre pois, de acordo com a Equação (4.45), as funções são atualizadas conforme a velocidade local. Para testar se este fato pode ser significativo no escoamento, considerou-se na Equação (4.45) que as velocidades nos cantos são equivalentes às dos nós adjacentes: $u_x(N_x - 1, 1, t) = u(N_x - 1, 2, t)$ e $u_x(N_x - 1, N_y, t) = u(N_x - 1, N_y - 1, t)$. Os resultados desta modificação são mostrados na Figura 71. Neste caso, diferentemente dos resultados anteriores, o núcleo de vapor cresce e forma um filme que cobre toda a superfície inferior. Os resultados considerando a condição de Neumann são mostrados na Figura 72. Até o instante $t = 4000$, os resultados foram muito similares ao da condição convectiva. Porém, após este instante, as simulações se diferenciaram devido ao fato do filme líquido se desprender do núcleo inicial e então um novo filme começa a se formar.

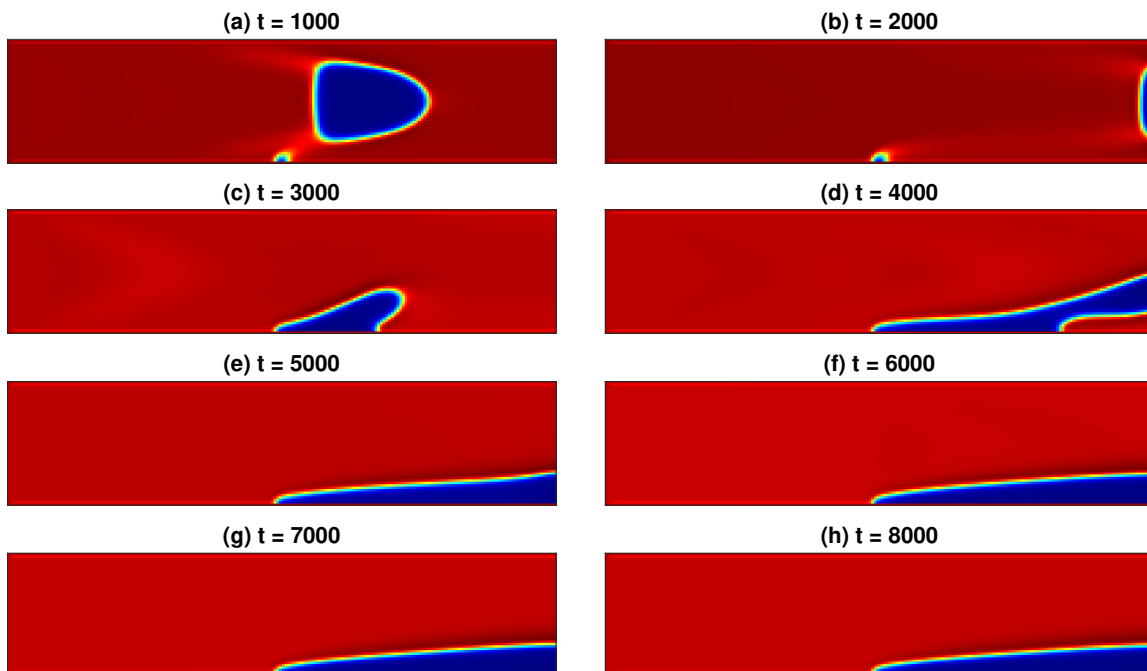
Nas próximas simulações alterou-se a molhabilidade da superfície para que se torne mais hidrofóbica através de uma mudança do parâmetro G^b para -1.5 na Equação (4.41).

Figura 70 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e ângulo de contato $\theta = 90^\circ$, com a condição convectiva.



Fonte: Elaborado pelo autor.

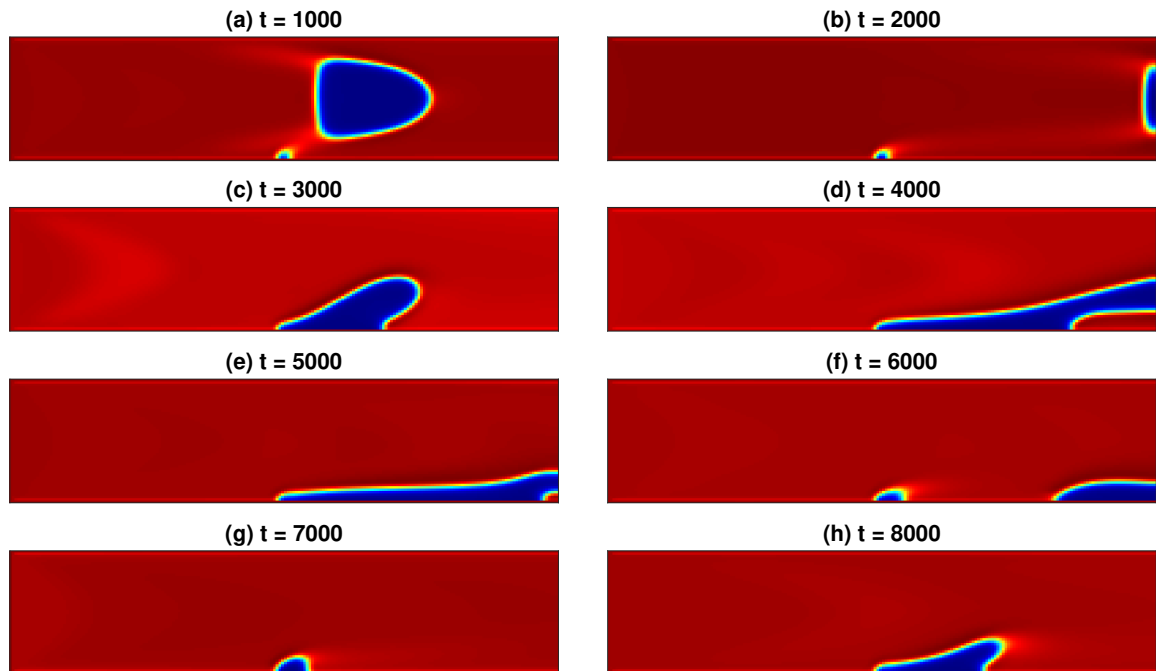
Figura 71 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e ângulo de contato $\theta = 90^\circ$, com a condição convectiva modificada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados considerando as condições convectiva e de Neumann são mostrados nas Figuras 73 e 74 respectivamente. Diferentemente dos resultados anteriores, em que um filme

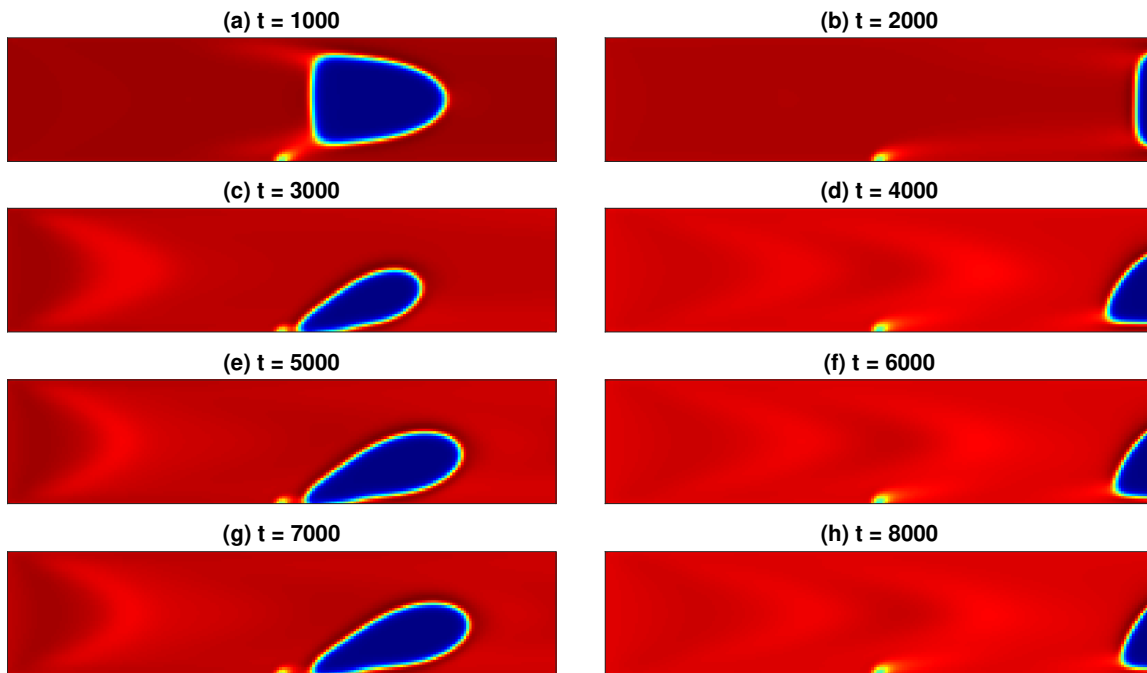
Figura 72 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e ângulo de contato $\theta = 90^\circ$, com a condição de Neumann nula.



Fonte: Elaborado pelo autor.

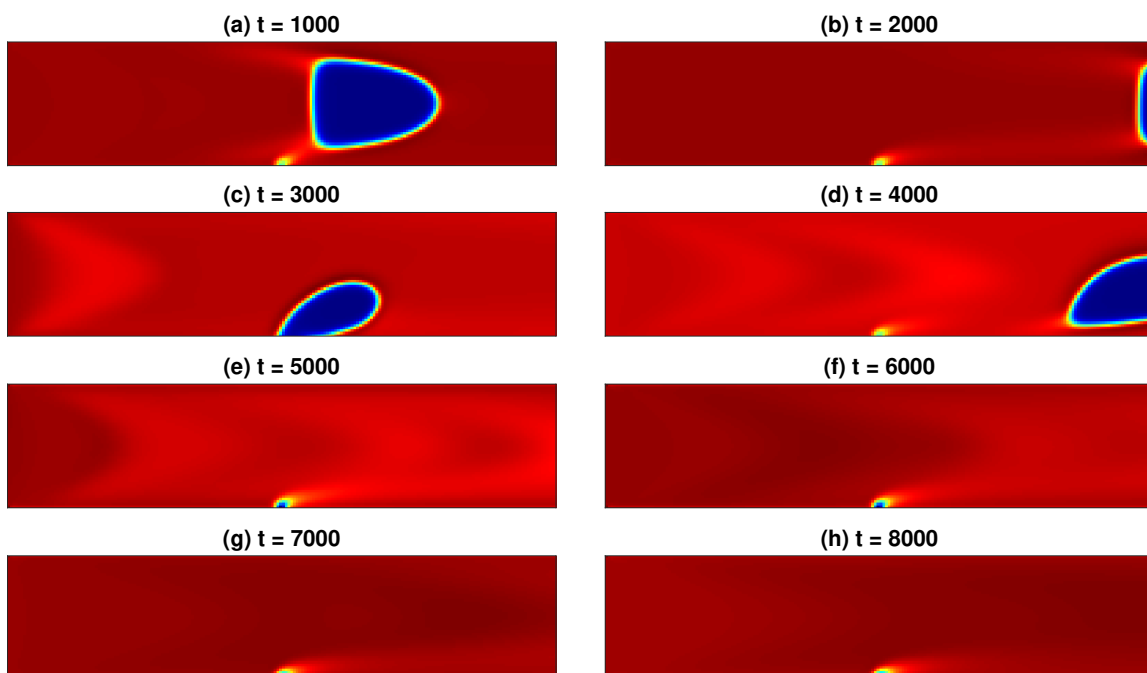
de vapor foi formado a partir do aquecedor, neste caso observa-se a formação de bolhas que se desprendem periodicamente da superfície aquecida. Aparentemente a nucleação de uma bolha é induzida pelas bolhas anteriores saindo do domínio. Isto pode estar relacionado ao fato de ser necessária uma bolha inicial para induzir o crescimento de uma nova a partir da superfície aquecida. Perturbações geradas no campo de pressão podem estar relacionadas a esse fenômeno. Entretanto, novas análises são necessárias para que se possa concluir as reais causas deste comportamento. Para a condição de Neumann, observa-se que ocorreu apenas um ciclo de crescimento de bolha.

Figura 73 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e superfície hidrofílica, com a condição convectiva modificada.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 74 – Simulação de ebulição convectiva em diferentes instantes de tempo com $Re = 50$ e superfície hidrofílica, com a condição de Neumann nula.



Fonte: Elaborado pelo autor.

8 CONCLUSÃO

Neste trabalho realizou-se três principais estudos com o intuito de: (i) avaliar e propor formas de discretização do MBR-P que permitam uma formulação mais concisa e eficiente do método, também verificou-se possíveis erros numéricos; (ii) estudar o papel da equação de estado no método e como ela pode ser utilizada para se corrigir erros numéricos e aumentar a estabilidade do método; (iii) realizar um estudo fundamental sobre ebulição utilizando o MBR-P, entendendo os mecanismos físicos que provocam a mudança de fase e também o efeito de diferentes formulações para força da gravidade.

No primeiro estudo, propôs-se dois mecanismos de discretização para o método do pseudopotencial. Uma é baseada na discretização da força de interação e introdução no MBR por meio de qualquer esquema de força conveniente, utilizando-se do esquema de Guo, Zheng e Shi (2002). A outra abordagem é baseada na discretização do tensor de pressão e criação de um termo fonte conveniente para introduzir esta pressão na MBR. Os principais resultados obtidos foram:

- A abordagem de força forneceu resultados muito satisfatórios em diversos testes multifásicos: teste de interface plana e gota estática, teste de gota oscilando e teste de gota colidindo contra uma parede.
- A abordagem de pressão proposta mostrou-se consistente quando utilizada para se substituir a equação de estado original do MBR. Testes de oscilação suave de um gás ideal foram utilizados para validação. O procedimento proposto mostrou-se mais preciso do que outras abordagens de pressão que eram utilizadas na literatura do método *free energy*, como os métodos de (SWIFT; OSBORN; YEOMANS, 1995) e (HOLDYCH *et al.*, 1998).
- Observou-se que a abordagem da pressão não se mostrou adequada para simulações multifásicos, o formato de gotas simuladas em testes estáticos variou com o tempo de relaxação.

Com relação ao estudo sobre equações de estado, propôs-se que uma possível modificação no *loop* de van der Waals da equação de Carnahan-Starling permite uma melhora nos resultados do método. Comparou-se o procedimento proposto com a equação original de Carnahan-Starling e também com o procedimento proposto por Peng *et al.* (2020). Chegou-se às seguintes conclusões:

- Tanto para a E-CS quanto para a equação proposta, os erros numéricos que impactam a densidade do vapor são reduzidos com o aumento da espessura da interface em

testes de interface plana. O procedimento proposto aumentou a acurácia com relação à E-CS original. Os erros do procedimento de Peng *et al.* (2020) foram muito baixos para todas as espessuras de interface, sendo o procedimento mais preciso neste tipo de teste.

- A equação proposta apresentou melhor desempenho com relação à consistência termodinâmica em testes com interfaces curvas. O método de Peng *et al.* (2020) apresentou grandes erros neste teste.
- A estabilidade da equação proposta foi próxima da E-CS original em testes dinâmicos. O procedimento de Peng *et al.* (2020) reduziu muito a estabilidade do MBR-P.

No estudo fundamental sobre ebulição, evidenciou-se o papel da equação de estado no processo de mudança de fase. Este processo só ocorre quando o estado termodinâmico do fluido é instável. Também ficou claro que diferentes formulações para a força de gravidade podem afetar esta dinâmica de mudança de fase, dependendo da magnitude da aceleração gravitacional. Descobriu-se também que a própria magnitude da aceleração em si pode influenciar nos resultados do método. É desejável a imposição de forças gravitacionais intensas, pois estas permitem reduzir o tempo de simulação em que ocorre o desprendimento e ascensão de uma bolha. Porém, impor forças elevadas pode afetar o campo de pressões na simulação que induzam ou impeçam a formação de uma nova fase (ebulição/condensação). Desta forma, é necessária a realização de uma análise termodinâmica para se avaliar a consistência dos parâmetros de simulação.

Além destes três principais estudos, apresentou-se outros resultados obtidos ao longo deste trabalho de doutorado. Foi desenvolvido um procedimento de diferenças finitas para replicar o resultados do MBR-P, com o intuito de testar erros de discretização no MBR-P a partir de uma solução de referência. Também realizou-se um pequeno estudo de ebulição em canais e observou-se uma forte influência das condições de contorno. Além disso, houve uma dificuldade para gerar espontaneamente ebulição no caso de um escoamento forçado. Neste contexto, o estudo termodinâmico fundamental de ebulição no MBR-P pode fornecer os conhecimentos necessários para se entender mais amplamente os fenômenos que estão ocorrendo nas simulações de canais.

8.1 Sugestões para trabalhos futuros

Com relação à discretização do MBR-P, ainda é necessário um estudo que compare a eficiência computacional entre a abordagem proposta neste trabalho e outras abordagens presentes na literatura para se descobrir qual delas é a mais eficiente. Com relação à abordagem da pressão, uma análise de terceira ordem das equações macroscópicas pode ser realizada para se descobrir quais são os erros de discretização que alteram o formato da gota com a mudança do tempo de relaxação.

Os próximos passos para o estudo fundamental de ebulição realizado neste trabalho seriam: (i) a realização de uma análise dimensional completa do problema de nucleação e (ii) a tentativa de simular um fluido real em condições físicas próximas a experimentos de laboratório. Neste contexto, seria de grande interesse uma comparação entre os mecanismos que induzem a nucleação no MBR-P com a física real do problema e verificar se os resultados fornecidos pelo método se aproximam da realidade.

REFERÊNCIAS

- AMAYA-BOWER, L.; LEE, T. Single bubble rising dynamics for moderate reynolds number using lattice boltzmann method. **Computers & Fluids**, Elsevier, v. 39, n. 7, p. 1191–1207, 2010.
- ANDERSON, D.; MCFADDEN, G. **A Di use-Interface Description of Fluid Systems**. Gaithersburg: Nist, 1996. v. 5887.
- ATKINSON, K. E. **An introduction to numerical analysis**. New York: John Wiley & Sons, 1989.
- AVEDISIAN, C. *et al.* Measuring bubble nucleation temperature on the surface of a rapidly heated thermal ink-jet heater immersed in a pool of water. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 455, n. 1991, p. 3875–3899, 1999.
- BEJAN, A. **Advanced Engineering Thermodynamics**. 4. ed. New York: John Wiley & Sons, 2016.
- BETTAIBI, S.; KUZNIK, F.; SEDIKI, E. Hybrid lbm-mrt model coupled with finite difference method for double-diffusive mixed convection in rectangular enclosure with insulated moving lid. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 444, p. 311–326, 2016.
- BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. **Physical review**, APS, v. 94, n. 3, p. 511, 1954.
- BUNNER, B.; TRYGGVASON, G. Dynamics of homogeneous bubbly flows part 1. rise velocity and microstructure of the bubbles. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 466, p. 17–52, 2002.
- CHANG, X. *et al.* Lattice boltzmann study of pool boiling heat transfer enhancement on structured surfaces. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 139, p. 588–599, 2019.
- CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. **The Mathematical Theory of Non-uniform Gases**. London: Cambridge University Press, 1952.
- CHEN, J. *et al.* Micro/nanoscale surface on enhancing the microchannel flow boiling performance: A lattice boltzmann simulation. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, p. 118036, 2022.
- CHEN, L. *et al.* A critical review of the pseudopotential multiphase lattice boltzmann model: Methods and applications. **International journal of heat and mass transfer**, Elsevier, v. 76, p. 210–236, 2014.
- CHENG, L. *et al.* New prediction methods for co2 evaporation inside tubes: Part i—a two phase flow pattern map and a flow pattern based phenomenological model for two-phase flow frictional pressure drops. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 51, n. 1-2, p. 111–124, 2008.

CHENG, L.; RIBATSKI, G.; THOME, J. R. Two-phase flow patterns and flow-pattern maps: fundamentals and applications. **Applied Mechanics Reviews**, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 61, n. 5, 2008.

CZELUSNIAK, L. E.; CABEZAS-GÓMEZ, L.; WAGNER, A. J. Numerical study of the pseudopotential lattice boltzmann method thermodynamic consistency for flat interfaces. *In*: ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENGENHARIA MECÂNICA. **Proceedings of the 18th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering**. [S.l.: s.n.]: ABCM, 2020.

CZELUSNIAK, L. E. *et al.* Boundary conditions effects on the boiling heat transfer problem in channels using the lattice boltzmann method. *In*: 26TH INTERNATIONAL CONGRESS OF MECHANICAL ENGINEERING. **Proceedings of the 26th International Congress of Mechanical Engineering**. [S.l.: s.n.], 2021.

CZELUSNIAK, L. E. *et al.* Shaping the equation of state to improve numerical accuracy and stability of the pseudopotential lattice boltzmann method. **Physical Review E**, APS, v. 105, n. 1, p. 015303, 2022.

CZELUSNIAK, L. E. *et al.* Force approach for the pseudopotential lattice boltzmann method. **Physical Review E**, APS, v. 102, n. 3, p. 033307, 2020.

DELLAR, P. J. Bulk and shear viscosities in lattice boltzmann equations. **Physical Review E**, APS, v. 64, n. 3, p. 031203, 2001.

ÇENGEL, Y. A. **Heat Transfer: A Practical Approach**. New York: McGraw-Hil, 2003.

ÇENGEL, Y. A.; BOLES, M. A. **Thermodynamics: An Engineering Approach—Fifth Edition**. [S.l.: s.n.]: McGraw-Hill USA, 2006.

FANG, W.-Z. *et al.* Lattice boltzmann modeling of pool boiling with large liquid-gas density ratio. **International journal of thermal sciences**, Elsevier, v. 114, p. 172–183, 2017.

FEI, L. *et al.* Mesoscopic simulation of three-dimensional pool boiling based on a phase-change cascaded lattice boltzmann method. **Physics of Fluids**, AIP Publishing LLC, v. 32, n. 10, p. 103312, 2020.

FENG, Y. *et al.* Investigation of pool boiling heat transfer on hydrophilic-hydrophobic mixed surface with micro-pillars using lbm. **International Journal of Thermal Sciences**, Elsevier, v. 163, p. 106814, 2021.

FIETZ, J. *et al.* Optimized hybrid parallel lattice boltzmann fluid flow simulations on complex geometries. *In*: SPRINGER. **European Conference on Parallel Processing**. [S.l.: s.n.], 2012. p. 818–829.

GOMBOSI, T. I. **Gaskinetic theory**. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.

GONG, S.; CHENG, P. A lattice boltzmann method for simulation of liquid–vapor phase-change heat transfer. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 55, n. 17-18, p. 4923–4927, 2012.

GONG, S.; CHENG, P. Numerical investigation of saturated flow boiling in microchannels by the lattice boltzmann method. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, Taylor & Francis, v. 65, n. 7, p. 644–661, 2014.

GONG, S.; CHENG, P. Lattice boltzmann simulations for surface wettability effects in saturated pool boiling heat transfer. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 85, p. 635–646, 2015.

GORBAN, A. N.; KARLIN, I. V. Beyond navier–stokes equations: capillarity of ideal gas. **Contemporary physics**, Taylor & Francis, v. 58, n. 1, p. 70–90, 2017.

GRZYBOWSKI, H.; MOSDORF, R. Modelling of pressure-drop instability in single and multi microchannels system. **acta mechanica et automatica**, v. 6, n. 3, p. 45–51, 2012.

GUICHET, V.; ALMAHMOUD, S.; JOUHARA, H. Nucleate pool boiling heat transfer in wickless heat pipes (two-phase closed thermosyphons): A critical review of correlations. **Thermal Science and Engineering Progress**, Elsevier, v. 13, p. 100384, 2019.

GUO, Z.; SHU, C. **Lattice Boltzmann method and its application in engineering**. Singapore: World Scientific, 2013. v. 3.

GUO, Z.; ZHENG, C.; SHI, B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. **Physical Review E**, v. 65, n. 4, p. 046308, 2002.

GUPTA, A.; KUMAR, R. Two-dimensional lattice boltzmann model for droplet impingement and breakup in low density ratio liquids. **Communications in Computational Physics**, Cambridge University Press, v. 10, n. 3, p. 767–784, 2011.

GUZELLA, M. d. S. **Simulação numérica da formação de bolhas em superfícies aquecidas utilizando o método de Lattice Boltzmann dos pseudopotenciais**. 2021. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, 2021.

HAZI, G.; MARKUS, A. On the bubble departure diameter and release frequency based on numerical simulation results. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 52, n. 5-6, p. 1472–1480, 2009.

HE, X.; CHEN, S.; ZHANG, R. A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh–taylor instability. **Journal of computational physics**, Elsevier, v. 152, n. 2, p. 642–663, 1999.

HE, X.; DOOLEN, G. D. Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice boltzmann models for multiphase flows. **Journal of Statistical Physics**, Springer, v. 107, n. 1, p. 309–328, 2002.

HOLDYCH, D. *et al.* An improved hydrodynamics formulation for multiphase flow lattice-boltzmann models. **International Journal of Modern Physics C**, World Scientific, v. 9, n. 08, p. 1393–1404, 1998.

HUANG, H.; SUKOP, M.; LU, X. **Multiphase lattice Boltzmann methods: Theory and application**. New York: John Wiley & Sons, 2015.

HUANG, J.; YIN, X.; KILLOUGH, J. Thermodynamic consistency of a pseudopotential lattice boltzmann fluid with interface curvature. **Physical Review E**, APS, v. 100, n. 5, p. 053304, 2019.

- INCROPERA, F. P. *et al.* **Fundamentos de Transferência de Calor e Massa**. Tradução: Eduardo M. Queiroz e Fernando L. P. Pessoa. 6. Rio de Janeiro: LTC, 2008.
- KAKAÇ, S.; BON, B. A review of two-phase flow dynamic instabilities in tube boiling systems. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 51, n. 3-4, p. 399–433, 2008.
- KANDLIKAR, S. G. High flux heat removal with microchannels—a roadmap of challenges and opportunities. **Heat Transfer Engineering**, Taylor & Francis, v. 26, n. 8, p. 5–14, 2005.
- KANDLIKAR, S. G. Scale effects on flow boiling heat transfer in microchannels: A fundamental perspective. **International Journal of Thermal Sciences**, Elsevier, v. 49, n. 7, p. 1073–1085, 2010.
- KARAYIANNIS, T.; MAHMOUD, M. Flow boiling in microchannels: Fundamentals and applications. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, v. 115, p. 1372–1397, 2017.
- KEW, P. A.; CORNWELL, K. Correlations for the prediction of boiling heat transfer in small-diameter channels. **Applied thermal engineering**, Elsevier, v. 17, n. 8-10, p. 705–715, 1997.
- KHARMIANI, S. F.; NIAZMAND, H.; PASSANDIDEH-FARD, M. An alternative high-density ratio pseudo-potential lattice boltzmann model with surface tension adjustment capability. **Journal of Statistical Physics**, Springer, v. 175, n. 1, p. 47–70, 2019.
- KOELMAN, J. A simple lattice boltzmann scheme for navier-stokes fluid flow. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 15, n. 6, p. 603, 1991.
- KORTEWEG, D. J. Sur la forme que prennent les équations du mouvements des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais connues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. **Archives Néerlandaises des Sciences exactes et naturelles**, v. 6, p. 1–24, 1901.
- KRAUSE, M. J.; GENGENBACH, T.; HEUVELINE, V. Hybrid parallel simulations of fluid flows in complex geometries: Application to the human lungs. *In*: SPRINGER. **European Conference on Parallel Processing**. Berlin/Heidelberg, 2010. p. 209–216.
- KREMER, G. M. **Uma Introdução à Equação de Boltzmann**. São Paulo: Edusp, 2005.
- KRÜGER, T. *et al.* **The Lattice Boltzmann Method**. Berlin: Springer, 2017.
- KUPERSHTOKH, A.; MEDVEDEV, D.; KARPOV, D. On equations of state in a lattice boltzmann method. **Computers & Mathematics with Applications**, Elsevier, v. 58, n. 5, p. 965–974, 2009.
- LAMB, H. Hydrodynamics, section 259. **Dover, New York**, v. 4, p. 18–42, 1932.
- LATT, J. **Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations**. 2007. Tese (Doutorado) — University of Geneva, 2007.

LATT, J. *et al.* Straight velocity boundaries in the lattice boltzmann method. **Physical Review E**, APS, v. 77, n. 5, p. 056703, 2008.

LEE, T.; LIN, C.-L. A stable discretization of the lattice boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 206, n. 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**, Elsevier, v. 85, p. 787–796, 2015.

LI, Q. *et al.* Lattice boltzmann modeling of self-propelled leidenfrost droplets on ratchet surfaces. **Soft Matter**, Royal Society of Chemistry, v. 12, n. 1, p. 302–312, 2016.

LI, Q.; LUO, K. Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice boltzmann modeling of multiphase flows. **Physical Review E**, APS, v. 88, n. 5, p. 053307, 2013.

LI, Q.; LUO, K. Thermodynamic consistency of the pseudopotential lattice boltzmann model for simulating liquid–vapor flows. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier, v. 72, n. 1, p. 56–61, 2014.

LI, Q. *et al.* Contact angles in the pseudopotential lattice boltzmann modeling of wetting. **Physical Review E**, APS, v. 90, n. 5, p. 053301, 2014.

LI, Q.; LUO, K.; LI, X. Lattice boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. **Physical Review E**, APS, v. 87, n. 5, p. 053301, 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. *et al.* Forcing scheme in pseudopotential lattice boltzmann model for multiphase flows. **Physical Review E**, APS, v. 86, n. 1, p. 016709, 2012.

LI, Q.; ZHOU, P.; YAN, H. Improved thermal lattice boltzmann model for simulation of liquid-vapor phase change. **Physical Review E**, APS, v. 96, n. 6, p. 063303, 2017.

LOU, Q.; GUO, Z.; SHI, B. Evaluation of outflow boundary conditions for two-phase lattice boltzmann equation. **Physical review E**, APS, v. 87, n. 6, p. 063301, 2013.

LULLI, M. *et al.* Mesoscale perspective on the tolman length. **Physical Review E**, APS, v. 105, n. 1, p. 015301, 2022.

LYCETT-BROWN, D.; LUO, K. H. Improved forcing scheme in pseudopotential lattice boltzmann methods for multiphase flow at arbitrarily high density ratios. **Physical Review E**, APS, v. 91, n. 2, p. 023305, 2015.

MAHMOUD, M.; KARAYIANNIS, T. Pool boiling review: Part i–fundamentals of boiling and relation to surface design. **Thermal Science and Engineering Progress**, Elsevier, v. 25, p. 101024, 2021.

MÁRKUS, A.; HÁZI, G. Simulation of evaporation by an extension of the pseudopotential lattice boltzmann method: A quantitative analysis. **Physical Review E**, APS, v. 83, n. 4, p. 046705, 2011.

MILLER, C.; SCRIVEN, L. The oscillations of a fluid droplet immersed in another fluid. **Journal of fluid mechanics**, Cambridge University Press, v. 32, n. 3, p. 417–435, 1968.

MU, Y.-T. *et al.* Nucleate boiling performance evaluation of cavities at mesoscale level. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 106, p. 708–719, 2017.

MUDAWAR, I. Two-phase microchannel heat sinks: theory, applications, and limitations. **Journal of Electronic Packaging**, v. 133, p. 041002:1–041002:31, 2011.

MUDAWAR, I. Recent advances in high-flux, two-phase thermal management. **Journal of Thermal Science and Engineering Applications**, American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, v. 5, n. 2, 2013.

MUDAWAR, I.; BOWERS, M. B. Ultra-high critical heat flux (chf) for subcooled water flow boiling—i: Chf data and parametric effects for small diameter tubes. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 42, n. 8, p. 1405–1428, 1999.

MUKHERJEE, A.; BASU, D. N.; MONDAL, P. K. Mesoscopic characterization of bubble dynamics in subcooled flow boiling following a pseudopotential-based approach. **International Journal of Multiphase Flow**, Elsevier, v. 148, p. 103923, 2022.

MUKHERJEE, S.; ABRAHAM, J. A pressure-evolution-based multi-relaxation-time high-density-ratio two-phase lattice-boltzmann model. **Computers & fluids**, Elsevier, v. 36, n. 6, p. 1149–1158, 2007.

NUKIYAMA, S. The maximum and minimum values of the heat q transmitted from metal to boiling water under atmospheric pressure. **J. JSME**, v. 37, p. 367–374, 1934.

PASIECZYNSKI, K.; CHEN, B. Multipseudopotential interaction models for thermal lattice boltzmann method simulations. **Physical Review E**, APS, v. 102, n. 1, p. 013311, 2020.

PENG, C. *et al.* Attainment of rigorous thermodynamic consistency and surface tension in single-component pseudopotential lattice boltzmann models via a customized equation of state. **Physical Review E**, APS, v. 101, n. 6, p. 063309, 2020.

PERUMAL, D. A.; DASS, A. K. A review on the development of lattice boltzmann computation of macro fluid flows and heat transfer. **Alexandria Engineering Journal**, Elsevier, v. 54, n. 4, p. 955–971, 2015.

PREMNATH, K. N.; ABRAHAM, J. Lattice boltzmann model for axisymmetric multiphase flows. **Physical Review E**, APS, v. 71, n. 5, p. 056706, 2005.

REVELLIN, R.; THOME, J. A new type of diabatic flow pattern map for boiling heat transfer in microchannels. **Journal of Micromechanics and Microengineering**, IOP Publishing, v. 17, n. 4, p. 788, 2007.

ROWLINSON, J. S.; WIDOM, B. **Molecular theory of capillarity**. Oxford: Clarendon Press, 1982.

SANKARANARAYANAN, K. *et al.* Bubble flow simulations with the lattice boltzmann method. **Chemical Engineering Science**, Elsevier, v. 54, n. 21, p. 4817–4823, 1999.

SBRAGAGLIA, M. *et al.* Generalized lattice boltzmann method with multirange pseudopotential. **Physical Review E**, APS, v. 75, n. 2, p. 026702, 2007.

SHAN, X.; CHEN, H. Lattice boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. **Physical Review E**, APS, v. 47, n. 3, p. 1815, 1993.

SHAN, X.; HE, X. Discretization of the velocity space in the solution of the boltzmann equation. **Physical Review Letters**, APS, v. 80, n. 1, p. 65, 1998.

SUCCI, S. **The lattice Boltzmann equation: for fluid dynamics and beyond**. Oxford: Oxford University Press, 2001.

SUN, T. *et al.* Numerical study of patterns and influencing factors on flow boiling in vertical tubes by thermal lbm simulation. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 86, p. 32–41, 2017.

SUN, T. *et al.* Effect of contact angle on flow boiling in vertical ducts: a pseudo-potential mrt-thermal lb coupled study. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 121, p. 1229–1233, 2018.

SWIFT, M. R. *et al.* Lattice boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. **Physical Review E**, APS, v. 54, n. 5, p. 5041, 1996.

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

TAKADA, N. *et al.* Numerical simulation of two-and three-dimensional two-phase fluid motion by lattice boltzmann method. **Computer Physics Communications**, Elsevier, v. 129, n. 1-3, p. 233–246, 2000.

TIBIRICA, C. B.; CZELUSNIAK, L. E.; RIBATSKI, G. Critical heat flux in a 0.38 mm microchannel and actions for suppression of flow boiling instabilities. **Experimental Thermal and Fluid Science**, Elsevier, v. 67, p. 48–56, 2015.

WAGNER, A. **Theory and applications of the lattice Boltzmann method**. 1997. Tese (Doutorado) — University of Oxford, 1997.

WAGNER, A. Thermodynamic consistency of liquid-gas lattice boltzmann simulations. **Physical Review E**, APS, v. 74, n. 5, p. 056703, 2006.

WANG, G.; CHENG, P. An experimental study of flow boiling instability in a single microchannel. **International communications in heat and mass transfer**, Elsevier, v. 35, n. 10, p. 1229–1234, 2008.

WANG, H.; LOU, Q.; LI, L. Mesoscale simulations of saturated flow boiling heat transfer in a horizontal microchannel. **Numerical Heat Transfer, Part A: Applications**, Taylor & Francis, v. 78, n. 4, p. 107–124, 2020.

WHITE, F. M. **Mecânica dos fluidos**. Tradução: José C. C. Amorin e Nelson M. Filho. 8. Porto Alegre: AMGH Editora Ltda, 2018.

YUAN, P.; SCHAEFER, L. Equations of state in a lattice boltzmann model. **Physics of Fluids**, AIP, v. 18, n. 4, p. 042101, 2006.

ZHANG, D.; PAPADIKIS, K.; GU, S. Three-dimensional multi-relaxation time lattice-boltzmann model for the drop impact on a dry surface at large density ratio. **International Journal of Multiphase Flow**, Elsevier, v. 64, p. 11–18, 2014.

ZHANG, R.; CHEN, H. Lattice boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows. **Physical Review E**, APS, v. 67, n. 6, p. 066711, 2003.

ZHOU, P.; LIU, W.; LIU, Z. Lattice boltzmann simulation of nucleate boiling in micro-pillar structured surface. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 131, p. 1–10, 2019.



EESC • USP