

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

Escola de Engenharia de São Carlos

# Método de Boltzmann em rede do pseudopotencial: estudo sobre suas extensões, aplicação e viabilidade para simulações vapor-líquido

Vinícius Pessoa Mapelli

Tese (Doutorado) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica  
Área de Concentração: Termociências e Mecânica de Fluidos

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

**Vinícius Pessoa Mapelli**

**Método de Boltzmann em rede do pseudopotencial:  
estudo sobre suas extensões, aplicação e viabilidade  
para simulações vapor-líquido**

**São Carlos**

**2023**



**Vinícius Pessoa Mapelli**

**Método de Boltzmann em rede do pseudopotencial:  
estudo sobre suas extensões, aplicação e viabilidade  
para simulações vapor-líquido**

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

Área de concentração: Termociências e Mecânica dos 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**  
**2023**

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).

M297m Mapelli, Vinícius Pessoa  
Método de Boltzmann em rede do pseudopotencial: estudo sobre suas extensões, aplicação e viabilidade para simulações vapor-líquido / Vinícius Pessoa Mapelli; orientador Luben Cabezas Gómez. São Carlos, 2023.

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, 2023.

1. Método de Boltzmann em rede. 2. Método dos pseudopotenciais. 3. Simulações vapor-líquido. I. Título.

## FOLHA DE JULGAMENTO

Candidato: Engenheiro **VINÍCIUS PESSÔA MAPELLI**.

Título da tese: "Método de Boltzmann em rede do pseudopotencial: estudo sobre suas extensões, aplicação e viabilidade para simulações vapor-líquido".

Data da defesa: 27/10/2023.

### Comissão Julgadora

### Resultado

**Prof. Associado Luben Cabezas Gómez**  
**(Orientador)**

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

APROVADO

**Prof. Associado Leandro Franco de Souza**

(Instituto de Ciências Matemática e de Computação/ICMC-USP)

APROVADO

**Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano**

(Universidade Federal de São Carlos/UFSCar)

APROVADO

**Prof. Dr. José Antônio da Silva**

(Universidade Federal de São João del Rei/UFSJ)

APROVADO

**Profa. Dra. Jocelaine Cargnelutti**

(Universidade Tecnológica Federal do Paraná/UTFPR)

APROVADO

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica:

Prof. Associado **Adriano Almeida Gonçalves Siqueira**

Presidente da Comissão de Pós-Graduação:

Prof. Titular **Carlos De Marqui Junior**



*Dedico esse trabalho à minha família,  
em especial meus pais e irmãos,  
sempre presentes. À minha esposa Izabela,  
pela paciência, apoio e companhia a todos os momentos.  
E à minha recém-nascida sobrinha e afilhada, Maria Luisa,  
tão pequena mas que nos trasborda os sentimentos  
e nos incentiva a seguir em frente.*





## AGRADECIMENTOS

Na vida, não caminhamos só. Sempre chegamos aos lugares por uma ajuda, uma influência, um conselho de alguém. Com o perdão se cometo alguma injustiça, trago meus agradecimentos a seguir.

Aos meus pais, Antônio e Sônia, alicerces primordiais da minha vida, que sempre incentivaram meus estudos e realizaram todos os esforços para que chegasse onde cheguei. Muito obrigado!

Aos meus irmãos, Victor e Mariana, meus primeiros amigos, companheiros para a vida, sempre serviram de exemplo, aconselharam, me cuidaram e tornaram a vida mais leve. Obrigado por tudo!

À minha esposa Izabela, meu grande amor, minha luz guia. Com toda certeza, não estaria onde e como estou sem sua companhia e sua alegria. Muito obrigado pelos momentos juntos de risada, conversas, pelos incentivos, compreensão e amor!

À Isabel e Osvaldo, meus segundos pais, sempre se preocuparam e cuidaram de mim. Com toda certeza, todos meus sucessos também são frutos dos seus exemplos de humildade, força, persistência e fé. Meus agradecimentos pelos ensinamentos e por todo apoio.

Aos meus queridos avós, Nelson, Iolanda, Maria, Protásio. Infelizmente, nenhum mais me acompanha na jornada da vida, mas seus esforços, as lembranças e os exemplos de vida me fizeram alcançar até aqui, e continuam a me inspirar.

Ao meu orientador Prof. Dr. Luben Cabezas Gómez, por ter me aceitado como seu aluno, por sempre ter me passado seus ensinamentos, por sempre ter sido compreensivo e paciente, e pelos seus conselhos. Obrigado!

Aos amigos do grupo de laboratório. Ao Luiz Czelusniak, um grande amigo de longa data, obrigado pelas discussões interessantes e por sempre compartilhar os pensamentos de sua mente brilhante. Ao Matheus Guzella, pelo companheirismo e por sempre estar disposto a uma conversa. Ao Alfredo Jaramillo, pela compreensão e por compartilhar seus ensinamentos sempre de forma paciente. Ao Ivan e Edilson, mesmo com pouco tempo de interação, sempre dispostos a me ajudar.

Ao Danilo e Francisco, amigos de longa data e sempre a postos para qualquer tipo de situação.

Ao Eduardo, pela hospitalidade, e ao João Pedro, coabitantes por muitos anos. Obrigado pela companhia, conversas, conselhos e risadas.

Ao Bruno, Danilo, Eduardo, Francisco, Guilherme, João Pedro, Luiz, Maurício, Thales,

Vágner, um seletto grupo de seguidores do conhecimento. Obrigado pela companhia e pelos exemplos de vida.

Aos professores Dr. Alexys Bruno Alfonso, Dr. Leonardo Kleber Castelano, Dr. José Antonio Rabi, pelas contribuições na banca examinadora de qualificação.

A todos os meus professores, que sempre serviram de exemplo para seguir nos estudos. Em especial, gostaria de agradecer ao Necésio, um dos meus primeiros professores de inglês, que realizou grandes esforços para me incentivar nos estudos.

À CAPES, à CNPq (processos 431782/2018-0, 305941/2020-8 e 140634/2019-3) e à FAPESP (processo 2016/09509-1 e 2018/09041-5), pelo apoio financeiro.

A todos que contribuíram de alguma forma para a realização desse trabalho.

## RESUMO

MAPELLI, V. P. **Método de Boltzmann em rede do pseudopotencial: estudo sobre suas extensões, aplicação e viabilidade para simulações vapor-líquido.** 2023. 201p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Neste trabalho, o foco principal é o uso do método de Boltzmann em rede (LBM) com o método do pseudopotencial para simulações bidimensionais vapor-líquido com e sem mudança de fase. Através de uma extensa revisão bibliográfica, nota-se grandes avanços no método, em quesitos como estabilidade, a consistência termodinâmica e controle de tensão superficial. No entanto, ainda existem pontos importantes que carecem discussões. Sendo assim, o objetivo do trabalho presente é, além de analisar e empregar técnicas da literatura do método do pseudopotencial, também contribuir, através de desenvolvimentos teóricos e numéricos, para melhor compreender pontos importantes ainda pouco discutidos como a convergência de resultados entre malhas. Por incluir um novo comportamento no tensor de pressão macroscópico através de uma força pseudopotencial, a estabilidade e convergência numérica do LBM precisam ter um equilíbrio de vários fatores e não somente aumentar o número de pontos. No trabalho presente, em um primeiro momento, investigou-se as diferentes técnicas de aprimoramento do método do pseudopotencial, realizando estudos teóricos e numéricos com simulações *benchmark*, a fim de formalizar um conjunto de ferramentas para prosseguir com as simulações de ebulição. Em seguida, com esse conjunto estabelecido, juntamente com o uso diferenças finitas para a evolução do campo de temperatura, uma metodologia de refinamento de malha é proposta e aplicada em problemas de referência e na ebulição em piscina bidimensional. Em seguida, o procedimento de refinamento foi confrontado com recentes proposições da literatura de conversão consistente entre as unidades de rede e unidades físicas. Com os resultados, foi possível observar um comportamento convergente entre as malhas para os problemas de referência. No entanto, o problema de Stefan e a ebulição bidimensional mostraram que essa convergência é afetada pela compressibilidade do fluido estudado, além de sofrer influências também do modelo de molhabilidade empregado. A metodologia de refinamento do trabalho presente é coerente com as proposições recentes da literatura de conversão de unidades físicas e de rede. Com os parâmetros comumente empregados na literatura, mostrou-se que a simulação de um sistema físico de tamanho razoável seria inviável, em tempo computacional necessário. Um estudo paramétrico mostra que seria possível reduzir consideravelmente uma simulação de um sistema físico real a ponto de torná-lo viável. No entanto, os limites foram testados teoricamente, sendo ainda necessário um estudo numérico mais profundos para comprovar a viabilidade do método em simulações de sistemas físicos reais.

**Palavras-chave:** Método de Boltzmann em rede. Método dos pseudopotenciais. Simulações vapor-líquido.



## ABSTRACT

MAPELLI, V. P. **Pseudopotential lattice Boltzmann method: a study about its extensions, applications and viability for vapor-liquid simulations.** 2023. 201p. Thesis (Doctor) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

In this work, main focus is the application of the lattice Boltzmann method (LBM) with pseudopotential method for two-dimensional vapor-liquid simulations with and without phase change. Through an extensive literature review, one may observe significant enhancements achieved in aspects such as stability, thermodynamic consistency, and surface tension control. However, there are still important matters that require discussions. Hence, the main goal of present work is, besides analyzing and employing pseudopotential method techniques from literature, to contribute through theoretical and numerical developments to better understand important matters yet not very well discussed such as the results convergence between distinct meshes. Due to the modification of the macroscopic pressure tensor through a pseudopotential force, numerical stability and convergence in LBM depend on an equilibrium between multiple factors, and it is not only a matter of increasing the number of points. In the present work, initially, we investigate different techniques to enhance the original pseudopotential method, conducting theoretical and numerical studies with benchmark simulations in order to formalize a set of tools to proceed with boiling simulations. Subsequently, with this set defined along with finite differences for the temporal evolution of the temperature field, a mesh refinement methodology is proposed and applied in reference problems and in two-dimensional pool boiling. Afterward, the refinement procedure consistency was checked against recent proposals from the literature regarding consistent conversion between lattice and physical units. The results have shown a convergent behavior among the meshes for reference problems. However, the Stefan problem and two-dimensional boiling showed that this convergence is affected by the fluid compressibility and also by the wettability model employed. The mesh refinement methodology of this work is consistent with recent propositions from the literature regarding conversion of physical and lattice units. With parameters commonly employed in the literature, it was shown that simulating a reasonably sized physical system would be computationally infeasible in terms of computational time. A parametric study indicates that it would be possible to significantly reduce simulation clock time of a real physical system, reducing it to a feasible time. However, the limits were only tested theoretically, and a more comprehensive numerical study is still necessary to verify the method's viability in simulations of real physical systems.

**Keywords:** Lattice Boltzmann method. Pseudopotential method. Vapor-liquid simulation.



## LISTA DE FIGURAS

|  |    |
|--|----|
| Figura 1 – Número de publicações das técnicas tradicionais de elementos, volumes e diferenças finitas em comparação ao método de Boltzmann em rede. . . . .  | 30 |
| Figura 2 – Número de publicações das técnicas tradicionais de elementos, volumes e diferenças finitas em comparação ao método de Boltzmann em rede, adicionando-se o termo <i>multiphase</i> (multifásico, em português) à busca. . .                                      | 31 |
| Figura 3 – Representação esquemática dos principais conjuntos de velocidades utilizados na literatura. . . . .   | 47 |
| Figura 4 – Curva de saturação dada pela regra de Maxwell, em comparação com pontos simulados pelo método de Shan-Chen original para diferentes valores de fator de relaxação, $\tau$ . . . . .   | 61 |
| Figura 5 – Curva de ebulição e representação dos regimes de ebulição observados pelo trabalho de Nukiyama (1934). . . . .  | 71 |
| Figura 6 – Campos de densidades observados no trabalho de Zhang e Chen (2003) demonstrando a capacidade do método híbrido para simular formação e dinâmica de bolhas. . . . .  | 73 |
| Figura 7 – Curva de ebulição para superfície hidrofóbica (A-B-C-D-E-F-G-H) e hidrofóbica (A'-B'-C'-D'-E'-F'-G'-H'). . . . .  | 75 |
| Figura 8 – Raio crítico de nucleação da bolha com a temperatura de superaquecimento utilizando (a) sistema convencional de conversão de unidades, (b) sistema de conversão proposto por Wang et al. (2022). . . . .  | 79 |
| Figura 9 – Representação esquemática da colisão e propagação das funções de distribuição $f_i$ . Embora apenas alguns nós são representados, as operações ocorrem para todos os pontos do domínio. . . . .   | 84 |
| Figura 10 – Representação esquemática da implementação de condição de contorno periódica. . . . .  | 86 |
| Figura 11 – Representação esquemática de uma parede superior coincidente com a direção horizontal das velocidades discretizadas. As populações desconhecidas são representadas por linhas tracejadas, e as conhecidas do passo de propagação, em linhas contínuas. . . . . | 86 |
| Figura 12 – Representação esquemática da quebra de uma estrutura <i>MultiBlockLattice</i> em diversos blocos, com adição de uma camada de células de envelope em cada um dos blocos particionados. . . . .   | 92 |
| Figura 13 – Representação gráfica da herança de alguma das classes <i>Dynamics</i> disponíveis na biblioteca Palabos. . . . .  | 93 |



|   |     |
|---|-----|
| Figura 14 – Comparação da performance computacional para uma gota colidindo sobre um filme líquido com os códigos próprios e a biblioteca Palabos, para um número variável de processos. . . . .  | 95  |
| Figura 15 – Representação esquemática do problema de interface plana. . . . .   | 103 |
| Figura 16 – Esquematização da simulação de gota estática. . . . .   | 104 |
| Figura 17 – Representação esquemática da simulação de uma gota sobre uma superfície. . . . .  | 105 |
| Figura 18 – Esquema do problema unidimensional de ebulição. . . . .   | 106 |
| Figura 19 – Esquematização das condições inicial e de contorno para o problema de ebulição em piscina. . . . .  | 107 |
| Figura 20 – Comparação entre a curva de saturação teórica, Eq. (3.29), representada por linhas contínuas, com os valores simulados, para diferentes esquemas de força e fatores de relaxação $\tau = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0$ . . . . .   | 110 |
| Figura 21 – (a) Valores do parâmetro $\Gamma$ para o fator de relaxação $\tau \in [0.5, 1.0]$ para cada um dos esquemas de forças estudados e (b) influência do parâmetro $\Gamma$ na curva de saturação (linhas tracejadas) em comparação com a curva dada pela regra de Maxwell (linha sólida). . . . . | 111 |
| Figura 22 – Comparação entre a curva de saturação empregando o método de Guo, Zheng e Shi (2002) e o modelo modificado de Li, Luo e Li (2013) (valores teóricos dados pelas linhas, e simulados, pelos marcadores) para o problema de interface plana. . . . .  | 113 |
| Figura 23 – Comparação dos perfis de densidade da solução analítica do problema da interface plana (linhas sólidas) e valores simulados (marcadores) para diferentes temperaturas reduzidas, utilizando o esquema de Li, Luo e Li (2013) com $\varepsilon = 1.76$ . . . . .                               | 115 |
| Figura 24 – Comparação entre os resultados simulados (marcadores) com as curvas teóricas (linhas sólidas) para os parâmetros de controle de tensão superficial $\kappa = 0, 0.5, 0.95$ e $0.99$ . . . . .   | 116 |
| Figura 25 – Relação da densidade de vapor, $\rho_g$ (a) e líquido, $\rho_l$ (b) com a alteração do parâmetro $1 - \kappa$ , para diferentes temperaturas reduzidas, para o problema de interface plana. . . . .   | 116 |
| Figura 26 – Comparação da variação da tensão superficial, $\sigma$ , com o parâmetro de controle, $1 - \kappa$ , esperado pela solução analítica (linhas tracejadas), e obtidos através da simulação (marcadores) para diferentes temperaturas reduzidas, para o problema de interface plana. . . . .     | 117 |
| Figura 27 – Comparação entre os resultados simulados para o problema de gota estática (marcadores) com as curvas teóricas do problema de interface plana (linhas sólidas) para os parâmetros de controle de tensão superficial $\kappa = 0, 0.5, 0.95$ e $0.99$ . . . . .                                 | 118 |

|  |     |
|--|-----|
| Figura 28 – Relação da densidade de vapor, $\rho_g$ (a) e líquido, $\rho_l$ (b) com a alteração do parâmetro $1 - \kappa$ , para diferentes temperaturas reduzidas, para o problema de gota estática. . . . .  | 119 |
| Figura 29 – Comparação da variação da tensão superficial, $\sigma$ , com o parâmetro de controle, $1 - \kappa$ , esperado pela solução analítica da interface plana (linhas tracejadas), e valores obtidos pela lei de Young-Laplace para o problema da gota estática (marcadores), submetidos a diferentes temperaturas. . . . .            | 120 |
| Figura 30 – Curvas de coexistência de interface plana para diferentes valores do parâmetro de Peng-Robinson $a$ , com $\varsigma = 0.103$ fixo (a) e ajustando o parâmetro $\varsigma$ para garantir consistência termodinâmica (b). . . . .   | 125 |
| Figura 31 – Perfil de densidade da interface plana para a EOS Peng-Robinson com parâmetro $a$ igual a $6.12 \times 10^{-2}$ , $2.72 \times 10^{-2}$ , $1,21 \times 10^{-2}$ e $5.37 \times 10^{-3}$ . . . . .  | 126 |
| Figura 32 – Evolução temporal do raio da gota, $r(t)$ , para quatro malhas distintas. . . . .  | 127 |
| Figura 33 – Posição da interface no tempo para problema de ebulição unidimensional para as diferentes malhas com: a) primeiro conjunto de parâmetros b) Segundo conjunto de parâmetros. . . . .  | 129 |
| Figura 34 – Valores de temperatura (preto, fileira superior), velocidade (preto, fileira inferior) e densidade (laranja) em diferentes instantes do tempo para o problema de ebulição unidimensional para diferentes malhas, utilizando: a) primeiro conjunto de parâmetros (Tab. 11), b) segundo conjunto de parâmetros (Tab. 11) . . . . . | 130 |
| Figura 35 – Ângulos de contato obtidos para o modelo de Benzi et al. (2006) para as temperaturas reduzidas de $T_r = 0.7126$ , $0.7604$ , e $0.86$ . . . . .   | 132 |
| Figura 36 – Ângulos de contato obtidos para o modelo de Li et al. (2014) para as temperaturas reduzidas de $T_r = 0.7126$ , $0.7604$ , e $0.86$ . . . . .  | 133 |
| Figura 37 – Ângulos de contato obtidos para o modelo de Ding e Spelt (2007) para as temperaturas reduzidas de $T_r = 0.7126$ , $0.7604$ , e $0.86$ . . . . .   | 134 |
| Figura 38 – Superfícies hidrofílicas (primeira coluna), neutra (segunda coluna) e hidrofóbica (terceira coluna) para temperatura reduzida $T_r = 0.86$ para os modelos de molhabilidade de Benzi et al. (2006), Li et al. (2014) e Ding e Spelt (2007). . . . .  | 135 |
| Figura 39 – Interfaces líquido-vapor estáticas resultantes para diferentes malhas. À esquerda, resultados obtidos com o modelo de Li et al. (2014) com $G_w = -0.8$ . À direita, resultados utilizando o modelo de Benzi et al. (2006) com $\rho_w = 1.7$ . . . . .  | 136 |
| Figura 40 – Campo de densidades obtidos para o problema de ebulição apenas alterando números de nós da malha, sem ajuste de parâmetros de refinamento. . . . .   | 138 |
| Figura 41 – Campo de densidades obtidos para o problema de ebulição, utilizando procedimento de refinamento proposto. . . . .  | 139 |

|  |     |
|--|-----|
| Figura 42 – Diferenças relativas no espaço para cada instante, calculadas de acordo com a Eq. (5.12) para o campo de densidade ao longo de três pares de refinamentos $(N, N^*) \in (160, 240), (240, 360), (360, 540)$ . $\rho_{wh}$ e $T_h$ denotam o parâmetro de ângulo de contato e a temperatura definida nas lattices do aquecedor, respectivamente. . . . .            | 140 |
| Figura 43 – Diferenças relativas no espaço para cada instante de tempo, calculadas de acordo com a Eq. (5.12) para o campo de temperatura ao longo de três pares de refinamentos $(N, N^*) \in (160, 240), (240, 360), (360, 540)$ . $\rho_{wh}$ e $T_h$ denotam o parâmetro de ângulo de contato e a temperatura definida nas lattices do aquecedor, respectivamente. . . . . | 141 |
| Figura 44 – Diferenças relativas globais para a ebulição em piscina de acordo com a Eq. (5.13) (lado esquerdo) e com as Eqs. (5.14)-(5.15) (lado direito). . . . .   | 143 |
| Figura 45 – Fluxos de calor calculados para quatro malhas diferentes considerando $T_h = 1.2$ . a) $\rho_{wh} = 0.38$ e b) $\rho_{wh} = 3.44$ . . . . .  | 144 |
| Figura 46 – Comprimento característico, utilizado na conversão de unidades físicas e de rede, em diferentes temperaturas reduzidas para água, fluido R134a, amônia e propano. . . . .  | 154 |
| Figura 47 – Comparação das curvas teóricas do método pseudopotencial com equação de estado de Peng-Robinson para valores do parâmetro $b$ entre 0.03 e 0.08. Em vermelho, a curva esperada para a equação de estado utilizando a regra de Maxwell. . . . .   | 156 |
| Figura 48 – Comparação das curvas teóricas do método pseudopotencial com equação de estado de Peng-Robinson para valores do parâmetro $a$ acima de 1. Em vermelho, a curva esperada para a equação de estado utilizando a regra de Maxwell. . . . .  | 157 |
| Figura 49 – Comparação das curvas teóricas do método pseudopotencial com equação de estado de Peng-Robinson para valores do parâmetro $a$ entre 0.01 e 0.04. Em vermelho, a curva esperada para a equação de estado utilizando a regra de Maxwell. . . . .   | 158 |
| Figura 50 – Resultados do teste de gota estática realizando redução da tensão superficial através do parâmetro $\kappa$ , proposto método de Li e Luo (2013). A tensão superficial de referência $\sigma_0 = 1.05$ é o valor observado para equação de estado de Peng-Robinson com parâmetros $a = 0.08, b = 0.03, R = 1$ . . . . .  | 160 |
| Figura 51 – Função peso $w(x)$ da família de polinômios de Hermite (a) e seus quatro primeiros polinômios (b)-(e), com suas respectivas ordens indicadas em seus títulos. . . . .  | 184 |
| Figura 52 – Comparação entre a função $f(x) = e^{-x^2}$ (em preto) e sua aproximação utilizando polinômios de Hermite até ordem 3 (em vermelho). . . . .   | 185 |

## LISTA DE TABELAS

|   |     |
|---|-----|
| Tabela 1 – Exemplos das principais operações entre escalares e tensores nas notações vetorial e indicial. . . . .   | 33  |
| Tabela 2 – Pesos $w_i$ , velocidades $\xi$ , suas respectivas direções e normas para os principais conjuntos de velocidades para problemas uni-, bi- e tridimensionais. . . . .   | 46  |
| Tabela 3 – Coeficientes de modificação de velocidade de equilíbrio $m$ , da velocidade da força $n$ , e coeficientes relacionados aos momentos de primeira ( $A$ ) e segunda ordem ( $B$ ) para os principais esquemas de forças da literatura. . . . .     | 51  |
| Tabela 4 – Conversão entre as unidades físicas e unidades de rede, descritas como um superscrito *. . . . .   | 51  |
| Tabela 5 – Levantamento realizado por Wang et al. (2022) sobre modelos utilizados para simulações de ebulição e representação das variáveis simuladas. . . . .  | 80  |
| Tabela 6 – Parâmetros $m$ , $n$ , $A$ , $B$ e $\gamma$ para os esquemas de força estudados. . . . .   | 98  |
| Tabela 7 – Especificações das máquinas utilizadas no trabalho presente. . . . .   | 108 |
| Tabela 8 – Especificações técnicas dos nós computacionais utilizados para simulações. . . . .   | 108 |
| Tabela 9 – Escalonamento dos campos ao variar o parâmetro de refinamento. . . . .   | 123 |
| Tabela 10 – Valores dos parâmetros, em unidades de rede, utilizados para o refinamento de malha do problema de vaporização. . . . .   | 127 |
| Tabela 11 – Diferença relativa entre as curvas da posição da interface $s(t)$ entre as malhas de $L = 320$ à $L = 2560$ nós. . . . .  | 129 |
| Tabela 12 – Variação relativa dos perfis de densidade para o modelo de ângulo de contato de Benzi et al. (2006). . . . .  | 136 |
| Tabela 13 – Valores de $G_w$ utilizados para manter o mesmo ângulo de contato em diferentes malhas. . . . .   | 136 |
| Tabela 14 – Valores do deslocamento temporal $\delta$ calculado com $t_{\text{ref}} = 5120$ entre as malhas pela equação Eq. (5.15) necessário para sincronizar as simulações da malha $N \times N$ com a malha mais refinada de $540 \times 540$ . . . . . | 142 |
| Tabela 15 – Escalonamentos possíveis do conjunto de parâmetros necessários para conversão entre unidades físicas e de rede, com constante específica do gás fixa, em unidades de rede. . . . .  | 152 |
| Tabela 16 – Comparação entre os valores utilizados para equação de estado de Peng-Robinson como referência (WANG et al., 2022) e os encontrados para minimizar o comprimento característico, $l_c^*$ , em unidades de rede. . . . .                         | 159 |
| Tabela 17 – Resumo dos números adimensionais representativos ao trabalho presente. . . . .  | 189 |
| Tabela 18 – Tempos de simulação para casos simulados de ebulição em piscina no Cluster Santos Dumont. . . . .   | 192 |

|  |     |
|--|-----|
| Tabela 19 – Tempos de simulação para casos simulados de evaporação de uma gota no Cluster Santos Dumont. . . . . | 193 |
| Tabela 20 – Tempos de simulação para casos simulados do problema de Stefan no Cluster Santos Dumont. . . . .     | 193 |

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

**BGK** Bhatnagar-Gross-Krook.

**CFD** *Computational Fluid Dynamics.*

**EDO** Equação diferencial ordinária.

**FDM** *Finite difference method.*

**FEM** *Finite element method.*

**FVM** *Finite volume method.*

**GPU** *Graphics processing unit.*

**IUPAC** União Internacional de Química Pura e Aplicada.

**LBM** *Lattice Boltzmann method.*

**LGCA** *Lattice-Gas Cellular Automata.*

**MPI** *Message Passage Interface.*

**MRT** *Multiple relaxation time.*

**TRT** *Two relaxation time.*



## LISTA DE SÍMBOLOS

### Latinos

|               |  |
|---------------|--|
| $a$           | Parâmetro de atração molecular da equação de estado              |
| $a^{(n)}$     | Coefficiente de expansão relacionado ao polinômio de ordem $n$   |
| $A$           | Coefficiente relacionado ao momento de ordem 1 do termo de força |
| $b$           | Parâmetro relacionado à dimensão molecular da equação de estado  |
| $b_l$         | Tamanho da base da região líquida                                |
| $B$           | Coefficiente relacionado ao momento de ordem 2 do termo de força |
| $c$           | Velocidade discreta de partícula                                 |
| $c_s$         | Velocidade do som no <i>lattice</i>                              |
| $c_v$         | Calor específico a volume constante                              |
| $C$           | Termo fonte para controle de tensão superficial                  |
| $D$           | Número de dimensões  |
| $e$           | Direção após colisão de partículas                               |
| $e$           | Energia interna específica                                       |
| $E$           | Erro numérico  |
| $E$           | Energia total específica   |
| $f$           | Função de distribuição de partículas                             |
| $F$           | Campo vetorial de força volumétrica                              |
| $F$           | Termo do esquema de força no método de Boltzmann                 |
| $\mathcal{F}$ | Representação de uma função genérica                             |
| $G$           | Intensidade da interação intermolecular                          |
| $g$           | Aceleração gravitacional   |
| $h_l$         | Altura da região líquida   |
| $Ja$          | Número de Jakob  |



|                     |   |
|---------------------|---|
| $h_{lg}$            | Entalpia de vaporização   |
| $\mathcal{H}^{(n)}$ | Polinômio de Hermite tensorial de ordem $n$                                       |
| $k$                 | Condutividade térmica   |
| $K$                 | Função <i>kernel</i> da força intermolecular                                      |
| $m$                 | Parâmetro de alteração na velocidade de equilíbrio                                |
| $\mathbf{m}$        | Função de partícula no espaço de momentos   |
| $\mathbf{M}$        | Matriz de transformação em espaço de momentos                                     |
| $\text{Ma}$         | Número de Mach  |
| $\text{MM}$         | Massa molar   |
| $n$                 | Parâmetro de alteração no esquema de força  |
| $\mathcal{O}$       | Ordem segundo notação O-grande  |
| $p$                 | Pressão termodinâmica   |
| $\mathbf{P}$        | Tensor de pressão   |
| $\dot{q}$           | Fluxo de calor  |
| $r$                 | Distância euclidiana  |
| $R$                 | Quociente entre constante universal dos gases e massa molecular específica do gás |
| $\mathbf{S}$        | Esquema de força no espaço de momentos  |
| $t$                 | Instante de tempo   |
| $\tau$              | Tolerância $\tau$ Período para verificação de variação numérica de um campo       |
| $T$                 | Temperatura   |
| $T_c$               | Temperatura crítica   |
| $T_r$               | Temperatura reduzida ( $\equiv T/T_c$ )   |
| $\mathbf{u}$        | Velocidade vetorial macroscópica  |
| $\mathbf{v}$        | Velocidade aleatória da partícula   |
| $v$                 | Volume específico   |

|       |   |
|-------|---|
| $w_i$ | Pesos da quadratura relacionados ao conjunto de velocidades |
| $W$   | Espessura de interface inicializada                         |
| $x$   | Coordenada espacial   |
| $z$   | Variável auxiliar para solução problema de interface plana  |

### **Gregos**

|               |  |
|---------------|--|
| $\alpha$      | Difusividade térmica   |
| $\delta$      | Deslocamento temporal de sincronização entre malhas            |
| $\gamma$      | Parâmetro relacionado ao esquema de força                      |
| $\Gamma$      | Parâmetro relacionado ao esquema de força e fator de relaxação |
| $\epsilon$    | Parâmetro de ordem de grandeza                                 |
| $\varepsilon$ | Parâmetro relacionado à curva de saturação                     |
| $\zeta$       | Parâmetro da curva característica                              |
| $\eta_B$      | Viscosidade volumétrica  |
| $\theta$      | Temperatura adimensional                                       |
| $\Theta$      | Campo escalar genérico   |
| $\kappa$      | Parâmetro de controle de tensão superficial                    |
| $\lambda$     | Fator de escala da quadratura                                  |
| $\Lambda$     | Matriz de relaxação  |
| $\mu$         | Viscosidade dinâmica   |
| $\nu$         | Viscosidade cinemática   |
| $\xi$         | Velocidade vetorial da partícula                               |
| $\rho$        | Densidade  |
| $\sigma$      | Tensor de tensões  |
| $\sigma$      | Tensão superficial   |
| $\varsigma$   | Parâmetro de controle de curva de saturação                    |
| $\tau$        | Fator de relaxação   |

|          |   |
|----------|---|
| $\psi$   | Função pseudopotencial ou massa específica                |
| $\Psi$   | Termo referente à dissipação viscosa e tensão superficial |
| $\omega$ | Frequência de relaxação                                   |
| $\Omega$ | Operador de colisão                                       |

### Subscritos

|                          |   |
|--------------------------|---|
| $c$                      | Referente ao ponto crítico da substância                          |
| $g$                      | Referente à fase gasosa ou vapor                                  |
| $i$                      | Componente $i$ da discretização no espaço de velocidades          |
| $l$                      | Referente à fase líquida  |
| $u$                      | Universal   |
| $\alpha\beta\dots\omega$ | Notação indicial relacionada às coordenadas do espaço euclidiando |

### Sobrescritos

|     |  |
|-----|--|
| ads | Relacionada à adesão entre fluido-sólido                 |
| CS  | Carnahan-Starling  |
| eq  | Referente ao valor de equilíbrio                         |
| EOS | <i>Equation of state</i> , referente à equação de estado |
| Guo | Referente ao trabalho de Guo, Zheng e Shi (2002)         |
| int | Referente à interação intermolecular                     |
| Li  | Referente ao trabalho de Li, Luo e Li (2012)             |
| neq | Referente ao valor de não-equilíbrio                     |
| sat | Referente ao valor de saturação                          |
| SC  | Referente à proposição de Shan-Chen                      |
| vdW | van der Waals  |

## SUMÁRIO

|            |   |           |
|------------|---|-----------|
| <b>1</b>   | <b>INTRODUÇÃO</b>   | <b>29</b> |
| <b>1.1</b> | <b>Notação</b>  | <b>32</b> |
| <b>1.2</b> | <b>Organização do texto</b>                               | <b>33</b> |
| <b>1.3</b> | <b>Objetivos</b>  | <b>34</b> |
| <b>2</b>   | <b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>                              | <b>35</b> |
| <b>2.1</b> | <b>Teoria Cinética dos Gases</b>                          | <b>35</b> |
| 2.1.1      | Função de Distribuição                                    | 36        |
| 2.1.2      | Equação de Boltzmann                                      | 37        |
| 2.1.3      | Função de Equilíbrio                                      | 37        |
| 2.1.4      | Propriedades do operador de colisão                       | 38        |
| 2.1.5      | Comportamento macroscópico da equação de Boltzmann        | 39        |
| <b>2.2</b> | <b>O método de Boltzmann em rede</b>                      | <b>41</b> |
| 2.2.1      | Breve histórico   | 41        |
| 2.2.2      | Discretização no espaço de velocidades                    | 43        |
| 2.2.3      | Conjuntos de velocidades                                  | 45        |
| 2.2.4      | Discretização no espaço-tempo                             | 47        |
| 2.2.5      | Inclusão dos termos de forças externas                    | 48        |
| 2.2.6      | Unidades de rede  | 50        |
| 2.2.7      | Comportamento macroscópico do método de Boltzmann em rede | 52        |
| 2.2.7.1    | Operador BGK  | 55        |
| 2.2.8      | Operador de múltiplos tempos de relaxação                 | 56        |
| 2.2.9      | Erros de discretização                                    | 57        |
| <b>2.3</b> | <b>Método do pseudopotencial</b>                          | <b>58</b> |
| 2.3.1      | Formulação original do método do pseudopotencial          | 59        |
| 2.3.2      | Modificações e extensões                                  | 61        |
| 2.3.2.1    | Razões de densidades                                      | 61        |
| 2.3.2.2    | Desacoplamento da curva de saturação e fator de relaxação | 63        |
| 2.3.2.3    | Correntes espúrias  | 64        |
| 2.3.3      | Conservação de energia                                    | 66        |
| <b>2.4</b> | <b>Ebulição em piscina</b>                                | <b>69</b> |
| 2.4.1      | Breve resumo sobre conceitos de ebulição em piscina       | 69        |
| 2.4.2      | Trabalhos da literatura com método pseudopotencial        | 72        |
| 2.4.3      | Comentários finais  | 79        |
| <b>3</b>   | <b>METODOLOGIA</b>  | <b>83</b> |

|            |   |            |
|------------|---|------------|
| <b>3.1</b> | <b>Implementação do método de Boltzmann em rede</b>         | <b>83</b>  |
| <b>3.2</b> | <b>Inicialização</b>  | <b>84</b>  |
| <b>3.3</b> | <b>Condições de contorno</b>                                | <b>85</b>  |
| 3.3.1      | Condições periódicas  | 85         |
| 3.3.2      | Condições de parede   | 85         |
| 3.3.3      | Molhabilidade da superfície                                 | 88         |
| <b>3.4</b> | <b>Algoritmo</b>  | <b>89</b>  |
| <b>3.5</b> | <b>Palabos</b>  | <b>90</b>  |
| 3.5.1      | Ideia central   | 91         |
| 3.5.2      | Estrutura de dados  | 91         |
| 3.5.3      | Extensibilidade dos modelos implementados                   | 92         |
| <b>3.6</b> | <b>Códigos próprios</b>                                     | <b>94</b>  |
| <b>3.7</b> | <b>Métodos empregados</b>                                   | <b>96</b>  |
| 3.7.1      | Influência do esquema de força na curva de saturação        | 96         |
| 3.7.2      | Controle da curva de saturação                              | 98         |
| 3.7.3      | Controle da tensão superficial                              | 100        |
| 3.7.4      | Modelo térmico  | 101        |
| <b>3.8</b> | <b>Casos numéricos</b>                                      | <b>102</b> |
| 3.8.1      | Interface plana   | 102        |
| 3.8.2      | Gota estática   | 103        |
| 3.8.3      | Gota sobre uma superfície                                   | 104        |
| 3.8.4      | Vaporização de uma gota                                     | 105        |
| 3.8.5      | Problema de ebulição unidimensional                         | 106        |
| 3.8.6      | Ebulição em piscina   | 107        |
| <b>3.9</b> | <b>Equipamentos utilizados</b>                              | <b>107</b> |
| <b>4</b>   | <b>RESULTADOS: VALIDAÇÕES DO MÉTODO DO PSEUDOPOTENCIAL</b>  | <b>109</b> |
| <b>4.1</b> | <b>Influência do esquema de força na curva de saturação</b> | <b>109</b> |
| <b>4.2</b> | <b>Controle da curva de saturação</b>                       | <b>113</b> |
| <b>4.3</b> | <b>Controle da tensão superficial</b>                       | <b>115</b> |
| 4.3.1      | Interface plana   | 115        |
| 4.3.2      | Gota estática   | 117        |
| <b>5</b>   | <b>RESULTADOS: REFINAMENTO DE MALHA</b>                     | <b>121</b> |
| <b>5.1</b> | <b>Método de refinamento</b>                                | <b>121</b> |
| 5.1.1      | Exemplo de escalonamento dos parâmetros                     | 124        |
| <b>5.2</b> | <b>Casos testes</b>   | <b>126</b> |
| 5.2.1      | Vaporização de uma gota                                     | 126        |
| 5.2.2      | Ebulição unidimensional                                     | 128        |
| <b>5.3</b> | <b>Ebulição em piscina</b>                                  | <b>131</b> |

|            |   |            |
|------------|---|------------|
| 5.3.1      | Modelos de molhabilidade de superfícies . . . . .   | 131        |
| 5.3.1.1    | Validação dos modelos . . . . .   | 132        |
| 5.3.1.2    | Refinamento de malhas e modelos de molhabilidade . . . . .  | 134        |
| 5.3.2      | Ebulição em piscina . . . . .   | 135        |
| 5.3.3      | Comparação de comportamento da simulação com e sem procedi-<br>mento de refinamento . . . . .   | 137        |
| 5.3.3.1    | Diferenças de tempo e espaço entre malhas . . . . .   | 138        |
| 5.3.4      | Deslocamento no tempo das simulações . . . . .  | 140        |
| <b>6</b>   | <b>RESULTADOS: CONVERSÃO UNIDADES FÍSICAS E DE REDE . .</b>   | <b>145</b> |
| <b>6.1</b> | <b>Conversão entre unidades de rede e físicas . . . . .</b>   | <b>145</b> |
| 6.1.1      | Exemplo de inconsistência . . . . .   | 146        |
| 6.1.2      | Proposta de conversão de Wang et al. (2022) . . . . .   | 148        |
| <b>6.2</b> | <b>Conversão de unidades de Wang et al. (2022) e método de refina-<br/>mento de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022) . . . . .</b> | <b>149</b> |
| <b>6.3</b> | <b>Métodos de refinamento . . . . .</b>   | <b>151</b> |
| <b>6.4</b> | <b>Comprimento característico para conversão de unidades . . . . .</b>  | <b>152</b> |
| <b>6.5</b> | <b>Limitações do método pseudopotencial . . . . .</b>   | <b>154</b> |
| 6.5.1      | Parâmetros da equação de estado . . . . .   | 155        |
| 6.5.2      | Redução da tensão superficial . . . . .   | 157        |
| <b>6.6</b> | <b>Considerações finais . . . . .</b>   | <b>160</b> |
| <b>7</b>   | <b>CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS . . . . .</b>   | <b>163</b> |
| <b>7.1</b> | <b>Sugestões para trabalhos futuros . . . . .</b>   | <b>165</b> |
|            | <b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>  | <b>167</b> |
|            | <b>APÊNDICES . . . . .</b>  | <b>179</b> |
|            | <b>APÊNDICE A – POLINÔMIOS DE HERMITE . . . . .</b>   | <b>181</b> |
| <b>A.1</b> | <b>Exemplo unidimensional . . . . .</b>   | <b>182</b> |
|            | <b>APÊNDICE B – DEFINIÇÃO DAS MATRIZES DO OPERADOR DE<br/>COLISÃO MRT . . . . .</b>   | <b>187</b> |
|            | <b>APÊNDICE C – NÚMEROS ADIMENSIONAIS . . . . .</b>   | <b>189</b> |
|            | <b>APÊNDICE D – TEMPOS DE SIMULAÇÃO . . . . .</b>   | <b>191</b> |

|   |            |
|---|------------|
| <b>ANEXOS</b>   | <b>195</b> |
| <b>ANEXO A – TRABALHOS ORIGINADOS DA PESQUISA . . . . .</b> | <b>197</b> |

## 1 INTRODUÇÃO

Fenômenos multifásicos são caracterizados pela presença de uma ou mais fases identificáveis, separadas entre si por uma interface. Cada uma dessas fases pode corresponder a uma mesma substância em diferentes estados da matéria, como por exemplo, água líquida e vapor, ou componentes distintos, como água e óleo, ou água e ar atmosférico. Assim, fenômenos cotidianos, como neblina, água fervente, nuvens, tempestade de areia, entre outros podem ser citados como exemplos de fenômenos multifásicos. Por ser muito comum, existem muitas aplicações em diferentes tipos de indústria, dentre elas, a indústria de petróleo, de alimentos, química, geração de energia, refrigeração (CASTRO, ; CAREY, 2008).

No escopo de fenômenos multifásicos, os processos de mudança de fase são de grande interesse, em especial, a ebulição, por se tratar de um processo com alta eficiência de transferência de calor. Isso ocorre pois envolve uma quantidade grande de energia injetada no sistema, devido aos alto valor de calor latente de vaporização frente ao calor sensível do líquido. Por essa razão, esse processo é de muito interesse nas áreas de geração de energia e refrigeração. Os mecanismos físicos desses processos são estudados através de simulações e experimentos de formação de bolhas em superfícies aquecidas (CAREY, 2008).

Em relação às técnicas para simulação numérica, pode-se dizer, de forma resumida, que é necessário determinar as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia que governam os fenômenos de interesse. Essas equações, então, devem ser discretizadas para se obter um conjunto finito de equações algébricas, possíveis de serem solucionadas computacionalmente. Dentro da Mecânica dos Fluidos Computacional, ou do inglês *Computational Fluid Dynamics* (CFD), existem três grandes grupos de técnicas mais tradicionalmente utilizadas para a discretização das equações, conhecidos como volumes finitos (FVM), elementos finitos (FEM) ou diferenças finitas (FDM). Estas são as técnicas numéricas que empregam a abordagem macroscópica. Isto porque se baseiam na hipótese do contínuo, válida quando há um número muito grande de partículas em um pequeno volume, de forma que se pode representar as propriedades do fluido como funções contínuas no espaço e tempo (KRÜGER et al., 2017).

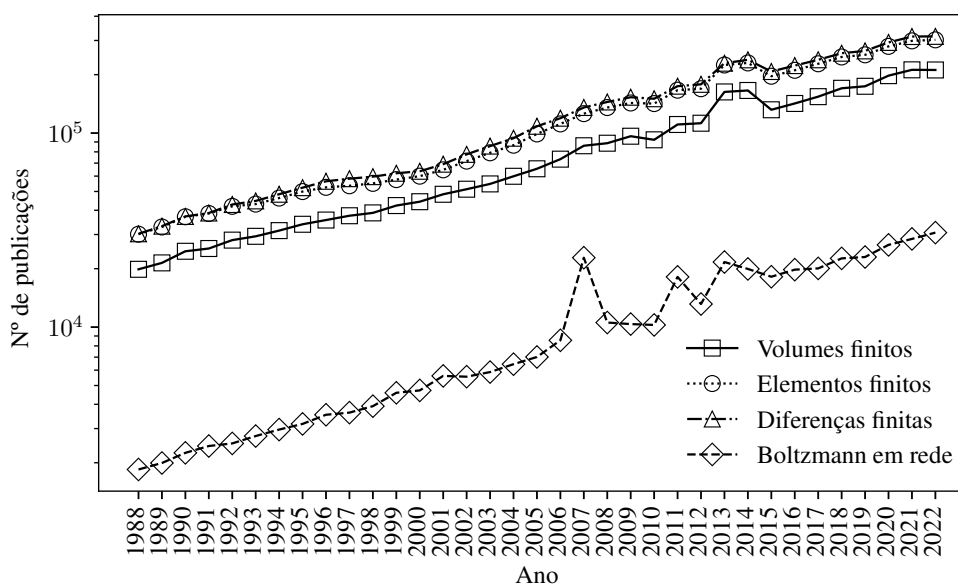
Alternativamente, existem as técnicas ditas mesoscópicas, ou seja, que partem de hipóteses mais elementares que a hipótese do contínuo, por exemplo, utilizando um modelo de esferas rígidas para representação de átomos ou moléculas de uma determinada substância. Uma alternativa que vem ganhando destaque com novos estudos e grupos acadêmicos é o método de Boltzmann em rede, ou do inglês, *lattice Boltzmann method* (LBM). Uma das grandes diferenças do LBM é que ele pode ser interpretado como uma discretização da equação de Boltzmann, ao invés de uma discretização das equações de conservação. Essa equação, com origens na teoria cinética dos gases, descreve o comportamento de uma única variável, denominada função de distribuição, que representa estatisticamente um grupo de partículas. A partir dela, é possível



calcular os campos de densidade, quantidade de movimento e energia. Com isso, o método discretizado possui uma implementação facilitada, por resolver um menor número de variáveis, e com os termos não lineares calculados de forma local, tornando o método bastante adequado para técnicas de processamento paralelizado (KRÜGER et al., 2017).

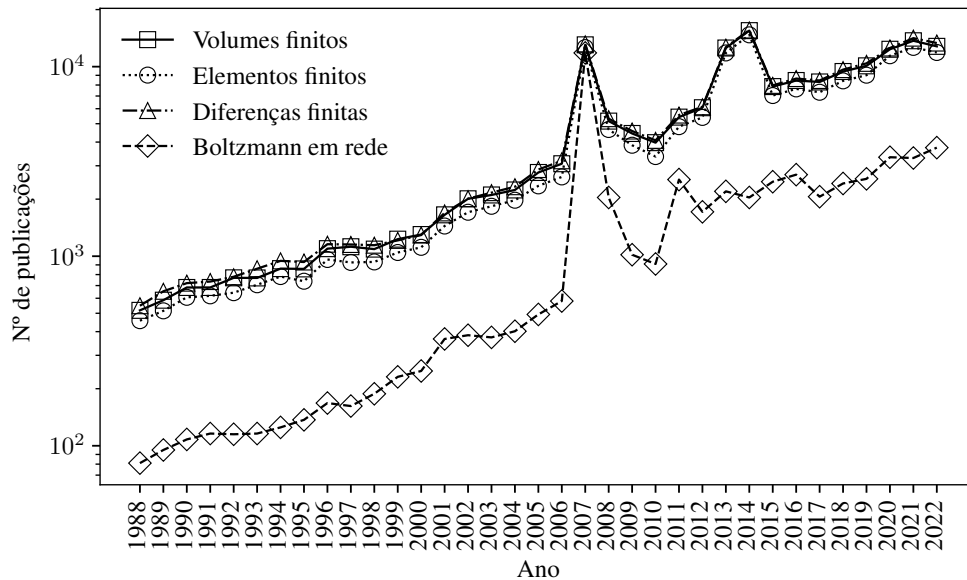
Para fins de comparação, podemos levantar um histórico do número de publicações dos métodos tradicionais (FEM, FDM, FVM) e do LBM, desde 1988, considerado a sua primeira aparição na literatura (MCNAMARA; ZANETTI, 1988). Na Fig. 1, uma busca com os termos em inglês de cada um desses métodos foi realizada na ferramenta cienciométrica gratuita *Dimensions*, da Digital Science, que utiliza os dados da Crossref. No fim da década de 80, os métodos tradicionais possuíam aproximadamente 30 mil publicações por ano, ao passo que o LBM, próximo de 2 publicações anuais. Em 2022, é notável como as técnicas tradicionais estão em um patamar elevado de publicações, em uma média anual entre 180-280 mil publicações, enquanto o LBM tem em torno de 25 mil publicações, considerando os últimos cinco anos. Quando essa busca foi associada ao termo *multiphase* (multifásico, em tradução), referente à Fig. 2, vemos um comportamento parecido: todas as técnicas apresentam tendência de crescimento, sendo que os métodos FEM, FDM e FVM possuem média anual de 10 mil publicações nos últimos cinco anos, enquanto o LBM tem pouco mais de um quarto desse valor. É importante ressaltar que esses resultados foram feitos com uma pesquisa simples, sem grandes preocupações com os critérios da ferramenta ou com tratamentos de dados que deveriam ser realizados. No entanto, os valores ilustram o potencial de crescimento de estudos e aprimoramento do LBM.

Figura 1 – Número de publicações das técnicas tradicionais de elementos, volumes e diferenças finitas em comparação ao método de Boltzmann em rede.



Fonte: (Digital Science, 2021).

Figura 2 – Número de publicações das técnicas tradicionais de elementos, volumes e diferenças finitas em comparação ao método de Boltzmann em rede, adicionando-se o termo *multiphase* (multifásico, em português) à busca.



Fonte: (Digital Science, 2021).

Os modelos multifásicos para o LBM em rede começaram a surgir durante a década de 90, sendo os pioneiros o método do pseudopotencial, proposto por Shan e Chen (1993), e o de energia livre, proposto por Swift et al. (1996). De maneira geral, pode-se dizer que ambas metodologias adicionam efeitos relacionados ao gradiente de densidade nas equações governantes do método. Como esse gradiente é não-nulo nas regiões interfaciais, é notável que esses termos são de grande importância para o equilíbrio e mudança entre as duas fases. Dessa forma, a interface é denominada por uma região em que há uma variação contínua entre as propriedades da fase de vapor e líquido, e diz-se que esses métodos são métodos de interface difusa. A vantagem dessa metodologia é que não há necessidade de se rastrear a interface para aplicar uma condição de contorno para balanço de massa, forças e energia entre as fases, como ocorre em outros métodos. Com isso, processos complexos podem ser simulados através de uma implementação numérica mais simplificada.

Desde a sua formulação original, o método do pseudopotencial recebeu muitas contribuições da comunidade científica para aprimoramento de diversas características, como melhor controle da curva de equilíbrio de fases, da tensão superficial, implementação de diferentes equações de estado, entre outros. No entanto, sua aplicação para fenômenos de nucleação ainda sofre de limitações de aplicabilidade. Apesar de já terem estudos interessantes com o LBM simulando os diferentes regimes de ebulição (LI et al., 2015), efeitos de molhabilidade da superfície na ebulição (GONG; CHENG, 2015a), aumento de eficiência com superfícies mistas (LI et al., 2020; LI et al., 2021; YU et al., 2021; CAO et al., 2022; CAI et al., 2023), muitos resultados

ainda são apresentados com tendências de comportamento de acordo com correlações e/ou de forma qualitativa.

O trabalho presente se propõe a trazer contribuições, principalmente relacionadas à aplicabilidade do método do pseudopotencial em problemas de interesse na engenharia. Os estudos podem ser resumidos em três etapas distintas. Em um primeiro momento, focou-se em melhor compreender a inclusão da força pseudopotencial através dos esquemas de forças notáveis na literatura, propostos por He, Shan e Doolen (1998), Guo, Zheng e Shi (2002), Shan e Chen (1993), Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009), Ladd e Verberg (2001). Nessa primeira etapa, para efeitos de comparação, utilizou o operador MRT e problemas conhecidos como de interface plana e gota estática, com condições de contorno periódicas. Em uma segunda etapa, com o esquema de força de Guo, Zheng e Shi (2002), com as melhorias propostas de Li e Luo (2013), Li, Luo e Li (2013), já propostos com operador de colisão MRT, mostrou-se que para problemas com equilíbrio de fases com o método do pseudopotencial, é necessário uma metodologia específica de controle dos parâmetros da equação de estado, tensão superficial e do controle da curva de saturação resultante para manter consistência entre as simulações com diferentes malhas. A metodologia desenvolvida foi aplicada em problemas com menores influências de condições de contorno, por exemplo, o resfriamento de uma gota em um meio quiescente, e em problemas com uma superfície aquecida com diferentes molhabilidades, como a ebulição em piscina. Por fim, na última etapa, baseado em um trabalho recente da literatura de Wang et al. (2022), que trouxe uma nova proposta de mapeamento entre unidades de rede e unidades físicas, mostrou-se que a metodologia proposta para refinamento de malha no trabalho presente é totalmente consistente com a propostas desses autores. Além disso, também buscou-se entender as limitações do método do pseudopotencial para aplicação em problemas de ebulição reais, e realizando buscas paramétricas com objetivo de otimizar o tempo computacional estimado. Em resumo, de forma geral, o trabalho presente tem como intuito realizar estudos teóricos e numéricos do método, de forma a identificar e entender as limitações do método para contribuir para maior aplicabilidade em fenômenos de mudança de fase, em especial, a nucleação em superfícies aquecidas.

## 1.1 Notação

É importante esclarecer alguns pontos a respeito da notação utilizada ao longo do texto. Dependendo do tipo de cálculo a ser realizado, é mais conveniente utilizar uma notação indicial ou vetorial. Em geral, quantidades tensoriais são escritas em negrito quando representadas em notação vetorial. A ordem do tensor é indicada ao longo do texto quando em notação vetorial, ao passo que é explícita na sua notação indicial. Por exemplo, o vetor de velocidades, um tensor de ordem 1, é representado por  $\mathbf{u} = u_\alpha$ . Da mesma forma, o tensor de tensões, um tensor de segunda ordem, é representado  $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{\alpha\beta}$ . A notação de Einstein é seguida para simplificar a escrita de somatórios. Assim, quando há índices repetidos, entende-se que há uma somatória dos

termos. Por exemplo, o produto escalar entre dois vetores pode ser representado por  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_\alpha v_\alpha$ . Na Tab. 1, as principais operações entre tensores e escalares utilizadas são apresentadas.

Tabela 1 – Exemplos das principais operações entre escalares e tensores nas notações vetorial e indicial.

| Operação                        | Notação vetorial                            | Notação indicial   | Forma abreviada   |
|---------------------------------|---|--|---|
| Produto escalar entre vetores   | $\lambda = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$     | $\lambda = a_\alpha b_\alpha$  |   |
| Produto diádico entre vetores   | $\mathbf{A} = \mathbf{a}\mathbf{b}$         | $A_{\alpha\beta} = a_\alpha b_\beta$                                   |   |
| Produto vetorial                | $\mathbf{c} = \mathbf{a} \times \mathbf{b}$ | $c_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} a_\beta b_\gamma$          |   |
| Contração tensorial             | $\lambda = \mathbf{A} : \mathbf{B}$         | $\lambda = A_{\alpha\beta} B_{\alpha\beta}$                            |   |
| Gradiente de um escalar         | $\mathbf{a} = \nabla \lambda$               | $a_\alpha = \partial \lambda / \partial x_\alpha$                      | $a_\alpha = \partial_\alpha \lambda$                      |
| Laplaciano de um escalar        | $\Lambda = \nabla^2 \lambda$                | $\Lambda = \partial^2 \lambda / (\partial x_\alpha \partial x_\alpha)$ | $\Lambda = \partial_\alpha \partial_\alpha \lambda$       |
| Divergência de tensor (ordem 1) | $\lambda = \nabla \cdot \mathbf{a}$         | $\lambda = \partial a_\alpha / \partial x_\alpha$                      | $\lambda = \partial_\alpha a_\alpha$                      |
| Divergência de tensor (ordem 2) | $\mathbf{a} = \nabla \cdot \mathbf{A}$      | $a_\alpha = \partial A_{\alpha\beta} / \partial x_\beta$               | $a_\alpha = \partial_\beta A_{\alpha\beta}$               |
| Divergência de tensor (ordem 3) | $\mathbf{A} = \nabla \cdot \mathbf{R}$      | $A_{\alpha\beta} = \partial R_{\alpha\beta\gamma} / \partial x_\gamma$ | $A_{\alpha\beta} = \partial_\gamma R_{\alpha\beta\gamma}$ |

Fonte: Elaborado pelo autor, baseado em Krüger et al. (2017, p. 655) e Latt (2007, p. 5).

Em relação à representação dos índices, quando letras gregas são empregadas, sua correspondência é com as coordenadas cartesianas no espaço euclidiano bi ou tridimensional. A distinção com os índices romanos é necessária, pois no método de Boltzmann, existe uma coordenada independente que representa o espaço de velocidades de partícula. Dessa forma, a variável  $f_i$  representa uma quantidade vetorial, cuja interpretação dependerá da discretização no espaço de velocidades do método. No caso bidimensional, para este texto, isto representa um vetor de nove componentes.

## 1.2 Organização do texto

Os capítulos do trabalho presente são divididos da seguinte forma:

- No capítulo 2, a revisão bibliográfica do LBM é apresentada, mostrando sua interpretação a partir da discretização da equação de Boltzmann, a inclusão de fenômenos multifásicos através do método do pseudopotencial e uma revisão dos trabalhos com método do pseudopotencial em ebulição em piscina.
- No capítulo 3, a metodologia utilizada no trabalho é detalhada, exibindo as ferramentas computacionais, os problemas estudados, os modelos empregados e as equações governantes resultantes para cada um deles.
- No capítulo 4, os resultados das simulações numéricas para os casos de controle da curva de saturação e tensão superficial são apresentados e comparados com os resultados analíticos dos problemas.

- No capítulo 5, são apresentados os resultados do método de refinamento de malha para problemas termohidrodinâmicos com o método do pseudopotencial.
- No capítulo 6, apresenta-se os resultados de desdobramentos de uma proposição recente da literatura de conversão da unidade de rede e física e do método de refinamento proposto.
- No capítulo 7, as conclusões do trabalho, assim como propostas de trabalhos futuros, são apresentadas.

### 1.3 Objetivos

Como relatado inicialmente, o LBM com a extensão do método do pseudopotencial possui características convenientes no estudo de processos de mudança de fase, como por exemplo, um método explícito de fácil evolução temporal, maior suscetibilidade à paralelização, e principalmente, a capacidade de nucleação e resolução da evolução da interface sem um rastreamento da interface para aplicações de condições de contorno especiais. No entanto, o método ainda carece um melhor entendimento de mecanismos fundamentais poucos citados, como por exemplo, a natureza das instabilidades, a correta conversão entre unidades de rede e unidades físicas, fato relacionado também ao refinamento de malha, assunto esse poucas vezes comentado. Assim sendo, de forma geral, o trabalho presente tem como objetivo realizar estudos teóricos e numéricos que tragam evidências dos limites dos métodos nesses aspectos, visando tornar o método cada vez mais próximo da capacidade de simular experimentos e fenômenos de interesse na engenharia. Em relação aos objetivos específicos, temos os seguintes pontos:

- Formalização de uma metodologia para simulação numérica e modelagem do processo de mudança de fase gás-líquido em cavidades, com o método dos pseudopotenciais. Essa etapa envolve o estudo e comparação de diferentes extensões da literatura para o controle da curva de saturação, visando consistência termodinâmica, controle da tensão superficial;
- Desenvolvimento de metodologia para refinamento e verificação de convergência numérica de simulações com LBM do pseudopotencial. Desde a proposição desse método, poucos trabalhos trouxeram suas análises de convergência, e os trabalhos teóricos indicam que esse processo envolve uma alteração de parâmetros não-trivial para um refinamento consistente;
- Estudo do mapeamento entre as unidades de rede e unidades físicas, que irá permitir validar a metodologia de refinamento, e estimar tempos de simulações para dados físicos, e com isso identificar possíveis fatores limitantes do método.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Teoria Cinética dos Gases

Nesta seção, serão apresentados os principais conceitos da teoria cinética dos gases, focando principalmente em trazer uma compreensão a respeito da equação de Boltzmann. Essa etapa se faz necessária, pois essa equação, ao ser discretizada, dá origem ao método de Boltzmann em rede. Dessa forma, nessa etapa, tem-se o foco nos conceitos que são a base inicial para entender a origem do método empregado no trabalho presente.

O comportamento de um fluido pode ser modelado através de três grandes abordagens. A primeira delas consiste na mecânica do contínuo, ou seja, mesmo os menores volumes, considerados infinitesimais, possuem uma grande quantidade de partículas, de forma que a trajetória livre dessas partículas são praticamente irrelevantes. Com isso, as propriedades termodinâmicas do fluido podem ser consideradas a variar de maneira contínua no tempo e espaço, e as leis de conservação de massa, quantidade de movimento e energia podem ser aplicadas, juntamente com equações constitutivas, como as equações de estado termodinâmicas e a relação entre o tensor de tensões viscosas e velocidades. Essa abordagem também é chamada de macroscópica, pois não é necessário recorrer às estruturas microscópicas constituintes do fluido Krüger et al. (2017).

Um caminho alternativo consiste em modelar um fluido como um grande conjunto de partículas, e definir a evolução do fluido através da interação entre essas partículas. A partir desse ponto, surgem duas novas ramificações. A primeira se preocupa em modelar a evolução de cada uma das partículas através da aplicação da segunda lei de Newton, levando em conta a ação das forças intermoleculares. Essa abordagem é conhecida como dinâmica molecular, e sua desvantagem para aplicação de problemas práticos está relacionada ao elevado número de variáveis que devem ser resolvidas, mesmo para pequenos volumes. A segunda ramificação visa contornar esse elevado custo através de ferramentas estatísticas, que possibilitam representar uma grande população de partículas em um conjunto reduzido de variáveis. Com isso, procura-se modelar como essas variáveis evoluem no tempo dadas as interações entre as partículas desse conjunto. Esse tipo de abordagem é conhecida como mesoscópica, e a partir desse campo, que se desenvolveu a Teoria Cinética dos Gases e a equação de Boltzmann.

Nas próximas subseções, serão apresentados alguns conceitos fundamentais da Teoria Cinética de Gases, mais especificamente, aqueles relacionados à equação de Boltzmann. Para esses desenvolvimentos, podemos utilizar algumas simplificações, como a hipótese de um gás rarefeito. Essa hipótese implica que a interação entre as partículas são restritas a um curto intervalo de tempo e espaço, de forma que na maioria de suas trajetórias e do tempo, as partículas podem ser consideradas livres. Por essa mesma razão, a colisão entre três ou mais partículas é considerada um evento altamente improvável, de forma que apenas colisões binárias são levadas

em conta. Também, o gás é considerado monoatômico, de forma que a energia é unicamente relacionada ao movimento de translação das partículas.

### 2.1.1 Função de Distribuição

O primeiro conceito a ser discutido é a função de distribuição,  $f$ . Sua correta interpretação é fundamental para o entendimento do objeto de estudo da equação de Boltzmann. A função de distribuição,  $f$ , é a principal ferramenta capaz de trazer informações de um grande número de partículas. Vale ressaltar que a explicação dada aqui depende também da hipótese do caos molecular. Essa hipótese permite afirmar que antes de haver qualquer colisão entre duas partículas, suas posições e velocidades não são relacionadas. Com isso, as variáveis independentes da função de distribuição consistem na posição  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  e velocidade  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$  da partícula (também chamado de espaço de fase), além do instante de tempo  $t$  em que ela se encontra.

Sendo assim, a função de distribuição de partículas,  $f$ , pode ser interpretada como a densidade de partículas encontrada em torno da posição  $\mathbf{x}$ , com velocidades entre  $\boldsymbol{\xi}$  e  $\boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}$ , entre o instante de tempo  $t$  e  $t + dt$ . Utilizando essa interpretação, importantes variáveis macroscópicas podem ser encontradas através das seguintes integrais no espaço de velocidade:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.1)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \boldsymbol{\xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.2)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t) E(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\boldsymbol{\xi}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.3)$$

em que  $\rho$  é a densidade,  $\mathbf{u} = (u, v, w)$  é a velocidade macroscópica, e  $E$ , a energia total específica, que é dada pela soma da energia cinética ( $\rho|\mathbf{u}|^2/2$ ) e da energia interna devido ao movimento aleatório das partículas, relacionado à variável macroscópica de temperatura  $T$ . Também, define-se um momento de ordem  $n$  da função de distribuição :

$$\int \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \dots \xi_{\alpha_n} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.4)$$

de forma que as Eqs. (2.1), (2.2) e (2.3) podem ser interpretadas, respectivamente, como momento de ordem zero, um e o traço do momento de ordem 2 da função  $f$ .

A Eq. (2.3) pode ser escrita em termos da energia interna específica,  $e$ :

$$\rho(\mathbf{x}, t) e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} |\mathbf{v}|^2 f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}, \quad (2.5)$$

sendo  $\mathbf{v}$  a flutuação na velocidade, dada pela diferença entre a velocidade média local e a velocidade da partícula:

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t). \quad (2.6)$$

### 2.1.2 Equação de Boltzmann

Dada a interpretação física da função de distribuição,  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ , pode-se notar que, através de um tratamento estatístico, é possível recuperar os campos macroscópicos de interesse em simulações numéricas. O próximo passo natural a se investigar, portanto, é como essa função se comporta ao longo do tempo. Matematicamente, esse comportamento é descrito através da derivada total da função de distribuição:

$$\frac{df}{dt} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) + \left( \frac{\partial f}{\partial x_\beta} \right) \frac{dx_\beta}{dt} + \left( \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} \right) \frac{d\xi_\beta}{dt}. \quad (2.7)$$

Podemos substituir alguns termos conhecidos na Eq. (2.7). Por exemplo, a própria definição da velocidade de partícula, dada por  $dx_\beta/dt = \xi_\beta$ , e também, a variação da velocidade de partícula considerando um campo de forças externas  $\mathbf{F}$ , através da segunda lei de Newton,  $d\xi_\beta/dt = F_\beta/\rho$ . Com isso, considerando a igualdade  $df/dt = \Omega(f)$ , temos:

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) + \xi_\beta \left( \frac{\partial f}{\partial x_\beta} \right) + \frac{F_\beta}{\rho} \left( \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} \right) = \Omega(f). \quad (2.8)$$

A Eq. (2.8) é conhecida como a Equação de Boltzmann. Pode-se interpretá-la como a advecção da função de distribuição na velocidade das partículas  $\boldsymbol{\xi}$ , considerando também uma variação nessas velocidades devido às forças externas. O termo fonte  $\Omega(f)$  é responsável pelos efeitos na função de distribuição  $f$  devido às colisões entre as partículas. Sendo assim,  $\Omega(f)$  também é comumente denominado como operador de colisão. Sua definição é dada através do estudo estatístico das colisões binárias elásticas, e pode ser definido por (GOMBOSI, 1994):

$$\Omega(f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})) = \int \int_{S^2} B(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}_2, \mathbf{e}) \left[ f(\boldsymbol{\xi}') f(\boldsymbol{\xi}'_2) - f(\boldsymbol{\xi}) f(\boldsymbol{\xi}_2) \right] d\mathbf{e} d\boldsymbol{\xi}_2, \quad (2.9)$$

em que  $S^2$  é a esfera de ação entre a interação de duas partículas,  $\boldsymbol{\xi}$ ,  $\boldsymbol{\xi}_2$ , as velocidades das partículas antes da colisão, e  $\boldsymbol{\xi}'$ ,  $\boldsymbol{\xi}'_2$ , as velocidades após a colisão. O termo  $B(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}_2, \mathbf{e})$  é conhecido como o *kernel* da colisão, e ele descreve probabilidade de que uma partícula com velocidade  $\boldsymbol{\xi}$  se colida com uma partícula com velocidade  $\boldsymbol{\xi}_2$  e seja refletida na direção  $\mathbf{e} = \frac{\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}'}{|\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}'|}$ .

Assim, a equação de Boltzmann, Eq. (2.8), é uma equação íntegro-diferencial de alta complexidade, o que torna sua solução extremamente difícil. No entanto, o operador de colisão possui algumas propriedades intrínsecas. Essas características podem ser empregadas para o desenvolvimento de operadores de colisão simplificados, mas que preservem essas propriedades da equação original. Algumas delas serão discutidas a seguir.

### 2.1.3 Função de Equilíbrio

Como mostrado na Eq. (2.9), a direção que as partículas tomam após a colisão influencia a evolução da função de distribuição. Essa direção é muito sensível às condições iniciais das



posições relativas entre essas partículas. Para se vislumbrar essa dependência, basta imaginar duas esferas rígidas se colidindo quando a linha imaginária que une seus centros está alinhada com a direção das suas velocidades relativas. Nesse caso, temos uma colisão frontal, e a direção das velocidades após a colisão se manterá nesse alinhamento. Porém, se inicialmente as esferas estão desalinhadas a uma distância menor que o raio das esferas, a direção das velocidades pós-colisão irá se alterar.

No entanto, após um tempo suficientemente longo, as colisões tendem a apresentar uma distribuição angular uniforme no espaço de velocidades, em torno da velocidade média das partículas  $\mathbf{u}$  (KRÜGER et al., 2017). Dessa forma, a função de distribuição,  $f$ , não sofre mais alterações, e diz-se que o estado de equilíbrio foi atingido. Isso equivale à condição  $\Omega(f) = 0$ , em que o valor função de distribuição não se altera mais, atingindo o valor conhecido como função de distribuição de equilíbrio  $f = f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ . Essa função é isotrópica no espaço de velocidades em torno da velocidade média  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ . Ou seja, em um referencial com velocidade  $\mathbf{u}$ , a  $f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ , no que diz respeito ao espaço de velocidades, dependerá apenas do módulo da velocidade aleatória da partícula  $f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t)$ . A relação que satisfaz essas condições é dada por (KREMER, 2005; GOMBOSI, 1994):

$$f^{\text{eq}}(\mathbf{x}, |\mathbf{v}|, t) = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-|\mathbf{v}|^2/(2RT)}. \quad (2.10)$$

A expressão Eq. (2.10) também é conhecida como a função de distribuição de Maxwell-Boltzmann ou Maxwelliana. A função de equilíbrio é comumente empregada também para simplificações do operador de colisão. Isto porque a evolução da função de distribuição, como mostrado na Eq. (2.8), depende desse operador, e uma técnica muito empregada, é que essa taxa de variação depende do quão distante a função do estado de equilíbrio local. No entanto, as simplificações do operador precisam respeitar propriedades de conservação da formulação original, as quais serão apresentadas na seção seguinte.

#### 2.1.4 Propriedades do operador de colisão

O operador de colisão é responsável por incluir os efeitos da interação entre as partículas na evolução temporal da função de distribuição. No caso em que apenas colisões elásticas são consideradas, como mostrado na Eq. (2.9), o efeito desse operador não altera as quantidades locais conservadas durante a iteração, como massa, quantidade de movimento e energia. Isso se reflete como as seguintes propriedades dos momentos do operador colisão:

$$\int \Omega(f) d\boldsymbol{\xi} = 0 \quad (2.11)$$

$$\int \boldsymbol{\xi} \Omega(f) d\boldsymbol{\xi} = 0 \quad (2.12)$$

$$\int \Omega(f) \frac{|\xi|^2}{2} d\xi = 0 \quad (2.13)$$

Uma das primeiras propostas para se simplificar o operador de colisão que consegue corresponder às propriedades anteriores foi proposta por Bhatnagar, Gross e Krook (1954), e por essa razão, é conhecido como operador BGK, um dos mais frequentemente utilizados:

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{\text{eq}}). \quad (2.14)$$

A principal ideia motivacional do operador BGK é que, dado que a função de distribuição não atingiu seu estado de equilíbrio, a parcela de não-equilíbrio dada pela diferença  $f^{\text{neq}} = f - f^{\text{eq}}$  é não nula. A evolução temporal da função de distribuição,  $f$ , é considerada proporcional à essa parcela e ao fator de relação  $\tau$ .

Na próxima seção, será exibido como essas propriedades do operador de colisão podem ser empregadas para realizar a conexão da equação de Boltzmann com a evolução dos campos macroscópicos conhecidos. Com isso, também será possível mostrar a relação do fator de relaxação  $\tau$  com coeficientes de transporte macroscópicos, como viscosidade e difusividade térmica.

### 2.1.5 Comportamento macroscópico da equação de Boltzmann

A equação de Boltzmann descreve o comportamento da evolução temporal da função de distribuição,  $f$ , e assim como os momentos dessa função recuperam os campos macroscópicos de interesse, os momentos da Eq. (2.8) recuperam as equações que descrevem a evolução temporal das variáveis macroscópicas (GOMBOSI, 1994; KRÜGER et al., 2017).

Calculando o momento de ordem zero no espaço de velocidades da Eq. (2.8), obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int f d\xi + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int \xi_\beta f d\xi + \frac{F_\beta}{\rho} \int \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} d\xi = \int \Omega(f) d\xi. \quad (2.15)$$

Das Eqs. (2.1), (2.2). e (2.11), é possível substituir os momentos da função de distribuição e do operador de colisão. O termo  $\int \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} d\xi$  pode ser mostrado que se anula. Isto ocorre porque ao realizar a integral da derivada da função de distribuição  $f$  no espaço de velocidades, o resultado é avaliação da própria função de distribuição  $f(t, \mathbf{x}, \xi)$  com  $\xi_\alpha \rightarrow \pm\infty$ . A probabilidade de encontrar uma partícula com certa velocidade diminui à medida que a magnitude dessa velocidade aumenta. Dessa forma, o valor de  $f$  tende a 0 quando a magnitude da velocidade tende a infinito. Com isso, a Eq. (2.15) se reduz à equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta)}{\partial x_\beta} = 0. \quad (2.16)$$

De maneira similar, pode-se multiplicar a equação de Boltzmann pela velocidade da partícula, e integrarmos no espaço de velocidades, de forma que:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \xi_\alpha f d\xi + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int \xi_\alpha \xi_\beta f d\xi + \frac{F_\beta}{\rho} \int \xi_\alpha \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} d\xi = \int \xi_\alpha \Omega(f) d\xi, \quad (2.17)$$

a qual, aplicando as propriedades do operador de colisão e função de distribuição, resulta na equação de conservação de quantidade de movimento:

$$\frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha u_\beta)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + F_\alpha. \quad (2.18)$$

Na equação anterior,  $\sigma_{\alpha\beta}$  é o tensor de tensões de Cauchy, que é relacionado com a função de distribuição por:

$$\sigma_{\alpha\beta} = - \int v_\alpha v_\beta f d\xi. \quad (2.19)$$

Por fim, a equação de conservação de energia também pode ser obtida multiplicando a Eq. (2.8) por  $|\xi|^2/2$ , e integrando em todo o espaço de velocidades:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \frac{|\xi|^2}{2} f d\xi + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \int \frac{|\xi|^2}{2} \xi_\beta f d\xi + \frac{F_\beta}{\rho} \int \frac{|\xi|^2}{2} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} d\xi = \int \frac{|\xi|^2}{2} \Omega(f) d\xi, \quad (2.20)$$

que resulta na equação macroscópica:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\beta E)}{\partial x_\beta} = \frac{\partial(u_\alpha \sigma_{\alpha\beta})}{\partial x_\beta} + F_\beta u_\beta - \frac{\partial q_\beta}{\partial x_\beta}. \quad (2.21)$$

O fluxo de calor  $q_\beta$  é relacionado com a função de distribuição  $f$  através da seguinte expressão:

$$q_\beta = -\frac{1}{2} \int v_\alpha v_\alpha v_\beta f d\xi. \quad (2.22)$$

Das equações macroscópicas, apenas na equação da conservação de massa conseguimos eliminar completamente a variável da função da distribuição. Nas equações de conservação de quantidade de movimento e energia, o tensor de tensões e o fluxo de calor ainda são grandezas desconhecidas, por isso, o sistema ainda não é considerado completo, sendo necessário avaliar as Eqs. (2.19) e (2.22) de alguma maneira. Uma forma simples de se tentar realizar essas avaliações seria considerar que a função de distribuição  $f$  está sempre muito próxima do seu valor de equilíbrio local,  $f \approx f^{\text{eq}}$ . Com essa hipótese, as equações macroscópicas resultantes se resumem às equações de Euler.

Uma outra maneira de se relacionar as grandezas macroscópicas desconhecidas é utilizando a chamada expansão de Chapman-Enskog. A descrição detalhada desse procedimento é encontrada em Chapman e Cowling (1952), em que a ideia é obter o comportamento assintótico das equações. Para isso, a função de distribuição  $f$  é escrita como uma série infinita de termos:

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots, \quad (2.23)$$

sendo  $f^{(0)} = f^{\text{eq}}$ , e  $f^{(n)}$  perturbações ao redor do valor de equilíbrio relacionadas à ordem de grandeza  $\mathcal{O}(\epsilon^n)$ . O valor  $\epsilon$  é relacionado ao número de Knudsen,  $\text{Kn}$ , o qual, por sua vez, é dado pela razão entre o caminho livre médio das partículas e o comprimento característico do problema. Para que a hipótese de pequenas perturbações seja verdadeira, então, deve-se

ter pequenos valores de número de Knudsen, o que equivale a buscar o comportamento no limite hidrodinâmico, ou seja, quando a hipótese do contínuo é válida. A equação de Boltzmann também pode ser escrita no formato  $\mathcal{F}(f) = 0$ , de forma que a expansão de Champan-Enskog também a reescreve como uma série infinita tal que:

$$\mathcal{F}(f) = \mathcal{F}^{(1)}(f^{(0)}) + \mathcal{F}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) + \mathcal{F}^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) + \dots \quad (2.24)$$

Para satisfazer a equação  $\mathcal{F}(f) = 0$ , Enskog postulou resolver cada um dos termos de forma que:

$$\mathcal{F}^{(1)}(f^{(0)}) = 0, \quad \mathcal{F}^{(1)}(f^{(0)}, f^{(1)}) = 0, \quad \mathcal{F}^{(2)}(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}) = 0, \dots \quad (2.25)$$

Com isso, é possível resolver a equação até uma ordem  $n$  desejada de maneira sucessiva, sendo que cada uma das equações sempre terá apenas uma incógnita a ser determinada. Quando se realiza esse procedimento para se determinar a função  $f^{(1)}$  de maneira explícita, seu valor dependerá do operador de colisão e da função de equilíbrio. Valendo-se da aproximação de  $f$  apenas pelos dois primeiros termos, ou seja,  $f \approx f^{(0)} + f^{(1)}$  e utilizando o operador BGK, as relações nas Eqs. (2.19) e (2.22) são obtidas (GOMBOSI, 1994; KRÜGER et al., 2017):

$$\sigma_{\alpha\beta} = -p\delta_{\alpha\beta} + \mu \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right) + \eta_B \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma}, \quad (2.26)$$

$$q_\beta = -k \frac{\partial T}{\partial x_\beta}, \quad (2.27)$$

em que  $p$  é a pressão termodinâmica,  $\mu$  a viscosidade dinâmica, e  $\eta_B$ , a viscosidade volumétrica,  $k$ , a condutividade térmica. A equação de estado obtida e as relações para os coeficientes de transporte são dadas por:

$$p = \rho RT, \quad \mu = p\tau, \quad \eta_B = 0, \quad k = \frac{5}{2} R p \tau, \quad (2.28)$$

em que  $R = R_u / \text{MM}_{\text{gas}}$  é a constante específica do gás. Com isso, mostra-se que a equação de Boltzmann com o operador BGK é capaz de recuperar o comportamento macroscópico das equações de Navier-Stokes.

## 2.2 O método de Boltzmann em rede

### 2.2.1 Breve histórico

Historicamente, o método de Boltzmann em rede (LBM) ou *lattice Boltzmann method* foi proposto com o intuito de superar algumas deficiências do método de gás em rede ou *Lattice Gas Cellular Automata* (LGCA), o qual foi originalmente proposto por Frisch, Hasslacher e Pomeau (1986). O método LGCA pode ser considerado uma abordagem microscópica simplificada, em que cada partícula ocupa os vértices de uma malha regular, com velocidades  $c_i$ , restritas a um conjunto limitado de velocidades conhecidas, de forma que essas partículas possam traçar

uma trajetória até o próximo vértice em um instante de tempo. Com isso, o estado de cada um dos vértices dessa malha podem ser definidos por um conjunto de variáveis booleanas, geralmente representado por  $n_i$ , que indicam a presença ou ausência de uma partícula com velocidade  $c_i$ . A evolução temporal dessas partículas segue regras específicas, basicamente dividida em duas etapas: colisão e propagação. A colisão é responsável por alterar a direção da velocidade das partículas, e a propagação consiste movimentar as partículas ao longo da direção de sua velocidade até o nó vizinho. Através dessas características, o método LGCA é capaz de replicar comportamento macroscópico de fluidos newtonianos (HUANG; SUKOP; LU, 2015; WOLF-GLADROW, 2000).

Mesmo o método LGCA sendo composto por regras de fácil implementação, e de ser bastante performático por envolver apenas variáveis booleanas, algumas desvantagens dificultavam seu desenvolvimento para obter comportamentos mais complexos. Dentre as principais desvantagens incluem presença de flutuações nos resultados, a dependência da pressão com a velocidade do fluido e dificuldade em obter equações macroscópicas isotrópicas (HUANG; SUKOP; LU, 2015).

Foi nesse contexto, principalmente visando superar a questão das flutuações, que McNamara e Zanetti (1988) propuseram um método que modela a evolução da média do número de partículas por vértice, ao invés da evolução do próprio número de partículas como o LGCA. Com isso, deixou-se de utilizar variáveis booleanas,  $n_i$ , e passou-se a empregar números reais,  $f_i$ , que indicavam uma média de ocupação dos nós ou sítios. Os autores utilizaram uma dedução análoga aos passos para a dedução da equação de Boltzmann, e por isso, o método foi denominado método de Boltzmann em rede ou *Lattice Boltzmann Method*.

Ainda que essa analogia entre o método proposto e a equação de Boltzmann fosse conhecida, o trabalho He e Luo (1997b) foram os primeiros a demonstrar que o método poderia ser deduzido a partir de discretizações no tempo, posição e velocidades, juntamente com a expansão em série da função de equilíbrio de Boltzmann. Posteriormente, Shan e He (1998) refinaram a análise apontando algumas correções na discretização. Ainda assim, esses trabalhos possuíam alguns passos que outros autores consideravam não muito gerais, como assumir a função de equilíbrio como um polinômio na velocidade do fluido, com coeficientes a serem determinados posteriormente, de tal forma que a análise resulte nas equações macroscópicas desejadas. Apenas oito anos mais tarde, que Shan, Yuan e Chen (2006) e Philippi et al. (2006) apresentaram procedimentos mais gerais, utilizando projeções em polinômios de Hermite, permitindo, inclusive, desenvolver modelos com maior número de velocidades, com capacidade de recuperar comportamento macroscópico mais complexos, como a equação de Fourier-Navier-Stokes (SIEBERT; PHILIPPI; MATTILA, 2014).

Nas próximas seções, iremos mostrar os principais passos e conceitos utilizados nesses passos de discretização da equação de Boltzmann.

### 2.2.2 Discretização no espaço de velocidades

Uma característica do LBM que o diferencia das abordagens mais tradicionais é a dependência da função de distribuição  $f$  de um espaço de velocidades, além da posição e tempo, estes, mais comumente abordados em outras técnicas de discretização. Transformar a variável contínua  $\xi$  em um conjunto de velocidades discretas possíveis de serem simuladas algebricamente é uma das etapas cruciais para o LBM.

Pela análise de Chapman-Enskog, é possível dizer que o comportamento macroscópico obtido está relacionado com o correto cálculo dos momentos da função de distribuição de equilíbrio  $f^{\text{eq}}$ . Sendo assim, o objetivo é encontrar um conjunto finito de velocidades  $c_i$  de forma que o cálculo desses momentos através de uma expressão algébrica seja capaz de replicar o comportamento da integração usual no espaço de velocidades. Em resumo, o procedimento para se realizar isso, é aproximar função  $f^{\text{eq}}$  em termos de uma série de polinômios conhecidos em  $\xi$ , e então aplicar uma integração numérica pelo método de quadratura (KRÜGER et al., 2017; SHAN; YUAN; CHEN, 2006; PHILIPPI et al., 2006).

A expansão da  $f^{\text{eq}}$  pode ser feita em polinômios de Hermite através da equação (SHAN; YUAN; CHEN, 2006):

$$f(\xi_0) = \left( \frac{1}{2\pi RT_0} \right)^{(D/2)} \exp(-\xi_0^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\alpha}^{(n)} \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\xi_0), \quad (2.29)$$

em que  $\mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}$  é o polinômio de Hermite de ordem  $n$ ,  $a_{\alpha}^{(n)}$  são os coeficientes da expansão relacionados a  $\mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}$ ,  $\xi_0 \equiv \xi/\sqrt{RT_0}$  é uma velocidade molecular adimensional, em que  $T_0$  é uma temperatura de referência, e  $D$  é a quantidade de dimensões a serem consideradas no problema. O subíndice  $\alpha$  é uma representação resumida dos índices  $\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n$ . Por exemplo, no caso, bidimensional, o polinômio tensorial de ordem 2,  $\mathcal{H}_{\alpha}^{(2)}$ , possui as componentes  $\mathcal{H}_{xx}^{(2)}$ ,  $\mathcal{H}_{xy}^{(2)}$  e  $\mathcal{H}_{yy}^{(2)}$ .

Uma das propriedades do polinômio de Hermite é sua ortogonalidade em relação aos polinômios de ordem menor, ou seja,

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp(-\xi_0^2/2) \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)} \mathcal{H}_{\beta}^{(m)} d\xi = 0. \quad (2.30)$$

se  $n \neq m$ . Isso garante que, ao truncarmos a representação de  $f^{\text{eq}}$  até uma ordem  $N$ , os momentos de ordem inferior não são afetados. Portanto, o coeficiente de expansão  $a_{\alpha}^{(n)}$  pode ser visto como a quantificação da projeção da função  $f$  no polinômio  $\mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}$ , e pode ser calculado como:

$$a_{\alpha}^{(n)} = \int f \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\xi_0) d\xi. \quad (2.31)$$

Os cálculos desses coeficientes se tornam convenientes, uma vez que os polinômios são funções da velocidade da partícula. Por exemplo, para o cálculo de  $a^{(0)}$  e  $a_{\alpha}^{(1)}$ , os polinômios  $\mathcal{H}^{(0)} = 1$  e  $\mathcal{H}_{\alpha}^{(1)} = \xi_{\alpha}$  são basicamente o cálculo dos momentos de ordem 0 e 1 da própria função

$f$ , mostrado na Seção 2.1 nas Eqs. (2.1) e (2.2). No apêndice A, são apresentados as fórmulas de alguns desses polinômios, e um exemplo de projeção unidimensional também é demonstrado.

Além disso, o uso desses polinômios também é conveniente para se realizar a integração de uma função  $h(\xi_0)$  qualquer através da quadratura de Gauss-Hermite.

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp(-\xi_0^2/2) h(\xi_0) d\xi \approx \sum_i w_i h(\xi_{0,i}), \quad (2.32)$$

sendo  $w_i$  os pesos discretos relacionados à cada uma das  $\xi_{0,i}$  velocidades discretas. Essas velocidades são escolhidas de modo que, em um passo de tempo, as partículas se deslocam exatamente aos sítios adjacentes em uma malha regular. Isso é feito assumindo uma velocidade  $\xi_{0,i} = \lambda c_i$ , em que  $c_i$  aceita apenas valores inteiros, e  $\lambda$  é um fator de escala a ser determinado.

Para que o método seja capaz de garantir uma integração numérica exata até polinômios de ordem  $2N - 1$ , é necessário definir pesos  $w_i$  e fatores  $\lambda$  que consigam recuperar o cálculo da norma dos primeiros  $N$  polinômios de Hermite (PHILIPPI et al., 2006; SHAN; YUAN; CHEN, 2006):

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int \exp(-\xi_0^2/2) (\mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\xi_0))^2 d\xi_0 = \sum_i w_i (\mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\lambda c_i))^2, \quad (2.33)$$

para  $n \leq N$ . Com essas condições, forma-se um sistema de equações cuja solução possibilita a determinação do valor de  $\lambda$  e  $w_i$  para um dado conjunto  $c_i$ . Dessa forma, tem-se a função  $f_i^{eq}$  relacionada à cada uma dessas velocidades  $c_i$ . A mesma expansão pode ser feita para a função  $f$ , de forma que a equação de Boltzmann com o operador BGK pode ser, então, escrita como um conjunto de equações discretizadas:

$$\partial_t f_i + c_{i\alpha} \partial_\alpha f_i = \Omega(f_i), \quad i = 1, \dots, q, \quad (2.34)$$

valendo-se da notação simplificada  $\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$  e  $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}$ , de tal forma que os momentos macroscópicos discretos respeitem:

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}, \\ \rho \mathbf{u} &= \sum_i f_i \mathbf{c}_i = \sum_i f_i^{eq} \mathbf{c}_i. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Aqui, vale ressaltar que a temperatura de referência, comentada anteriormente, é um parâmetro livre, e é escolhida de tal forma que  $\Delta x^2 / \Delta t^2 = \lambda^2 RT_0$ . Essa igualdade também está relacionada à propagação das funções para os sítios vizinhos em um passo de tempo. Assim, essa técnica fixa um valor de temperatura e por isso, a evolução temporal da equação de energia pelas funções  $f$  é perdida. Também por essa razão, esse método de discretização é conhecido como isotérmico. Apesar dessa limitação, ainda é possível recuperar as equações de Navier-Stokes através dessa metodologia e a solução da conservação de energia térmica pode ser resolvida através de uma segunda função de distribuição ou outro método tradicional como diferenças finitas ou mesmo volumes finitos.

### 2.2.3 Conjuntos de velocidades

Para os propósitos desse trabalho, uma representação até a segunda ordem da função de equilíbrio é suficiente para recuperar o comportamento macroscópico desejado das equações de Navier-Stokes. A função de equilíbrio discretizada no espaço de velocidades é dada por:

$$f_i^{\text{eq}}(t, \mathbf{x}) = w_i \left( \rho + \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} \rho u_\alpha + \frac{(c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2) \delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} \rho u_\alpha u_\beta \right), \quad (2.36)$$

em que  $\mathcal{H}^{(0)} = 1$ ,  $\mathcal{H}_\alpha^{(1)} = c_{i\alpha}$  e  $\mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)} = c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2$  são, respectivamente, os polinômios de Hermite discretizados de ordem 0, 1 e 2. O termo  $c_s^2$  é denominado de velocidade do som na rede. Essa denominação será melhor explicada posteriormente.

A função de distribuição da Eq. (2.36) pode ser aplicada em diferentes conjuntos de velocidades  $c_i$ . Sua primeira aparição na literatura, dada por Qian, D’Humières e Lallemand (1992), na verdade, não teve relação com a projeção nos polinômios de Hermite, mas sim através do conhecimento adquirido com o método LGCA. Já nessa época, havia a noção que para se recuperar comportamentos macroscópicos de conservação de massa e quantidade de movimento, os conjuntos de velocidade deveriam respeitar uma série de requisitos relacionados à isotropia rotacional do conjunto de velocidades utilizado (FRISCH; HASSLACHER; POMEAU, 1986). Para as equações de Navier-Stokes, esses requisitos para o conjunto de velocidades  $c_i$  são dados matematicamente por:

$$\begin{aligned} w_i &> 0 \quad \forall i, \\ \sum_i w_i &= 1, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} &= 0, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} &= c_s^2 \delta_{\alpha\beta}, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} &= 0, \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} &= c_s^4 (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\mu} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}), \\ \sum_i w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\mu} c_{i\nu} &= 0. \end{aligned} \quad (2.37)$$

A nomenclatura do conjunto de velocidades, geralmente, indica o número de dimensões  $d$  e a quantidade de velocidades  $q$ . Nesse texto, utilizamos o padrão  $DdQq$ . Sendo assim, os conjuntos mais tradicionais que respeitam as condições da Eq. (2.37) são denominados D1Q3, D2Q9 e D3Q27. Esses conjuntos possuem  $c_s^2 = 1/3$  e ao respeitarem as condições apresentadas, os momentos da função de equilíbrio são dados por:

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho, \quad (2.38a)$$



Tabela 2 – Pesos  $w_i$ , velocidades  $\xi$ , suas respectivas direções e normas para os principais conjuntos de velocidades para problemas uni-, bi- e tridimensionais.

| Notação | Velocidades $\mathbf{c}_i$   | Quantidade | Módulo $ \mathbf{c}_i $ | Peso $w_i$ |
|---------|--|------------|-------------------------|------------|
| D1Q3    | (0)  | 1          | 0                       | 2/3        |
|         | ( $\pm 1$ )  | 2          | 1                       | 1/6        |
| D2Q9    | (0, 0)   | 1          | 0                       | 4/9        |
|         | ( $\pm 1, 0$ ), (0, $\pm 1$ )                                      | 4          | 1                       | 1/9        |
|         | ( $\pm 1, \pm 1$ )   | 4          | $\sqrt{2}$              | 1/36       |
| D3Q15   | (0, 0, 0)  | 1          | 0                       | 2/9        |
|         | ( $\pm 1, 0, 0$ ), (0, $\pm 1, 0$ ), (0, 0, $\pm 1$ )              | 6          | 1                       | 1/9        |
|         | ( $\pm 1, \pm 1, \pm 1$ )  | 8          | $\sqrt{3}$              | 1/72       |
| D3Q19   | (0, 0, 0)  | 1          | 0                       | 1/3        |
|         | ( $\pm 1, 0, 0$ ), (0, $\pm 1, 0$ ), (0, 0, $\pm 1$ )              | 6          | 1                       | 1/18       |
|         | ( $\pm 1, \pm 1, 0$ ), ( $\pm 1, 0, \pm 1$ ), (0, $\pm 1, \pm 1$ ) | 12         | $\sqrt{2}$              | 1/36       |
| D3Q27   | (0, 0, 0)  | 1          | 0                       | 8/27       |
|         | ( $\pm 1, 0, 0$ ), (0, $\pm 1, 0$ ), (0, 0, $\pm 1$ )              | 6          | 1                       | 2/27       |
|         | ( $\pm 1, \pm 1, 0$ ), ( $\pm 1, 0, \pm 1$ ), (0, $\pm 1, \pm 1$ ) | 12         | $\sqrt{2}$              | 1/54       |
|         | ( $\pm 1, \pm 1, \pm 1$ )  | 8          | $\sqrt{3}$              | 1/216      |

Fonte: Krüger et al. (2017, p. 88)

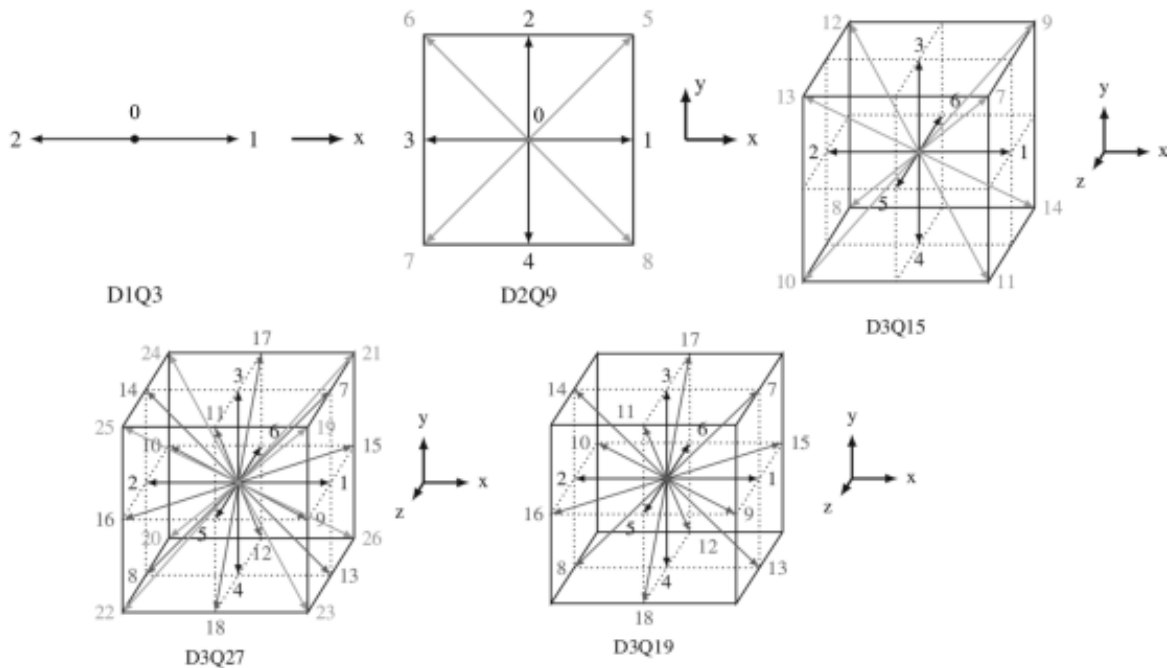
$$\sum_i c_{i\alpha} f^{eq} = \rho u_\alpha, \quad (2.38b)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} f^{eq} = \rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}. \quad (2.38c)$$

Outros conjuntos de velocidades com  $c_s^2 = 1/3$  também são possíveis, como o D3Q15 e D3Q19. As propriedades desses conjuntos de velocidades estão apresentados na Tab. 2, e suas representações esquemáticas são exibidas na Fig. 3.

Vale salientar que os procedimentos de Shan, Yuan e Chen (2006) e Philippi et al. (2006) também respeitam as condições da Eq. (2.37) e podem ser utilizados até para expandi-las. Através de seus procedimentos, conjuntos de velocidades com maior isotropia foram propostos como D2Q17 e D2Q37. Com esses reticulados, a equação de conservação de energia pode ser recuperada, a custo de um aumento de processamento e armazenamento, dado o maior número de pesos e velocidades.

Figura 3 – Representação esquemática dos principais conjuntos de velocidades utilizados na literatura.



Fonte: Krüger et al. (2017, p. 78)

#### 2.2.4 Discretização no espaço-tempo

A Eq. (2.34) é contínua na posição  $\mathbf{x}$  e no tempo  $t$ . A influência das forças externas serão discutidas em seções posteriores. Assim, por hora, pode-se escrevê-la da seguinte forma:

$$\left( \frac{\partial f_i}{\partial t} \right) + c_{i\beta} \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_\beta} \right) = \Omega(f_i). \quad (2.39)$$

Enquanto o primeiro termo no lado esquerdo está associado à variação local com relação ao tempo, o segundo termo no lado esquerdo da Eq. (2.39) representa uma advecção da função  $f$  na velocidade constante da partícula  $c_i$ . Para solucionar esse tipo de equação, pode-se empregar o método das características. Nele, é possível definir uma curva paramétrica  $(x(\zeta), t(\zeta))$ , tal que:

$$\frac{dt}{d\zeta} = 1, \quad \frac{dx_\alpha}{d\zeta} = c_{i\alpha}. \quad (2.40)$$

Dessa forma, pode-se reescrever o lado esquerdo de Eq. (2.39) como uma derivada total em relação ao parâmetro da curva característica  $\zeta$ , ou seja,  $\frac{df}{d\zeta}$ . Assim, podemos realizar a integração ao longo da linha característica para um instante de tempo  $\Delta t$ , de forma que obtemos:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \int_t^{t+\Delta t} \Omega_i(\mathbf{x}(\zeta), t(\zeta)) d\zeta. \quad (2.41)$$

Podemos resolver o termo da integral da Eq. (2.41) através da integração numérica via regra dos retângulos:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t \Omega_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.42)$$

O método explícito acima é o método de Boltzmann em rede ou método de *lattice* Boltzmann. Por termos utilizado um esquema de primeira ordem no tempo, é razoável esperar que a ordem obtida final seja também regida pela magnitude desse erro. No entanto, podemos empregar na integral da Eq. (2.41) a regra trapezoidal, que é uma integração numérica de segunda ordem. Com isso, obtemos:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t \frac{\Omega(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) + \Omega_i(\mathbf{x}, t)}{2}. \quad (2.43)$$

Ao utilizar a regra do trapézio, chegamos a um método implícito. No entanto, é possível eliminar esse caráter da equação utilizando uma definição modificada:

$$\bar{f}_i = f_i - \frac{\Delta t}{2} \Omega_i, \quad (2.44)$$

de forma que a Eq. (2.43) pode ser reescrita como:

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t \bar{\Omega}_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.45)$$

A Eq. (2.45) possui o mesmo formato da Eq. (2.42), de maneira que o algoritmo de implementação pode ser o mesmo do método explícito. No entanto, vale ressaltar que para a obter o formato final da equação, o termo de colisão  $\Omega(f)$  também deve ser reescrito em termos da nova definição  $\bar{f}$ . Além disso, deve-se ficar atento ao cálculo dos momentos em função dessa nova definição, principalmente, no caso em que houver termos fontes. Para o operador BGK sem a influência da força, a equação discretizada obtida é dada por:

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\bar{\tau}} (\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)), \quad (2.46)$$

sendo o tempo de relaxação também redefinido  $\bar{\tau} = \tau + \Delta t/2$ , em que  $\bar{\tau}/\Delta t$  é denominado por muitos autores como o tempo de relaxação adimensional. Neste trabalho, empregamos o esquema de segunda ordem, mas por simplicidade continuaremos com a nomenclatura original para a função de distribuição  $f$ .

### 2.2.5 Inclusão dos termos de forças externas

A influência dos campos de forças externas na equação de Boltzmann (Eq. (2.8)) é dada pelo termo  $\frac{F_\beta}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta}$ . A inclusão da influência desses termos segue o mesmo caminho de discretização apresentado para o método de Boltzmann em rede nas seções anteriores. Ou seja, em primeiro passo, escrevemos o termo como uma expansão nos polinômios de Hermite:

$$\frac{F_\beta}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} \approx \left( \frac{1}{2\pi RT_0} \right)^{(D/2)} \exp(-\boldsymbol{\xi}_0^2/2) \sum_{n=0}^N \frac{1}{n!} a_\alpha^{(n)} \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_0), \quad (2.47)$$

em que  $a_\alpha^{(n)}$  é calculado pela projeção nos polinômios:

$$a_\alpha^{(n)} = \int \frac{F_\beta}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \xi_\beta} \mathcal{H}_\alpha^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_0) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.48)$$

Para os três primeiros polinômios de Hermite,  $H^{(0)} = 1$ ,  $H^{(1)} = \xi_\alpha$ ,  $H^{(2)} = \xi_\alpha \xi_\beta - \delta_{\alpha\beta}$ , os coeficientes são, respectivamente,  $a^{(0)} = 0$ ,  $a^{(1)} = -F_\alpha$ ,  $a^{(2)} = -(F_\alpha u_\beta + F_\beta u_\alpha)$ . Com essa representação de segunda ordem, os mesmos conjuntos de velocidades utilizados para discretização da equação de Boltzmann podem ser empregados. Pelos expoentes serem negativos, é prática comum que o termo de força seja inserido como um termo fonte no lado direito da equação, de forma que:

$$\left( \frac{\partial f_i}{\partial t} \right) + c_{i\beta} \left( \frac{\partial f_i}{\partial x_\beta} \right) = \Omega_i + F_i, \quad (2.49)$$

sendo  $F_i$  a representação até segunda ordem da expansão de Hermite:

$$F_i = w_i \left( \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} F_\alpha + \frac{c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} (F_\alpha u_\beta + F_\beta u_\alpha) \right). \quad (2.50)$$

O mesmo procedimento de discretização de espaço-tempo exibido na Seção 2.2.4 pode ser aplicado. Aqui, vale ressaltar que a redefinição para o esquema de discretização de segunda ordem temporal é dada por:

$$\bar{f}_i = f_i - \frac{\Delta t}{2} (\Omega_i + F_i). \quad (2.51)$$

Dessa forma, os momentos do termo  $F_i$  devem ser levados em conta quando são calculados os momentos da função  $\bar{f}_i$ . Na prática, o momento de ordem zero permanece inalterado, mas especialmente o momento de ordem 1 torna-se  $\sum c_{i\alpha} \bar{f}_i = \rho u_\alpha - \Delta t F_\alpha / 2$ . Para o operador de colisão BGK, o método final se resume à equação:

$$\bar{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\Delta t}{\bar{\tau}} (\bar{f}_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \left( 1 - \frac{\Delta t}{2\bar{\tau}} \right) F_i. \quad (2.52)$$

É importante ressaltar que esses procedimentos via expansão em séries de Hermite e a conexão com a equação de Boltzmann não foram os primeiros caminhos utilizados na literatura para definição do método. A inclusão de forças externas sempre foi de grande interesse para simulação de diversos problemas como, por exemplo, instabilidades de Rayleigh-Taylor ou Rayleigh-Bernard, sujeitas a um campo gravitacional, fluidos em referenciais rotativos, fluidos com partículas magnéticas, comportamento de ondas em superfícies livres (KRÜGER et al., 2017). Além disso, também há condições de contorno que simulam interação fluido-estrutura que podem ser implementadas via força. Também, como será mostrado posteriormente, pode-se adicionar forças responsáveis por gerar uma equação de estado não-monotônica, e com isso, simular escoamentos com mais de uma fase.

Dado o interesse para solução de diferentes problemas, diversos esquemas de força foram propostos ao longo do desenvolvimento do método. A formulação apresentada pelas Eqs. (2.50)

e (2.52) é conhecido como o método de Guo, Zheng e Shi (2002). Nesse trabalho, os autores realizaram uma análise dos erros de discretização na equação macroscópica final considerando um esquema genérico, e definiram quais deveriam ser os coeficientes para que os termos de erro se tornassem nulos. Assim, o método de Guo, Zheng e Shi (2002) é conhecido por conseguir recuperar as equações de Navier-Stokes até a segunda ordem temporal.

Muitas estratégias para se incluir os efeitos das forças consistiam em aplicar mudanças nas velocidades (*velocity shifting*), tanto na velocidade de equilíbrio, utilizada no cálculo de  $f^{eq}$  quanto na velocidade do termo de forças  $F_i$ . Entre os principais métodos propostos que se utilizaram dessa estratégia, pode-se citar o método de Shan e Chen (1993), que também propuseram uma força intermolecular capaz de simular escoamentos bifásicos. He, Shan e Doolen (1998) apresentaram seu método de força com objetivo de estudar efeitos térmicos, através de simulações de convecção de Rayleigh-Bernard. Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009), com intuito de corrigir o acoplamento entre a curva de saturação e o fator de relaxação do método de Shan e Chen (1993), também desenvolveram um novo método de forças. Ladd e Verberg (2001) fizeram uma formulação própria para se incluir o termo de força ao estudar fluidos com partículas suspensas.

Para se comparar a formulação de todos esses esquemas com o operador BGK, podemos diferenciar a velocidade da função de equilíbrio  $\mathbf{u}^{eq}$  da velocidade do esquema de força  $\bar{\mathbf{u}}$ , tal que um esquema genérico de ser escrito como:

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - f_i(t, \mathbf{x}) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_i(t, \mathbf{x}) - f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}^{eq})] + F_i(\bar{\mathbf{u}}), \quad (2.53)$$

sendo

$$F_i = w_i \left( A \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} F_\alpha + B \frac{c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} (F_\alpha \bar{u}_\beta + F_\beta \bar{u}_\alpha) \right), \quad (2.54)$$

e as velocidades modificadas dadas por:

$$\rho \mathbf{u}^{eq} = \sum c_{i\alpha} f_i + m \Delta t \mathbf{F}, \quad \rho \bar{\mathbf{u}} = \sum c_{i\alpha} f_i + n \Delta t \mathbf{F}. \quad (2.55)$$

Os coeficientes  $A, B, m, n$  para cada um desses métodos são resumidos na Tab. 3. A influência do uso de cada um desses métodos é objeto de estudo do trabalho presente e será discutida mais adiante.

Fonte: Elaborado pelo autor.

## 2.2.6 Unidades de rede

Definido o esquema numérico após discretização do espaço de velocidades, espaço e tempo, iremos discutir brevemente sobre uma particularidade do LBM. Na literatura, é muito comum utilizar um conjunto de unidades denominada unidades de rede. Nesse sistema, convencionase que  $\Delta t = \Delta x = 1$ . Dessa forma, o conjunto de velocidades são todos vetores unitários e a

Tabela 3 – Coeficientes de modificação de velocidade de equilíbrio  $m$ , da velocidade da força  $n$ , e coeficientes relacionados aos momentos de primeira ( $A$ ) e segunda ordem ( $B$ ) para os principais esquemas de forças da literatura.

| Esquema de força                      | $m$ | $n$      | $A$             | $B$             |
|---------------------------------------|-----|----------|-----------------|-----------------|
| Shan e Chen (1993)                    | 0   | $\tau/2$ | 1               | 1               |
| He, Shan e Doolen (1998)              | 1/2 | 1/2      | $1 - 1/(2\tau)$ | $1 - 1/(2\tau)$ |
| Guo, Zheng e Shi (2002)               | 1/2 | 1/2      | $1 - 1/(2\tau)$ | $1 - 1/(2\tau)$ |
| Ladd e Verberg (2001)                 | 0   | 0        | 1               | 1               |
| Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) | 0   | 1/2      | 1               | 1               |

implementação computacional consiste em realizar o cálculo do operador de colisão, atualizar a função de distribuição e propagar o seu valor ao seu nó adjacente. O emprego desse sistema de unidades tem relação com as origens do LBM no método LGCA, em que variáveis booleanas eram empregadas, de forma que a implementação da propagação de valores do LBM em unidades de rede é basicamente idêntica à do LGCA.

As variáveis em unidades de rede podem ser comparadas às unidades físicas de duas maneiras. A primeira seria comparar os números adimensionais relevantes, tanto nas unidades físicas quanto em unidades de rede. Com isso, garante-se que a simulação consegue representar fisicamente o problema de interesse. Uma outra forma é realizando a conversão entre as unidades de rede e unidades físicas, utilizando fatores de conversão  $C_{\Theta}$  para um campo escalar qualquer  $\Theta$ . Na Tab. 4, as conversões para as principais grandezas são exibidas, em que as unidades de rede são representadas pelo superscrito \*.

Tabela 4 – Conversão entre as unidades físicas e unidades de rede, descritas como um superscrito \*.

| Grandeza física                 | Conversão                                 |
|---------------------------------|---|
| Comprimento [L]                 | $x = x^*C_L$                              |
| Tempo [T]                       | $t = t^*C_T$                              |
| Velocidade [T/L]                | $u = u^*C_L/C_T$                          |
| Viscosidade [T <sup>2</sup> /L] | $\nu = \nu^*C_L^2/C_T$                    |
| Densidade [M/L <sup>3</sup> ]   | $\rho = \rho^*C_{\rho}$                   |
| Pressão [M/(LT)]                | $\Delta p = \Delta p^*C_T/(C_L C_{\rho})$ |

Fonte: Elaborado pelo autor.

Utilizando a convenção de unidades de rede, os fatores de conversão  $C_L$  e  $C_T$  são, respectivamente, iguais ao espaçamento espacial,  $\Delta x$ , e temporal,  $\Delta t$ . O uso das unidades de rede é bem estabelecido na literatura. No entanto, recentemente, alguns estudos trouxeram algumas

inconsistências quando empregado de qualquer maneira para o método do pseudopotencial (WANG et al., 2022). Esse assunto será retomando em seções posteriores.

### 2.2.7 Comportamento macroscópico do método de Boltzmann em rede

Durante este capítulo, foram discutidos os trabalhos e técnicas que mostram que o método de Boltzmann em rede pode ser derivado da teoria cinética. No entanto, ainda resta uma etapa, que consiste em definir qual comportamento macroscópico que o método algébrico final descreve. A equação de Boltzmann, ponto de partida de todo o trabalho exposto, consegue descrever as equações de Navier-Stokes com o operador BGK. No entanto, ainda resta saber se as discretizações realizadas para se chegar ao método de Boltzmann em rede incluíram algum efeito significativo nas equações recuperadas.

Essa conexão entre o LBM e sua correspondente descrição macroscópica pode ser realizada por diferentes técnicas. Para citar algumas delas, temos a expansão assintótica (SONE, 2002; INAMURO; YOSHINO; OGINO, 1997; JUNK; KLAR; LUO, 2005), expansão por Hermite proposta por Grad (1949), e métodos envolvendo representações recursivas da equação de Boltzmann em rede juntamente com expansões em séries de Taylor (HOLDYCH et al., 2004; GINZBURG, 2008; DUBOIS, 2008). No entanto, o mais comum na literatura é utilizar a expansão múltipla escala de Chapman-Enskog. Algumas dessas técnicas utilizam uma interpretação física da equação para seu desenvolvimento, enquanto outras, principalmente as que se baseiam em expansão por série de Taylor, possuem um viés mais técnico, realizando desdobramentos algébricos ao aplicar conceitos matemáticos bem estabelecidos. Apesar disso, Caiazzo, Junk e Rheinländer (2009) mostraram que todos esses procedimentos possuem equivalência quando consideradas expansões até a mesma ordem.

O primeiro passo para demonstrarmos a equação macroscópica recuperada a partir do método é expandir sua equação discretizada em série de Taylor:

$$(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)f_i + \frac{\Delta t}{2}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)^2 f_i + O(\Delta t^2) = \Omega_i + F_i. \quad (2.56)$$

Para simplificarmos o termo  $(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)^2 f_i$ , primeiramente aplicamos o operador  $(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)$  sobre a Eq. (2.56):

$$(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)^2 f_i + \frac{\Delta t}{2}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)^3 f_i + O(\Delta t^2) = (\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)(\Omega_i + F_i). \quad (2.57)$$

Substituindo o resultado da Eq. (2.57) na Eq. (2.56), temos:

$$(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)f_i + \frac{\Delta t}{2}(\partial_t + c_{i\alpha}\partial_\alpha)(\Omega_i + F_i) + O(\Delta t^2) = \Omega_i + F_i. \quad (2.58)$$

Note que, se desprezarmos os termos de segunda ordem  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ , a diferença entre a equação discretizada apenas no espaço de velocidades, Eq. (2.49), e a Eq. (2.58) é dada pelos termos referentes a  $\mathcal{O}(\Delta t)$ . Essa diferença ocorre, portanto, devido ao processo de discretização

do espaço-tempo. Logo, a princípio, poderíamos esperar um erro dessa magnitude, mas veremos como isso é contornado.

O próximo passo é realizar a expansão em múltipla escala segundo as hipóteses de Chapman-Enskog até os termos de segunda ordem em  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} \partial_t &= \epsilon \partial_t^{(1)} + \epsilon^2 \partial_t^{(2)}, & f_i &= f_i^{eq} + \epsilon f_i^{(1)} + \epsilon^2 f_i^{(2)}, & F_i &= \epsilon F_i^{(1)}. \\ \partial_\alpha &= \epsilon \partial_\alpha^{(1)}, & \Omega_i &= \epsilon \Omega_i^{(1)} + \epsilon^2 \Omega_i^{(2)}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

Aplicando essas expansões à Eq. (2.58) e separando os termos pertencentes às ordens  $\mathcal{O}(\epsilon)$  e  $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ , obtemos as seguintes equações:

$$\mathcal{O}(\epsilon) : \quad (\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}) f_i^{eq} = \Omega_i^{(1)} + F_i^{(1)}, \quad (2.60a)$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^2) : \quad \partial_t^{(2)} f_i^{eq} + (\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}) f_i^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} (\partial_t^{(1)} + c_{i\alpha} \partial_\alpha^{(1)}) (\Omega_i^{(1)} + F_i^{(1)}) = \Omega_i^{(2)}. \quad (2.60b)$$

O operador de colisão deve respeitar a conservação de quantidade de massa e movimento em todas as ordens da expansão, ou seja,  $\sum \Omega_i^{(n)} = 0$  e  $\sum c_{i\alpha} \Omega_i^{(n)} = 0$ . Como estamos lidando com a função de distribuição redefinida de acordo com a Eq. (2.51), essas condições se traduzem como (KRÜGER et al., 2017):

$$\sum_i f_i^{(1)} = -\frac{\Delta t}{2} \sum_i F_i^{(1)} \quad \text{e} \quad \sum_i f_i^{(k)} = 0, \quad (2.61a)$$

$$\sum_i c_{i\alpha} f_i^{(1)} = -\frac{\Delta t}{2} \sum_i c_{i\alpha} F_i^{(1)} \quad \text{e} \quad \sum_i c_{i\alpha} f_i^{(k)} = 0, \quad (2.61b)$$

para  $k \geq 2$ . Com isso, ao multiplicarmos as Eqs. (2.60a) e (2.60b) por 1,  $c_{i\alpha}$  e  $c_{i\alpha} c_{i\beta}$  e somar em todas as velocidades  $i$ , podemos calcular os momentos de ordem, respectivamente, 0, 1 e 2 de cada equação. Esses cálculos envolvem os momentos da função de equilíbrio que são funções das variáveis macroscópicas, como mostrado nas Eqs. (2.38). Iniciando com a Eq. (2.60a), relativa à  $\mathcal{O}(\epsilon)$ , os momentos de ordem 0 e 1 são dados, respectivamente, por:

$$\partial_t^{(1)} \rho + \partial_\alpha^{(1)} (\rho u_\alpha) = 0, \quad (2.62a)$$

$$\partial_t^{(1)} (\rho u_\beta) + \partial_\alpha^{(1)} (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2) = F_\beta^{(1)}. \quad (2.62b)$$

Fazendo esses mesmos momentos para Eq. (2.60b), obtemos as seguintes equações:

$$\partial_t^{(2)} \rho = 0, \quad (2.63a)$$

$$\partial_t^{(2)} (\rho u_\beta) + \partial_\alpha^{(1)} \left[ \sum c_{i\alpha} c_{i\beta} \left( f_i^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} F_i^{(1)} \right) \right] + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha^{(1)} \left[ \sum c_{i\alpha} c_{i\beta} \Omega_i^{(1)} \right] = 0. \quad (2.63b)$$

O momento de ordem 2 de  $\Omega_i^{(1)}$  pode ser encontrado através do cálculo do momento de ordem 2 da Eq. (2.60a):

$$\partial_t^{(1)} (\rho u_\alpha u_\beta + \rho c_s^2) + \partial_\gamma^{(1)} \Pi_{\alpha\beta\gamma}^{eq} = \sum c_{i\alpha} c_{i\beta} \Omega_i^{(1)} + F_\alpha u_\beta + F_\beta u_\alpha, \quad (2.64)$$



em que o momento de terceira ordem da  $f^{\text{eq}}$  é dado por:

$$\Pi_{\alpha\beta\gamma}^{\text{eq}} = \rho c_s^2 (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}). \quad (2.65)$$

A Eq. (2.64) pode ser simplificada com o auxílio das Eqs. (2.62a) e (2.62b), chegando-se ao resultado:

$$\sum c_{i\alpha} c_{i\beta} \Omega_i^{(1)} = \rho c_s^2 \left( \partial_\beta^{(1)} u_\alpha + \partial_\alpha^{(1)} u_\beta \right) - \partial_\gamma^{(1)} (\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma). \quad (2.66)$$

O termo  $\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma$  corresponde a um termo da ordem  $\mathcal{O}(u^3)$ , e está relacionado com a ordem de truncamento da expansão de Hermite da função de equilíbrio. Nesse caso, a representação de segunda ordem não é capaz de recuperar os termos  $\mathcal{O}(u^3)$ . No entanto, para escoamentos com baixas velocidades, ou seja, com número de Mach  $\text{Ma} = u/c_s^2 \ll 1$ , esses erros são desprezíveis (LATT, 2007; KRÜGER et al., 2017).

Para recuperar a equação macroscópica, devemos agora reverter as expansões realizadas anteriormente. Isso é feito multiplicando a Eq. (2.62a) por  $\epsilon$ , somando com o produto entre a Eq. (2.63a) e  $\epsilon^2$ , e utilizando as igualdades apresentadas na Eq. (2.59). O mesmo procedimento é realizado para as Eqs. (2.62b) e (2.63b). O resultado é dado pelas equações:

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0, \quad (2.67a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\beta) + \partial_\alpha (\rho u_\alpha u_\beta) &= -\partial_\beta (\rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta}) + F_\alpha + \\ &- \partial_\alpha \epsilon \left[ \sum c_{i\alpha} c_{i\beta} \left( f_i^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} F_i^{(1)} \right) \right] - \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha \epsilon \left[ \sum c_{i\alpha} c_{i\beta} \Omega_i^{(1)} \right]. \end{aligned} \quad (2.67b)$$

Aqui já notamos algumas características interessantes. Por exemplo, a Eq. (2.67a) nos mostra a capacidade do método em recuperar a equação de conservação de massa. Além disso, na Eq. (2.67b), conseguimos notar semelhanças do comportamento com a conservação da quantidade de movimento. Por exemplo, consegue-se notar que o termo responsável pela pressão termodinâmica é dado por  $\rho c_s^2$ . Inclusive, a justificativa para o nome da variável  $c_s^2$  vem desse comportamento, uma vez que a velocidade do som sob a hipótese isotérmica é dada por:

$$\text{velocidade do som} = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}} = \sqrt{\frac{\partial (\rho c_s^2)}{\partial \rho}} = c_s. \quad (2.68)$$

Outro ponto é que, pela Eq. (2.66), é possível notar que esse termo possui um comportamento do tensor de tensões viscosas, com semelhança ao obtido no caso da equação contínua, Eq. (2.26). Para a determinação completa das equações macroscópicas, ainda é necessário definir o termo  $\sum c_{i\alpha} c_{i\beta} f_i^{(1)}$ . Essa definição é dependente do operador de colisão que está sendo utilizado. No entanto, uma última observação a ser feita, antes de entrarmos no estudo do operador de colisão, é ressaltar que basicamente todas as relações obtidas no procedimento de expansão

de Chapman-Enskog estão fortemente relacionadas com o cálculo de momentos da função de distribuição de equilíbrio. Ou seja, em última análise, o comportamento do método depende do operador de colisão e da função de equilíbrio.

Esse fato já era conhecido antes mesmo da derivação do LBM a partir da teoria cinética, de forma que diferentes formatos de função de equilíbrio foram desenvolvidas, visando apenas o comportamento final pretendido. Como exemplos, tem-se uma função linearizada com termos apenas até  $\mathcal{O}(u)$ , para estudo de propagação de ondas sonoras (VIGGEN, 2014), e a função de equilíbrio para estudo de escoamento incompressível (ZOU et al., 1995; HE; LUO, 1997a).

Dessa forma, o método de Boltzmann em rede também pode ser visto como um conjunto de equações algébricas capazes de replicar um comportamento macroscópico desejado. Esta perspectiva não se preocupa com as interpretações físicas e a conexão com a teoria cinética, mas com o conjunto macroscópico recuperado. Ainda que haja ressalvas, esse tipo de análise também é válida, e importante para trazer extensões ao método de Boltzmann em rede.

### 2.2.7.1 Operador BGK

Ao reescrevermos o operador de colisão BGK de acordo com a definição modificada da Eq. (2.51), e aplicando as expansões da Eq. (2.59), é possível mostrar a seguinte relação:

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left( f_i^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} F_i^{(1)} \right) = -\tau \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \Omega_i^{(1)}. \quad (2.69)$$

Substituindo a relação da Eq. (2.69) na Eq. (2.67b), conseguimos definir as equações macroscópicas:

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho u_\gamma) = 0, \quad (2.70a)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\beta p \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta [\mu (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta)] + F_\alpha, \quad (2.70b)$$

em que:

$$\begin{aligned} p &= \rho c_s^2, \\ \mu &= \rho c_s^2 \left( \tau - \frac{\Delta t}{2} \right), \\ \eta_B &= \frac{2\mu}{3}. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Comparando os coeficientes da Eq. (2.70) com aqueles recuperados a partir da equação de Boltzmann, descritos na Eq. (2.28), notamos duas diferenças principais. O primeiro é o termo da viscosidade, que possui uma relação com  $\Delta t$ . Aqui, nota-se que a discretização, realmente traz erros importantes da ordem de  $\mathcal{O}(\Delta t)$ , como havíamos comentado na comparação entre a expansão de série de Taylor do LBM, Eq. (2.58), e a equação de Boltzmann, Eq. (2.49). Contudo, esses termos podem ser incluídos na própria definição dos coeficientes de transporte, fazendo com que o método se torne efetivamente  $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ . A segunda diferença ocorre com o coeficiente de viscosidade volumétrica que, segundo Dellar (2001), ocorre devido à hipótese isotérmica assumida durante a discretização no espaço de velocidades.

### 2.2.8 Operador de múltiplos tempos de relaxação

O operador de colisão  $\Omega_i$  pode ser estendido para uma classe mais geral de operadores de colisão, denominados de múltiplos tempos de relaxação ou *multiple relaxation time* (MRT). Nessa caso, o operador  $\Omega$  toma a forma de uma matriz diagonalizável  $\Omega_{ij}$  de  $q \times q$ , sendo  $q$  o número de velocidades discretizadas, da seguinte forma:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Delta t \sum_j \Omega_{ij} (f_j - f_j^{\text{eq}}). \quad (2.72)$$

Dado que a matriz é diagonalizável, é possível encontrar uma transformação tal que  $\Omega = M^{-1} \Lambda M$ , em que  $\Lambda$  é uma matriz diagonal que representa os autovalores de  $\Omega$ . Dessa forma, a evolução da função de distribuição é descrita:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = M^{-1} \Lambda M (f - f^{\text{eq}}), \quad (2.73)$$

sendo muito comum representar a equação no espaço de momentos:

$$\mathbf{m}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) = \Lambda (\mathbf{m} - \mathbf{m}^{\text{eq}}), \quad (2.74)$$

em que  $\mathbf{m} = M_{ij} f_j$ .

A base de autovetores que compõem a matriz  $M$  pode ser obtida de diversas maneiras (LATT, 2007), sendo as mais comuns através dos próprios polinômios de Hermite ou pelo processo de Gram-Schmidt. De qualquer forma, estas combinações lineares da função  $f$  resultam em momentos  $\mathbf{m}$  que possuem significado físico, como a própria densidade  $\rho$ , e os campos de velocidades  $u_\alpha$ , ou valores relacionados à pressão. Os momentos que não tem relação com as variáveis macroscópicas são chamados de não-hidrodinâmicos ou fantasmas, mas, apesar disso, possuem relação com a estabilidade do método (BENZI; SUCCI; VERGASSOLA, 1992; DELLAR, 2002; KRÜGER et al., 2017).

O operador BGK pode ser interpretado como um caso particular em que a matriz de relaxação  $\Lambda = -1/\tau \mathbf{I}$ , ou seja, todos os momentos são relaxados com o mesmo fator. Os operadores de múltipla relaxação, portanto, tem o objetivo de relaxar cada um dos momentos por um fator diferente, com o intuito de modificar o comportamento macroscópico e/ou aumentar a estabilidade do método (D'HUMIÈRES, 1992). As definições das matrizes  $M$ ,  $M^{-1}$ ,  $\Lambda$  e  $\mathbf{m}^{\text{eq}}$  para o conjunto D2Q9 se encontram no Apêndice B.

Através da definição do operador de colisão, pode-se encontrar a sua relação com as funções de distribuições e, a partir disso, é possível mostrar que os termos de  $\mathcal{O}(\epsilon)$  buscados, para o caso bidimensional, são dados por:

$$\sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \left( f_i^{(1)} + \frac{\Delta t}{2} F_i^{(1)} \right) = -\tau \sum_i c_{i\alpha} c_{i\beta} \Omega_i^{(1)} + \frac{\omega_e - \omega}{2} \sum_i c_{i\gamma} c_{i\gamma} \Omega_i^{(1)}, \quad (2.75)$$

em que a frequência de relaxação  $\omega = \tau^{-1}$ , e  $\omega_e$  é a frequência relacionada a viscosidade volumétrica. Substituindo essa relação na análise de Chapman-Enskog, Eq. (2.67b), é possível

mostrar que as equações macroscópicas obtida são dadas por:

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho u_\gamma) = 0, \quad (2.76a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = & -\partial_\beta p \delta_{\alpha\beta} + \\ \partial_\beta \left[ \mu (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta) + \left( \eta_\beta - \frac{2\mu}{3} \right) \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma \right] + & F_\alpha, \end{aligned} \quad (2.76b)$$

em que:

$$\begin{aligned} p &= \rho c_s^2, \\ \mu &= \rho c_s^2 \left( \tau - \frac{\Delta t}{2} \right), \\ \eta_B &= \rho c_s^2 \left( \frac{1}{\omega_e} - \frac{1}{2} \right) - \frac{\mu}{3}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Com o novo parâmetro, é possível controlar a viscosidade volumétrica  $\eta_\beta$  para qualquer valor conveniente. Além disso, os outros parâmetros de relaxação que não aparecem na equação macroscópica final, como relatados, conseguem estabilizar o método para escoamentos com altos números de Reynolds (KRÜGER et al., 2017).

É importante comentar que apesar desses dois operadores de colisão serem os mais conhecidos e utilizados, existem diferentes propostas de cálculo deste operador. Entre alguns exemplos, pode-se citar:

- o operador de colisão regularizado (LATT, 2007), que faz uma análise das partes de equilíbrio e não-equilíbrio da função de distribuição;
- o operador de dois tempos de relaxação, ou *two relaxation time (TRT) model* (TRT) (GINZBURG; VERHAEGHE; D'HUMIERES, 2008), que pode ser interpretado como uma versão simplificada do MRT, o operador entrópico (BOGHOSIAN et al., 2001a), baseado em algumas características do operador original da teoria cinética;
- o operador proposto por Asinari et al. (2012), que utiliza algumas técnicas de diferenças finitas;
- o operador de colisão entrópico (BOGHOSIAN et al., 2001b; CHIKATAMARLA; KARLIN et al., 2015) baseado no conceito de minimização da função de entropia encontrada a partir da teoria cinética.

### 2.2.9 Erros de discretização

A análise de Chapman-Enskog permite analisar a equação macroscópica recuperada. No entanto, para se encontrar a ordem dos erros, essas análises precisam ser realizadas sem desprezar os termos de alta ordem. Com isso, é possível perceber que a análise é mais complexa que aquelas utilizadas em mecânica dos fluidos computacional tradicionalmente, uma vez que o método não é uma discretização direta das equações de Navier-Stokes. Uma análise completa

pode ser vista no trabalho de Latt (2007). Porém, podemos escrever o termo de erro em relação à equação de Navier-Stokes da seguinte forma:

$$E = E_{\Delta x} + E_{\Delta t} + E_{Ma} = \mathcal{O}(\Delta x^2, \tau) + \mathcal{O}(\Delta t^2, \tau) + \mathcal{O}(\Delta t^2/\Delta x^2), \quad (2.78)$$

em que  $E_{\Delta x}$  são os erros espaciais,  $E_{\Delta t}$ , os erros temporais e  $E_{Ma}$ , os erros de compressibilidade.

De modo geral, tanto os erros espaciais quanto temporais são de segunda ordem, mas é necessário lembrar que eles também dependem de uma função polinomial dos parâmetros de relaxação da simulação, no caso do operador BGK, o fator de relaxação  $\tau$  (GINZBURG, 2008; HOLDYCH et al., 2004). Os termos de compressibilidade,  $E_{Ma}$  estão relacionados com a expansão da função de equilíbrio até  $\mathcal{O}(u^2)$ . Os erros de compressibilidade possuem um papel importante para escoamentos em que a velocidade do som é relevante. Nesses casos, quando se mantém o número de Mach constante, os erros de compressibilidade podem ser dominantes, e não é possível reduzi-los, mesmo se refinando a malha.

Assim, para que a convergência quadrática seja alcançada, é necessário fazer um refinamento juntamente com a redução  $Ma$  simulado. Isso é possível em escoamentos incompressíveis, que não há grandes problemas em se alterar o número de Mach, desde que esteja dentro da região incompressível, i.e.  $Ma < 0.3$ . Essa estratégia leva a um relação  $\Delta t \propto \Delta x^2$ , chamada de escala difusiva. Essa proporcionalidade pode ser alcançada mantendo-se o fator de relaxação,  $\tau$ , constante durante o refinamento. Geralmente, valores de  $\tau \approx 1$  são utilizados, por estarem em uma região estável e com erros razoáveis relacionados aos fatores de relaxação do operador colisão (HOLDYCH et al., 2004; KRÜGER et al., 2017).

### 2.3 Método do pseudopotencial

Na Seção 2.2, mostramos as características do LBM, sua relação com a teoria cinética e as equações macroscópicas para os operadores de colisão, BGK e MRT. No entanto, até então foi mostrado que a equação de estado final é uma função monotônica da densidade,  $p = \rho c_s^2$ . Esse comportamento é semelhante ao de um gás ideal sob a hipótese isotérmica. No entanto, para conseguir simular fluidos não-ideais, é necessário uma equação de estado não-monotônica e, com isso, admitir solução com duas densidades distintas, cada uma referente a uma das fases para uma mesma pressão.

A extensão do LBM para conseguir simular a coexistência de duas ou mais fases de um fluido sempre despertou interesse e, por isso, surgiram diferentes propostas. O primeiro modelo foi proposto por Gunstensen et al. (1991), baseado no modelo LGCA de Rothman e Keller (1988). Também conhecido como gradiente de cores, a ideia era representar cada fase por uma cor e impor a lei de Laplace por uma força externa.

A segunda proposta para simulação de escoamentos multifásicos foi dada por Shan e Chen (1994), em que uma força de interação intermolecular é adicionada na simulação. Essas interações não locais mostraram-se capazes de replicar comportamentos interessantes de equilíbrio

e mudança de fase. Outro modelo de destaque foi proposto por Swift et al. (1996), em que o comportamento de um fluido não-ideal é imposto através de modificações da função de distribuição de equilíbrio,  $f^{eq}$ . Essas modificações são feitas de modo a recuperar uma equação macroscópica desejada, obtida através da minimização da energia livre de um sistema com duas fases coexistentes. Por essa razão, esse método também é chamado de método da energia livre.

Mais tarde, He, Shan e Doolen (1998) propuseram uma modelagem de um fluido não-ideal em nível mesoscópico, através de um potencial médio. Com isso, encontraram termos que deveriam ser adicionados à equação de Boltzmann que, quando discretizados, eram semelhantes a um termo de força externa.

Cada um desses métodos possuem características, vantagens e desvantagens inerentes, e vem sendo aprimorados desde as suas formulações originais. Neste trabalho, iremos focar no estudo do método do pseudopotencial.

### 2.3.1 Formulação original do método do pseudopotencial

Proposto inicialmente por Shan e Chen (1994), o método do pseudopotencial foi baseado em um trabalho dos próprios autores feito anteriormente Shan e Chen (1993), em que estudaram escoamentos multicomponentes através de um potencial médio. Eles perceberam que esse potencial era capaz de replicar o comportamento de uma curva de saturação para fluidos monocomponentes. No trabalho original, a força intermolecular é calculada através de um potencial  $\psi$ , por:

$$\mathbf{F}^{int}(\mathbf{x}) = - \int (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) K(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (2.79)$$

em que  $\mathbf{x}$  é uma posição qualquer, e  $\mathbf{x}'$  representa uma posição na vizinhança de  $\mathbf{x}$ , ou seja,  $|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \neq 0$ . A função *kernel*  $K(\mathbf{x}', \mathbf{x})$  contém a informação da dependência espacial da interação intermolecular e a função  $\psi(\mathbf{x})$  é chamada de função pseudopotencial. A interpretação da Eq. (2.79) é de que força intermolecular na posição  $\mathbf{x}$  depende da quantidade de partículas presentes nesta região e em seus entornos. Dessa forma, seu valor deve ser proporcional ao produto das densidades  $\rho(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x}')$ , que podem ser interpretadas como o potencial dessa força. Porém, devido às instabilidades numéricas, utilizou-se uma função  $\psi(\rho)$ , chamada de pseudopotencial. No trabalho original, essa função é dada por:

$$\psi(\rho) = \rho_0 \left[ 1 - \exp\left(\frac{-\rho}{\rho_0}\right) \right], \quad (2.80)$$

em que  $\rho_0$  é uma densidade de referência. Em geral, quando trabalhando em unidades de rede, é comum encontrar trabalhos adotando valor unitário como referência.

A forma discreta da força intermolecular da Eq. (2.79) é dada por:

$$\mathbf{F}^{SC}(\mathbf{x}) = -\psi(\mathbf{x})G \sum w_i \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \mathbf{c}_i \Delta t, \quad (2.81)$$

em que a função *kernel* utilizada é dada por:

$$K(\mathbf{x}', \mathbf{x}) = \begin{cases} w_i G & \text{para } \mathbf{x}' = \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.82)$$

sendo que  $G$  pode ser visto como um parâmetro que controla a intensidade da interação. Originalmente, o efeito da força  $\mathbf{F}^{SC}$  foi inserido na simulação através de uma alteração na velocidade de equilíbrio:

$$\rho \mathbf{u}^{eq} = \sum_i f \mathbf{c}_i + \tau \Delta t \mathbf{F}^{SC}. \quad (2.83)$$

Como discutido na Seção 2.2.5, essa inclusão ainda não era tão compreendida na época e, por essa razão, esse procedimento de alteração na velocidade de equilíbrio, que pode ser utilizado para qualquer outra força externa, é conhecido hoje como esquema de força de Shan-Chen.

Quando analisada a equação macroscópica resultante, é possível mostrar que a equação de estado resultante é dada por:

$$p(\rho) = \rho c_s^2 + \frac{1}{2} G c_s^2 \Delta t^2 \psi^2(\rho). \quad (2.84)$$

Empregando a definição da  $\psi$  na Eq. (2.80), essa equação de estado possui os parâmetros críticos são dados por  $G_c = -4$  e  $\rho_c = \ln 2$ . Com isso, para  $G < G_c$ , é possível observar duas fases distintas, uma região líquida com densidade superior à densidade crítica e uma região de vapor de menor densidade.

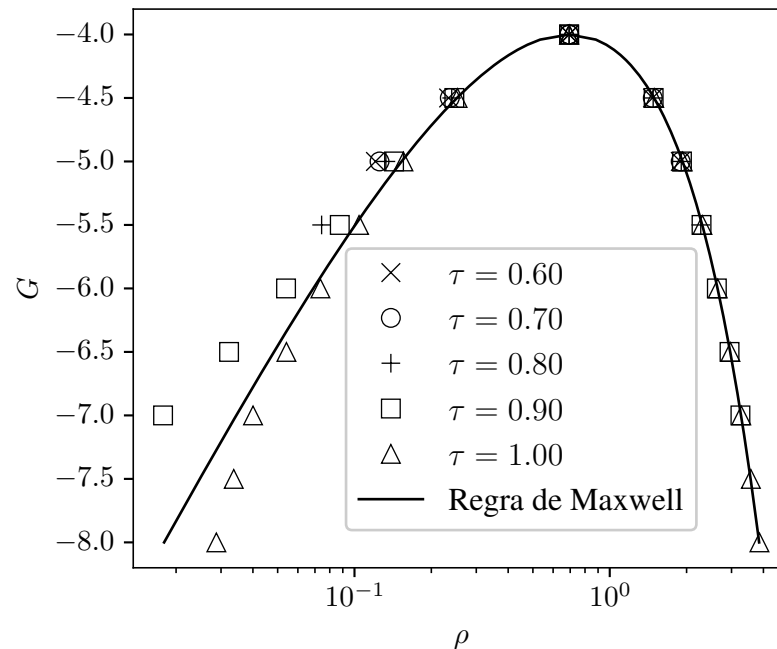
Apesar da capacidade e simplicidade desse método em reproduzir mudanças de fase espontaneamente, a formulação original possui limitações importantes. A primeira que abordaremos diz respeito sobre a inconsistência termodinâmica. Esse fato pode ser observado a partir da análise do equilíbrio mecânico para um fluido com uma dada equação de estado. É esperado que as densidades da fase líquida e vapor, respectivamente,  $\rho_l$  e  $\rho_g$ , para um dado valor de  $G$ , que aqui possui um papel semelhante à da temperatura, possam ser encontradas através da regra de construção de Maxwell:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} (p_{\text{sat}} - p(\rho)) \frac{d\rho}{\rho^2} = 0, \quad (2.85)$$

sendo a pressão de saturação  $p_{\text{sat}} = p(\rho_g) = p(\rho_l)$ , devido ao equilíbrio mecânico. Além de não ser capaz de replicar o comportamento da Eq. (2.85), o método também apresenta uma curva de saturação dependente do fator de relaxação (Fig. 4), um acoplamento considerado não-físico e indesejado por tornar difícil o controle da razão de densidades (HUANG; KRAFCZYK; LU, 2011).

Outras limitações do método dizem respeito à sua instabilidade para razões de densidade a partir de  $\rho_l/\rho_g \approx 60$ . Tal valor de razão impossibilita seu emprego para simulações em condições experimentais de nucleação, em que é comum encontrar razões da ordem de 1000. Além disso, a tensão superficial,  $\sigma$ , além da esperada dependência com o parâmetro  $G$  também

Figura 4 – Curva de saturação dada pela regra de Maxwell, em comparação com pontos simulados pelo método de Shan-Chen original para diferentes valores de fator de relaxação,  $\tau$ .



Fonte: Elaborado pelo autor

está relacionada com o fator de relaxação  $\tau$  empregado. Com isso, não é possível um controle independente da tensão e razão de densidades, importante para simulações de casos reais.

Por fim, tem-se as correntes espúrias, que são pequenos vórtices que aparecem próximos às regiões de interface, mesmo em problemas estáticos, devido a erros numéricos. No entanto, é válido ressaltar que esses vórtices não são exclusivos do método do pseudopotencial, mas presentes em basicamente qualquer simulação que se baseia em uma interface difusa, como é o caso das outras abordagens citadas no início desta seção.

### 2.3.2 Modificações e extensões

Desde a formulação original, diversos estudos foram realizados para aprofundar e/ou corrigir os problemas da formulação original do método do pseudopotencial. Aqui, vamos apresentar os principais estudos e avanços que foram feitos para aprimoramento desta técnica, não necessariamente em ordem cronológica.

#### 2.3.2.1 Razões de densidades

O primeiro estudo de grande importância para se ampliar a gama de aplicação do método do pseudopotencial foi realizado por Yuan e Schaefer (2006). Como visto, a formulação original possui uma relação com o parâmetro  $G$  ao invés de temperatura, o que dificulta sua interpretação,



além de apresentar baixas razões de densidades. Nesse trabalho, foi proposto então calcular o valor da função pseudopotencial  $\psi$  de maneira conveniente para se impor qualquer equação de estado.

Efetivamente, ao invés da pressão termodinâmica ser uma resultado da formulação, como mostrado na Eq. (2.84), inverte-se o cálculo de forma que:

$$\psi = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_s^2 \Delta t^2 |G|}} \quad (2.86)$$

em que agora  $p$  é uma equação de estado imposta.

Dentre as equações de estado estudadas, podemos destacar a de Van der Waals:

$$p^{\text{vdW}} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2, \quad (2.87)$$

sendo  $a = \frac{27}{64} \frac{RT_c^2}{p_c}$ , um parâmetro de atração molecular e  $b = \frac{R T_c}{8 p_c}$  relacionado à dimensão das moléculas. A equação de estado de Peng-Robinson

$$p^{\text{PR}} = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2 \left[ 1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.2699\omega^2) \left( 1 - \sqrt{T/T_c} \right) \right]^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2}, \quad (2.88)$$

com as relações  $a = 0.45724 R^2 T_c^2 / p_c$ ,  $b = 0.0778 R T_c / p_c$  e  $\omega$  sendo o fator acêntrico, uma propriedade do fluido relacionado à esfericidade de suas moléculas. Outra equação de interesse no estudo de Yuan e Schaefer (2006) é a de Carnahan-Starling (CARNAHAN; STARLING, 1969), que utiliza o conceito de esferas rígidas tridimensionais para modelar a fase líquida:

$$p^{\text{CS}} = \rho RT \frac{1 + (b\rho/4) + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2, \quad (2.89)$$

sendo  $a = 0.4963 R^2 T_c^2 / p_c$  e  $b = 0.18727 R T_c / p_c$ . Esse estudo foi importante para mostrar a dependência das razões de densidade e também correntes espúrias com a equação de estado empregada. Em seus resultados, a razão máxima obtida pela equação de Van der Wals foi de aproximadamente 7, enquanto para Carnahan-Starling, razões da ordem de 1000 foram obtidas. Esse resultado impulsionou uma série de estudos a utilizarem essa equação de estado em suas investigações (KUPERSHTOKH; MEDVEDEV; KARPOV, 2009; HUANG; KRAFCZYK; LU, 2011; LI; LUO; LI, 2012; LI; LUO, 2013; SIEBERT; PHILIPPI; MATTILA, 2014). Em investigações de nucleação, a equação de estado de Peng-Robinson, com capacidade similar à de Carnahan-Starling também tem bastante aplicabilidade na literatura (GONG; CHENG, 2012b; SIEBERT; PHILIPPI; MATTILA, 2014; CHENG; ZHANG; GONG, 2017; DONG; GONG; CHENG, 2018; GONG et al., 2018). Apesar disso, o método apresenta erros consideráveis, principalmente na densidade de vapor em baixas temperaturas reduzidas. Esse fato acaba limitando as simulações a temperaturas próximas à temperatura crítica. Isso é ainda mais acentuado em simulações dinâmicas que também acrescentam o acoplamento com a solução da

conservação de energia. Por essa razão, há um campo ativo de pesquisa cujo objetivo é obter melhores resultados de consistência termodinâmica. Recentemente, tem sido desenvolvidas equações de estado customizadas, com inclusão de parâmetros que permitem o melhor controle da curva de saturação e/ou tensão superficial. Dentre os trabalhos nesse tema, Huang, Wu e Adams (2019) desenvolveram uma equação de estado auto-ajustável, através de mudanças no cálculo de equilíbrio. Com isso, qualquer equação de estado pode ser incorporada de forma a obter consistência termodinâmica, tensão superficial e espessura de interface desejadas. Peng et al. (2020) notaram que as regiões instáveis e metaestáveis das equações de estado possuem grande influência no resultado final obtido pela simulação. Com isso, propuseram um método de alterar a equação de estado na região  $\rho_g < \rho < \rho_l$  por uma interpolação cúbica, de forma a satisfazer a equação de regra de Maxwell. Os resultados foram promissores, com erros máximos de 0.01% na pressão de saturação, com testes até razões de densidades até próximas da ordem de 10000. Czelusniak et al. (2022) também propuseram um método para alterar as regiões instáveis e metaestáveis da equação da estado, sem afetar os valores de densidades de equilíbrio de vapor e líquido. Além disso, o método não altera a velocidade do som no líquido, mas aumenta o seu valor no vapor. Com essa proposta, em simulações de uma gota estática colidindo em um filme líquido, os autores conseguiram simulações estáveis para  $T_r = 0.35$ , com razões de densidades de  $3.8 \cdot 10^4$ .

### 2.3.2.2 Desacoplamento da curva de saturação e fator de relaxação

A dependência da curva de saturação com o fator de relaxação na formulação também é conhecida na literatura, mas logo notou-se que isso poderia ser eliminado incluindo os efeitos da força intermolecular através do esquema de forças de Guo (YU; FAN, 2009; KUPERSHTOKH; MEDVEDEV; KARPOV, 2009; HUANG; KRAFCZYK; LU, 2011).

Porém, apesar de eliminar o problema do acoplamento com o fator de relaxação,  $\tau$ , o emprego do esquema de forças de Guo torna a simulação muito mais instável, uma vez que a razão de densidades cresce mais rapidamente do que a formulação no artigo original, afastando-se ainda mais do comportamento da regra de Maxwell. Isso levou a Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) propor um método diferente para incluir a força pseudopotencial no LBM, o que o permitiu encontrar uma curva de saturação independente do valor de  $\tau$ , mas densidades próximas aos valores da curva termodinamicamente consistente. No entanto, uma explicação convincente desse comportamento com a mudança do esquema de força ainda não tinha sido formulada. Ao contrário, mesmo utilizando a equação macroscópica da análise de Chapman-Enskog, ainda não notava-se claramente a dependência de  $\tau$  nas curvas de coexistência teóricas dos métodos.

Um dos primeiros estudos a exibir uma relação mais clara foi feito por Wagner (2006), para esquemas unidimensionais, com maior enfoque no método da energia livre. Shan (2008) apresentou um método de cálculo do tensor de pressão de forma discretizada, o qual foi capaz de prever o comportamento do método do pseudopotencial com o esquema de Guo. A partir desses

resultados, Li, Luo e Li (2012) desenvolveram uma comparação dos esquemas de força de Guo, Kupershtokh e Shan-Chen, e notaram que para uma análise de segunda ordem, suas equações resultantes eram diferentes nos termos  $\mathcal{O}(\mathbf{F})$ , e apenas o esquema de Guo era independente do fator de relaxação. A partir dessas conclusões e do cálculo de tensor de Shan (2008), os autores propuseram um esquema de força modificado com a inclusão de um parâmetro:

$$F_i^{\text{Li}} = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) w_i \left( \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} F_\alpha + \frac{c_{i\alpha}c_{i\beta} - c_s^2\delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} (F_\alpha u_\beta^{\text{Li}} + F_\beta u_\alpha^{\text{Li}}) \right), \quad (2.90)$$

em que  $\mathbf{u}^{\text{Li}} = \mathbf{u}^{\text{Guo}} + \zeta \mathbf{F} / [(\tau - 0.5)\psi^2]$ . Através desse novo parâmetro,  $\zeta$ , foi criado um controle da curva de saturação, de forma a obter curvas de coexistência próximas ao esperado da curva de Maxwell. No ano seguinte, Li, Luo e Li (2013) replicaram essas ideias, mas dessa vez com o operador MRT. Com esse mesmo operador, Li e Luo (2013) incrementaram ainda mais o método e propuseram como adicionar um segundo parâmetro para controle da tensão superficial.

Assim, ainda que o método estivesse sendo desenvolvido, os comportamentos dos outros esquemas de forças ainda não estavam claramente explicados. Apenas em trabalhos mais recentes, como de Lycett-Brown e Luo (2015) e Zhai, Zheng e Zheng (2017) que se mostrou que termos de erros espaciais de terceira ordem da força deveriam ser levados em conta na análise da equação macroscópica. Assim, mostrou-se que termos  $\mathcal{O}(\nabla \mathbf{F})$  possuíam um papel importante no método. Os erros de terceira ordem podem ser definidos:

$$E^{(3)} = \partial_\beta \left[ \frac{c_s^2}{12} [(\partial_\gamma F_\gamma)\delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta F_\alpha + \partial_\alpha F_\beta] \right], \quad (2.91)$$

os quais devem ser adicionados ao lado direito das Eqs. (2.70b) ou (2.76b). Com isso, a influência dos esquemas de forças foi melhor compreendida e novas propostas para controle da consistência termodinâmica, tensão superficial e controle da espessura da interface surgiram por esses trabalhos.

Mais recentemente, uma nova abordagem para se controlar esses aspectos do método pseudopotencial começou a ser estudada. A ideia é criar novos termos de campo de forças vetoriais, que devem ser somados à força de Shan-Chen, Eq. (2.81), com parâmetros livres para corrigir o comportamento original, e que podem ser incorporados ao LBM pelo método tradicional de Guo. Esses termos dependem de derivadas de  $\psi$  e podem ser calculados de diferentes formas. Kharmiani, Niazmand e Passandideh-Fard (2019), por exemplo, propuseram dois novos termos de força, calculados a partir de esquemas de diferenças finitas. No trabalho de Czelusniak et al. (2020), também dois novos termos com parâmetros livres são propostos. Porém, os termos de derivadas foram escritos a partir de expansões de Hermite, de forma que os gradientes de  $\psi$  podem ser calculados através do cálculo de momentos discretos, semelhante ao que se é utilizado no LBM para recuperar outras variáveis macroscópicas.

### 2.3.2.3 Correntes espúrias

Outro tópico ativo de pesquisa, não apenas relacionado ao método pseudopotencial, são as correntes espúrias, caracterizadas por vórtices nas regiões interfaciais, mesmo em problemas

estáticos. Um dos primeiros estudos a identificar uma de suas causas foi realizado por Shan (2006), que realizou a expansão em Taylor da Eq. (2.81), de forma que:

$$\mathbf{F}^{\text{SC}} = -\psi G \left[ \psi \sum w_i c_{i\alpha} + (\partial_\beta \psi) \frac{\Delta t}{2} \sum w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} + (\partial_\beta \partial_\alpha \partial_\gamma \psi) \frac{\Delta t^3}{6} \sum w_i c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} + \dots \right]. \quad (2.92)$$

Os termos relacionados à  $\partial_\beta \psi$  e  $\partial_\beta \nabla^2 \psi$  são os responsáveis para a alteração da equação de estado e comportamento da interface. Com isso, o autor usa como argumento que as correntes espúrias estão relacionadas aos termos de ordem mais altas. Pela Eq. (2.92), é possível notar que a capacidade de reproduzir corretamente os termos de maior ordem dependem da isotropia do conjunto de velocidades utilizado. Para o conjunto D2Q9, que obedece às equações Eq. (2.37), os termos a partir de  $\mathcal{O}(\partial^5)$  não são recuperados corretamente.

Essas conclusões impulsionaram estudos com conjunto de velocidades expandidos, com maior número de velocidades e, conseqüentemente, com maior isotropia. Sbragaglia et al. (2007) estudaram o problema de correntes espúrias investigando dois fatores: a isotropia do conjunto de velocidades e o refinamento da interface. Eles propuseram um método sistemático para encontrar o conjunto de velocidades para se conseguir uma isotropia arbitrária. Os métodos que se utilizam de um conjunto expandido para o cálculo da força devido ao pseudopotencial também são chamados de *multirange*. Com essa técnica, os autores mostraram ser possível reduzir os valores máximos das velocidades espúrias para um pouco menos da metade quando se passou de um conjunto de 8 para 36 velocidades. O aumento do número de pontos na interface mostrou-se mais promissor, com redução de até 10 vezes o valor de velocidade espúria máxima para o conjunto de 9 velocidades, quando o número de sítios simulados é dobrado. Essa é uma razão pela qual os modelos mais recentes com o conjunto tradicional D2Q9 buscam adicionar parâmetros livres para controle da espessura da interface (LYCETT-BROWN; LUO, 2015; KHARMIANI; NIAZMAND; PASSANDIDEH-FARD, 2019; CZELUSNIAK et al., 2020).

Ainda é importante ressaltar que os métodos *multirange* utilizam um estêncil expandido apenas no cálculo da força intermolecular. Ainda existem os modelos que utilizam um conjunto maior de velocidades para toda a discretização do LBM, como sistematizado por Philippi et al. (2006). Esses modelos, que utilizam polinômios de Hermite de maiores ordens, dão origem aos conjuntos de velocidades, D2Q17, D2Q25 e D2Q37, por exemplo. Mattila et al. (2013) estudaram o comportamento do método pseudopotencial tradicional desses conjuntos, juntamente com o tradicional D2Q9, e mostraram que os conjuntos DQ17 e D2Q25 apresentaram os menores valores de velocidade espúria, cerca de 60% menor que o D2Q9. Esse fato persistia ainda que fossem utilizados método de *multirange* de 36 velocidades para o cálculo da força intermolecular. Siebert, Philippi e Mattila (2014) estudaram conjuntos de velocidades até D2Q53, confirmando a tese de que o aumento da ordem da isotropia dos conjuntos resulta em menores velocidades

espúrias, ainda que seu foco tenha sido o método da energia livre. Também, nesse estudo, uma integração de terceira ordem foi estudada no passo da discretização espaço-temporal, Eq. (2.41), e foi constatado que esse esquema produzia maiores velocidades espúrias. Esse fato mostra que as correntes espúrias são mais relacionadas ao desbalanço das forças nas regiões interfaciais devido ao erro numérico no cálculo das derivadas espaciais, corroborando com os estudos de Shan (2006).

Embora as representações de maiores ordem possuam as vantagens em relação à manutenção da equação da conservação de energia e menores velocidades espúrias, ainda há argumentos para se manter a linha de adição de parâmetros para melhor controle do D2Q9. O principal deles é a viabilidade computacional. Nos métodos tradicionais, é necessário que haja memória suficiente para que sejam armazenados, no caso bidimensional com estêncil D2Q9, nove valores das funções de distribuição discretizadas,  $f_i$ , para cada sítio da rede computacional. Com o aumento das velocidades, o consumo de memória tem um ganho proporcional ao aumento das velocidades, escalável com o tamanho da malha. A situação se torna mais crítica ainda quando se compara a generalização desses modelos para casos tridimensionais. Assim, ainda é de grande interesse métodos com número de velocidades reduzidas mas com capacidade de controlar o número de pontos na interface, tensão superficial e razão de densidade, como visto em Lycett-Brown e Luo (2015), por exemplo.

### 2.3.3 Conservação de energia

Na seção 2.2.2, foi discutido que durante a discretização, utiliza-se a hipótese isotérmica, de forma que a temperatura deixa de ser interpretada fisicamente, e torna-se apenas um parâmetro livre para que a evolução temporal da função de distribuição  $f$  seja advectada exatamente  $\Delta x$  no espaço no intervalo  $\Delta t$ . Com isso, surge a necessidade de um modelo térmico complementar para a evolução temporal, principalmente para simulações com transferência de calor.

No contexto de simulações com mudança de fase utilizando o método do pseudopotencial, duas abordagens principais são encontradas na literatura: empregar um segundo método de discretização para a evolução temporal da equação da energia ou resolver uma segunda função de distribuição que conserve uma quantidade escalar.

O primeiro método citado é também chamado de método híbrido, por utilizar o LBM para conservação de massa e quantidade de movimento, e um segundo método para a conservação da equação da energia. Um dos primeiros trabalhos a utilizar esta abordagem foi o de Zhang e Chen (2003), que utilizaram a equação macroscópica:

$$\rho(\partial_t e + u_\gamma \partial_\gamma e) = \partial_\gamma (k \partial_\gamma) - p \partial_\gamma u_\gamma, \quad (2.93)$$

em que  $c_v$  é o calor específico a volume constante,  $e = c_v T$  é a energia específica interna,  $k$  a condutividade térmica, sob a hipótese de trabalho da dissipação de calor viscosa desprezível. Em outro trabalho relevante, Hazi e Markus (2009) derivaram uma equação da evolução temporal da

temperatura a partir do balanço da entropia, desconsiderando dissipação de calor viscoso:

$$\partial_t s + \partial_\alpha (u_\alpha s) = \partial_\alpha (k \partial_\alpha T), \quad (2.94)$$

onde  $s$  é a entropia. De acordo com as relações termodinâmicas, a seguinte equação pode ser obtida:

$$ds = \frac{c_v}{T} dT + \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v dv, \quad (2.95)$$

em que  $v = 1/\rho$  é o volume específico. Utilizando a Eq. (2.94), a relação da Eq. (2.95) e a equação da conservação de massa, é possível chegar na seguinte equação para evolução da temperatura:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -u_\alpha \partial_\alpha T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\alpha (k \partial_\alpha T) - \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \partial_\alpha u_\alpha, \quad (2.96)$$

No trabalho de Li et al. (2015), essa formulação não conservativa da evolução da temperatura foi discretizada utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Com isso, o avanço temporal da temperatura é calculado através da seguinte forma:

$$T_{t+\Delta t} = T_t + \frac{\Delta t}{6} (h_1 + 2h_2 + 2h_3 + h_4), \quad (2.97)$$

em que  $h_1, h_2, h_3$  e  $h_4$  são calculados por:

$$\begin{aligned} h_1 &= K(T_t), & h_2 &= K\left(T_t + \frac{\Delta t}{2} h_1\right), \\ h_3 &= K\left(T_t + \frac{\Delta t}{2} h_2\right), & h_4 &= K(T_t + \Delta t h_3), \end{aligned} \quad (2.98)$$

sendo que  $K(T)$  é o lado direito da Eq. (2.96). Além disso, os esquemas isotrópicos propostos por Lee e Lin (2005) foram empregados no cálculo nas derivadas espaciais de primeira ordem e laplacianos. Para o campo do escalar da temperatura, esses cálculos são realizados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \partial_\alpha T(\mathbf{x}) &\approx \frac{1}{c_s^2 \Delta t} \sum_i w_i T(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) c_{i\alpha} \\ \partial_\gamma \partial_\gamma T(\mathbf{x}) &\approx \frac{1}{c_s^2 \Delta t^2} \sum_i w_i [T(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - T(\mathbf{x})]. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Um ponto a ser ressaltado nesse caso é que existe um acoplamento entre a equação da evolução da temperatura e da quantidade de movimento devido ao último termo da Eq. (2.96). Ou seja, a temperatura não é simplesmente advectada pelo campo de velocidades e difundida devido ao gradiente de temperatura, mas sua evolução também depende do gradiente do campo de velocidades, o qual, por sua vez também depende da evolução da temperatura. Em resumo, temos que a evolução da temperatura, do campo de velocidades e densidade se influenciam mutuamente. Assim sendo, o método de Runge-Kutta precisaria avaliar todos esses campos em seus passos de tempo intermediários. Dependendo da abordagem empregada, isso pode resultar em esquemas implícitos, ou envolver uma previsão e depois correção, incrementando

a complexidade de implementação e tempo computacional. No trabalho, os autores apenas mencionam que os campos são resolvidos pelo LBM, sem maiores discussões. De certa forma, a ausência dessa discussão nos leva a entender que a abordagem mais simples tenha sido utilizada, que seria apenas utilizar os campos de velocidades e densidade avaliados em  $t$  mesmo para os passos intermediários. Esse procedimento, inclusive, foi adotado no trabalho presente.

Ainda em relação à abordagem híbrida, pode-se dizer que outros trabalhos discretizaram outras formulações de conservação de energia. Para citar um exemplo, Chakraborty e Chatterjee (2007) partiram da forma conservativa da evolução da temperatura para realizar a discretização em diferenças finitas, em seus estudos na transição de fase sólido-líquido. A abordagem híbrida também é utilizada na literatura para simulações de escoamentos como convecção natural e escoamentos multicomponentes. O uso dessa abordagem também é um tópico de estudo em aberto no âmbito mais teórico. Recentemente, Guo, Feng e Sagaut (2021) realizaram uma revisão das diferentes formas de conservação de energia na literatura, e analisaram os termos espúrios que podem aparecer dependendo da formulação empregada. Algumas das proposições para melhorar estabilidade e robustez envolvem um segundo cálculo do campo de densidades com diferenças finitas aplicando conservação de massa o campo de velocidades obtidos pelo LBM. Esse campo de densidades seria utilizado apenas para atualização temporal da entropia. No entanto, essas técnicas ainda não parecem ter sido adotadas de forma extensiva para problemas de mudança de fase.

A segunda abordagem empregada é o uso de uma segunda função de distribuição,  $g$ , cuja evolução temporal irá resultar na equação macroscópica de um escalar, que pode ser a temperatura, energia interna ou entropia, por exemplo. Com o método do pseudopotencial, um dos trabalhos que empregam essa abordagem no estudo de ebulição em piscina é Gong e Cheng (2012a). Eles utilizaram a seguinte equação para evolução da segunda função de distribuição:

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_T} (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t \omega_i \phi, \quad (2.100)$$

em que  $\tau_T$  é o tempo de relaxação para a temperatura e  $g^{eq}$  é distribuição de equilíbrio para a temperatura, dada por:

$$g_i^{eq}(t, \mathbf{x}) = w_i T \left( 1 + \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} u_\alpha + \frac{(c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2) \delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} u_\alpha u_\beta \right). \quad (2.101)$$

O termo fonte  $\phi$  demonstrado pelos autores deveria ser:

$$\phi = T \left[ 1 - \frac{1}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \partial_\gamma u_\gamma, \quad (2.102)$$

em confronto ao termo fonte empregado em um trabalho anterior de Hazi e Markus (2009):

$$\phi = T \frac{1}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \partial_\gamma u_\gamma. \quad (2.103)$$

em que o termo  $T\partial_\gamma u_\gamma$  foi desconsiderado sem uma razão aparente (GONG; CHENG, 2012a). Com isso, a formulação resulta na seguinte expressão macroscópica:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -u_\gamma \partial_\gamma T + \partial_\gamma \left( \frac{k}{\rho c_v} \partial_\gamma T \right) - \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \partial_\gamma u_\gamma. \quad (2.104)$$

Esse trabalho serviu de base para outros estudos do mesmo grupo dos autores originais (GONG; CHENG, 2012b; GONG; CHENG, 2015a; GONG; CHENG, 2015b; GONG; CHENG; QUAN, 2016; GONG; CHENG, 2016) e de outros autores (SUN et al., 2017; ZHOU; LIU; LIU, 2019; WANG; LOU; LI, 2020). No entanto, Li, Zhou e Yan (2017) argumentaram que a Eq. (2.96) resulta em erros consideráveis, principalmente nas regiões interfaciais. Isso pode ser visualizado pela diferença entre os termos da transferência de calor devido ao gradiente de temperatura na equação obtida através do balanço da entropia, Eq. (2.96), e a equação macroscópica resultante do método, Eq. (2.104). Na formulação oriunda do balanço de entropia, Eq. (2.96), esse termo é  $\partial_\alpha(k\partial_\alpha T)/(\rho c_v)$ , enquanto na equação macroscópica resultante do método, Eq. (2.104), esse termo possui o valor de  $\partial_\alpha(k/(\rho c_v)\partial_\alpha T)$ . Esses dois valores são equivalentes se a densidade e o calor específico forem constantes. Para a densidade, isso pode ser razoável em uma região no interior de cada uma das fases, mas não na interface. Com isso, Li, Zhou e Yan (2017) propuseram que o uso do seguinte termo fonte:

$$\phi = T \left[ 1 - \frac{1}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \partial_\gamma u_\gamma - \partial_\gamma \left( \frac{k}{\rho c_v} \partial_\gamma T \right) + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\gamma (k \partial_\gamma T), \quad (2.105)$$

para que a equação da evolução temporal seja consistente. Esta proposta foi bem recebida na literatura, e foi endossada nos estudos de mudança de fase com o método do pseudopotencial e uma segunda função de distribuição para a temperatura em outros trabalhos (FANG et al., 2017; MU et al., 2017; GONG; CHENG, 2017).

## 2.4 Ebulição em piscina

### 2.4.1 Breve resumo sobre conceitos de ebulição em piscina

O processo de ebulição pode ser definido como o fenômeno que ocorre em uma interface sólido-líquido, em que o líquido atinge temperaturas acima da temperatura de saturação devido à transferência de calor. Uma das características desse processo é a formação de bolhas de vapor na interface sólido-líquido, que acabam se desprendendo dessa superfície quando atingem um certo tamanho. Duas classificações tradicionais desse fenômeno são a ebulição em piscina e convectiva. No primeiro, a superfície aquecida está imersa em uma massa de líquido sem uma fonte de movimento externa. Assim sendo, os movimentos observados no fluido ocorrem devido à convecção natural e à dinâmica de crescimento, desprendimento e coalescência entre as bolhas de vapor. A ebulição convectiva, por outro lado, é a classificação dada quando existe um escoamento originado por uma fonte externa, como por exemplo, uma bomba hidráulica gerando um gradiente de pressão em um duto aquecido (CENGEL, 2002, p. 516).

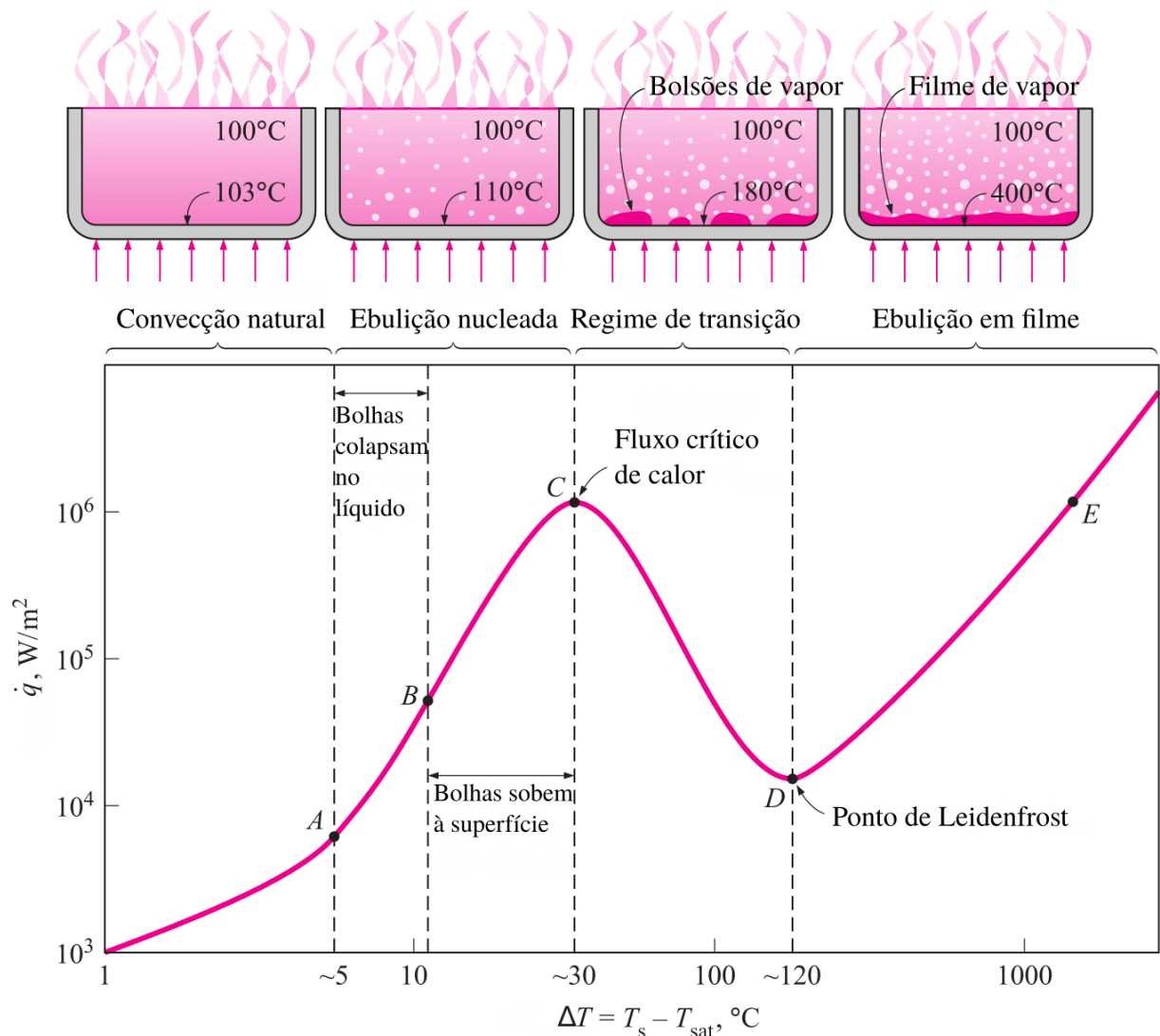


Um dos trabalhos precursores em ebulição foi realizado por Nukiyama (1934), que consistia em aquecer eletricamente por efeito Joule um fio metálico submerso em um reservatório de líquido. Assim, aferindo a temperatura da superfície do fio metálico e o fluxo de calor transferido ao fluido, foi possível levantar o que se denomina a curva de ebulição, representada na Fig. 5. O formato específico dessa curva depende de propriedades tanto do fluido quanto do material do fio metálico, mas possui baixa dependência com o formato da superfície. No entanto, para os fins deste resumo, o interesse reside em elucidar os quatro regimes característicos: convecção natural, ebulição nucleada, regime de transição e ebulição em filme (CENGEL, 2002, p. 516).

Inicialmente, para valores de sobreaquecimento da superfície do fio metálico abaixo da temperatura de saturação, não existe mudança da fase, e a convecção natural é o fenômeno predominante. Assim, nesse regime, observa-se apenas as correntes convectivas devido às variações de densidade pela expansão térmica do fluido. Teoricamente, para substâncias puras, a formação de uma nova fase começa ocorrer quando se atinge a temperatura de saturação para uma determinada pressão. Na prática, é possível que a mudança de fase seja observada com algum sobreaquecimento, pois o líquido pode se encontrar em um estado metaestável. De qualquer forma, nesse instante, tem-se o regime de ebulição nucleada, em que são observadas formação, crescimento e desprendimento de bolhas de vapor nos sítios de nucleação da superfície. Este regime é mais eficiente na troca de calor que a convecção natural, pois a energia térmica transferida ao fluido é consumida na mudança de fase para formação das bolhas. Isso possibilita uma maior transferência de calor, e por isso, observa-se uma mudança no gradiente da curva, observado a partir do ponto A da Fig. 5. À medida que a temperatura da superfície do fio aumenta, mais sítios de nucleação são ativados e também mais rápido o crescimento das bolhas, e conseqüentemente, maior a interação e coalescência de bolhas. A ebulição nucleada ocorre até que se atinja um ponto máximo de transferência de calor com o aumento da temperatura, conhecido como fluxo crítico de calor, indicado pelo ponto C na Fig. 5. A partir desse ponto, tem-se o chamado regime de transição, em que porções da superfície se encontra envolta por bolsões de vapor, enquanto outras regiões ainda mantém características do regime nucleado. Como a fase de vapor possui menor condutividade térmica, os bolsões de vapor agem como um isolante térmico, reduzindo a transferência de calor ao líquido. Essa redução perdura até o chamado ponto de Leidenfrost, quando a superfície de aquecimento está completamente envolta por um filme da fase de vapor. Nesse momento, os mecanismos de transferência de calor são a condução e a radiação, e o calor transferido volta a aumentar com o aumento da temperatura da superfície (CENGEL, 2002, p. 519-521).

Desde o trabalho de Nukiyama (1934), uma grande quantidade de estudos sobre ebulição em piscina foram realizados, e ainda hoje, é um tópico de pesquisa ativo devido tanto à grande complexidade dos mecanismos envolvidos nesse fenômeno quanto à grande gama de aplicações industriais. Em uma revisão recente, Mahmoud e Karayiannis (2021) resumiram os mecanismos de transferência de calor na ebulição nucleada: convecção natural em baixas taxas de calor,

Figura 5 – Curva de ebulição e representação dos regimes de ebulição observados pelo trabalho de Nukiyama (1934).



Fonte: Adaptado de Cengel (2002, p. 518 e 519).

quando não há coalescência e interação de bolhas; microconvecção induzida pelo movimento do líquido resultante do crescimento das bolhas; evaporação da microcamada líquida aprisionada sob a bolha; evaporação da camada térmica superaquecida ao redor da bolha; condução de calor transitória durante o processo de reumidificação que ocorre após a partida da bolha; convecção forçada resultante da agitação das bolhas no interior do líquido. Além de serem mecanismos difíceis de serem mensurados, a contribuição de cada um deles também podem variar de acordo com as condições de escoamento, do fluido, das características de molhabilidade da superfície, entre outras variáveis.

### 2.4.2 Trabalhos da literatura com método pseudopotencial

Um dos trabalhos precursores no emprego do método do pseudopotencial para estudos de nucleação em superfícies aquecidas foi realizado por Zhang e Chen (2003). Utilizando uma configuração com paredes nas fronteiras superior e inferior, e condições periódicas na direção horizontal, o líquido no domínio foi inicializado com um perfil linear entre as temperaturas de  $0.795T_c$  e  $0.964T_c$  na direção vertical. Os autores utilizaram o método híbrido, resolvendo a seguinte equação de energia interna:

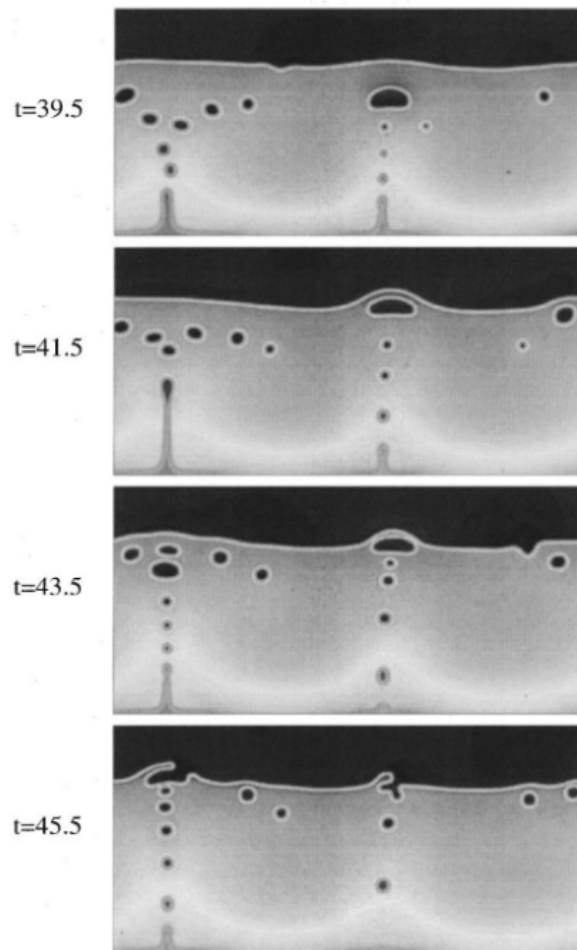
$$\partial_t T = -u_\alpha \partial_\alpha T - \frac{-p \partial_\alpha u_\alpha}{\rho c_v} - \frac{\partial_\alpha (k \partial_\alpha u_\alpha)}{\rho c_v} - \frac{\Psi}{\rho c_v} \quad (2.106)$$

em que  $\Psi$  representa os termos de dissipação viscosa e contribuição da tensão superficial. A evolução temporal foi resolvida utilizando um esquema de Lax-Wendroff estendido. Para a equação de estado, foi empregada a equação de Carnahan-Starling, sem maiores detalhes a respeito dos valores dos parâmetros empregados. Para favorecer a formação de bolhas, os autores inseriram pequenas flutuações na temperatura no momento de cálculo da equação de estado na primeira camada de nós acima da superfície inferior. Com isso, conseguiram observar simulações com formação e convecção da bolha com um ciclo sustentável por tempo indeterminado, demonstrando a capacidade do método para replicar esses fenômenos. Na Fig. 6, são exibidos alguns dos campos de densidades observados em suas simulações, com dois sítios de nucleações visíveis.

Hazi e Markus (2009) empregaram uma segunda função de distribuição para seus estudos de ebulição, com temperatura reduzida de  $T_r = 0.8$ . A equação de estado é resultado do modelo do pseudopotencial empregado, com dois parâmetros para controle de tensão superficial e temperatura, em unidades de rede. No termo fonte da função de distribuição térmica, os autores empregaram o mesmo termo exibido na Eq. (2.103), abordagem criticada posteriormente por outros autores. A nucleação das bolhas é favorecida utilizando uma zona de maior fluxo de calor prescrito na fronteira inferior do domínio computacional. Os diâmetros e frequências de desprendimento das bolhas obtidos pela simulação foram proporcionais, respectivamente, a  $g^{-1/2}$  e  $g^{3/4}$ , proporcionalidades estas previstas pelas correlações de Fritz (1935) e Zuber (1963). Apesar dessa concordância, é importante ressaltar que a comparação foi feita entre uma regressão da curva obtida pela simulação, em unidades de rede, com uma análise dimensional das correlações, sem comparar o valor quantitativo final entre esses dois métodos.

Gong e Cheng (2012a) empregaram o método do pseudopotencial com uma segunda função de distribuição para a evolução temporal do campo de temperaturas. Os autores utilizaram a equação de estado de Peng-Robinson, com fator acêntrico da água, e parâmetros  $a = 2/49$ ,  $b = 2/21$  e  $R = 1$ , sem maiores esclarecimentos para o emprego desses valores. Com um fluido estático inicialmente a  $0.82T_c$ , eles fixaram a parede inferior a  $0.86T_c$ , com um ponto central da parede a uma temperatura maior, não especificada, para se comportar como um sítio de nucleação. A parede superior foi considerada com uma condição de pressão constante, e

Figura 6 – Campos de densidades observados no trabalho de Zhang e Chen (2003) demonstrando a capacidade do método híbrido para simular formação e dinâmica de bolhas.



Fonte: Zhang e Chen (2003)

as laterais periódicas. Para o termo fonte da função de distribuição, os autores utilizaram a formulação mostrada na Eq. (2.102), que não despreza o termo  $T\partial_\gamma u_\gamma$  como no trabalho de Hazi e Markus (2009), mas desconsidera os gradientes interfaciais. Foram realizados estudos do efeito gravitacional no diâmetro de desprendimento das bolhas. A correlação de Fritz (1935) resulta em uma relação do diâmetro proporcional a  $g^{-1/2}$ , e a regressão a partir dos pontos obtidos pela simulação resultou em uma curva com  $g^{-0.503}$ . Apesar dessa concordância, novamente, não se empregou diretamente os valores em unidades de rede na correlação para comparação de valores absolutos, apenas uma verificação da tendência da curva.

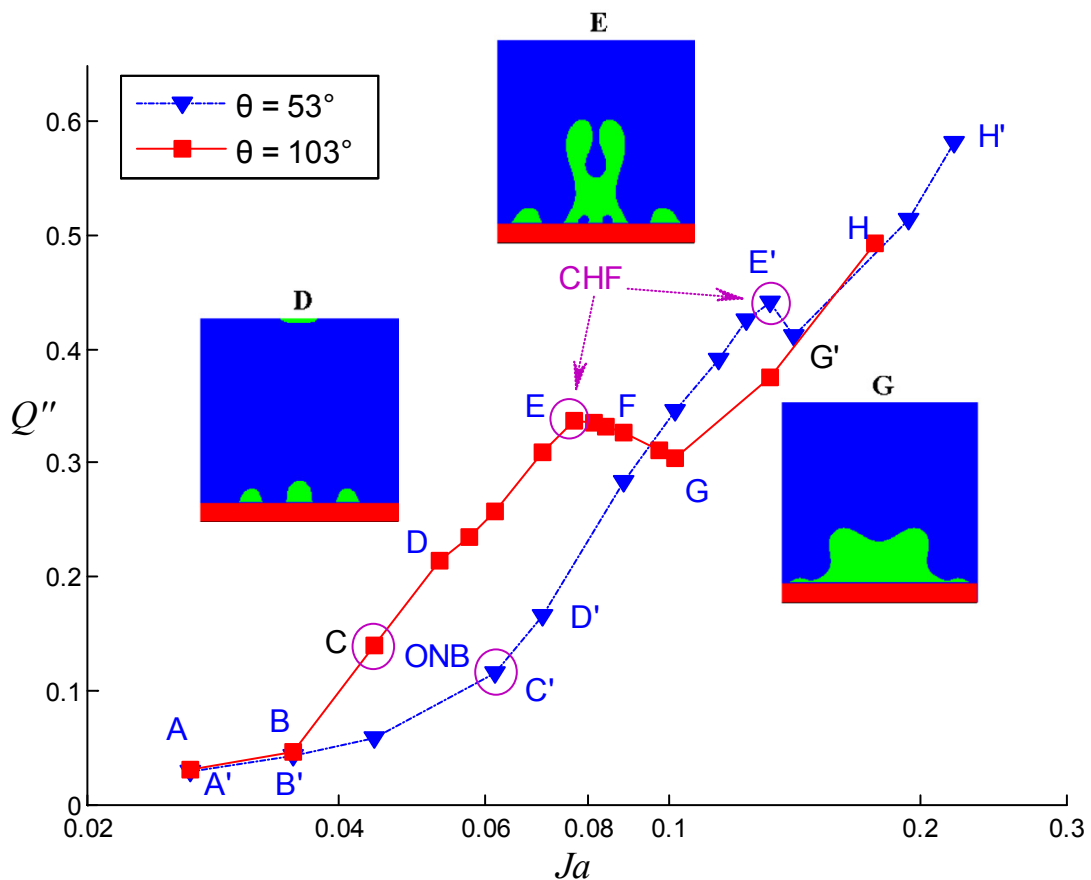
Gong e Cheng (2015a) empregaram o modelo apresentado no trabalho anterior para estudar os efeitos de molhabilidade da superfície na ebulição. Para estes estudos, os autores simularam também um substrato sólido na parte inferior do domínio computacional, e aplicaram condição de temperatura conhecida na fronteira do substrato. Com isso, o calor é transferido por

condução através do sólido, e ocorre uma transferência de calor conjugada entre a superfície e o fluido. A motivação é tornar a simulação mais próximo do que encontrado em condições experimentais. A equação de estado empregada é a de Peng-Robinson, e o fluido simulado é água, mas não ficou explícito as considerações em relações aos parâmetros da equação de estado. Com base em trabalhos anteriores dos autores, provavelmente, apenas o fator acêntrico da água foi levado em conta, enquanto os parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $R$  são dados distintos dos valores físicos, sem maiores discussões. No estado inicial, o domínio está preenchido com líquido saturado a  $T = 0.9T_c$ . Em relação aos mecanismos da ebulição, os autores afirmam que a baixa temperatura local e alto fluxo de calor abaixo das bolhas nas superfícies hidrofílicas é uma evidência da existência da microcamada líquida confinada entre a bolha e a superfície. É importante ressaltar que a microcamada não foi observada diretamente na simulação, uma vez que seu tamanho físico é em torno de  $4\mu\text{m}$ . Para as superfícies hidrofóbicas, foram observados maiores valores de temperatura e baixos fluxos na região de crescimento de bolhas, dando suporte à afirmação de que não existiria a microcamada nesse caso. Os autores também levantaram curvas de ebulição para os dois tipos de superfície, exibidas na Fig. 7. De forma geral, a curva de ebulição para superfície hidrofóbica (A-B-C-D-E-F-G-H), quando comparada com da superfície hidrofílica (A'-B'-C'-D'-E'-F'-G'-H') apresenta maiores fluxos de calor a menores temperaturas, por favorecer a nucleação de bolhas mais rapidamente, mas um fluxo crítico de calor menor, por também formar um filme de vapor a menores sobreaquecimentos da superfície. Estudos semelhantes para superfícies mistas, ou seja, com regiões hidrofílicas e hidrofóbicas, foram realizados pelos mesmos autores Gong e Cheng (2015b).

Li et al. (2015) afirmaram serem os primeiros a reproduzirem os três regimes de ebulição (nucleada, transição e em filme) empregando o método de Boltzmann em rede. Os autores empregaram um método de esquema de força proposto Li, Luo e Li (2013), e a abordagem híbrida com diferenças finitas e esquema de Runge-Kutta para solução da evolução da temperatura. A equação de estado de Peng-Robinson foi utilizada com fator acêntrico da água, e os parâmetros  $a = 3/49$ ,  $b = 2/21$  e  $R = 1$ . O domínio inicialmente está preenchido com líquido saturado a  $T = 0.86T_c$ . Além de observarem os regimes de ebulição, os autores investigaram a influência da molhabilidade da superfície e reportaram que observaram redução no fluxo crítico de calor com o aumento do ângulo de contato, e também processo de ebulição em filmes com menores sobreaquecimentos do aquecedor. Embora essas tendências sejam coerentes qualitativamente com o esperado fisicamente, o estudo foi todo conduzido em unidades de rede, sem comparação com alguma condição experimental de forma quantitativa.

Gong, Cheng e Quan (2016) utilizaram o modelo descrito em um trabalho anterior, Gong e Cheng (2012a), para investigar a ebulição na superfície um substrato que possui uma única cavidade retangular. A equação de estado de Peng-Robinson foi utilizada para cálculo da pressão termodinâmica, e o domínio é preenchido com líquido saturado a  $T = 0.9T_c$ . Diferentes molhabilidades de superfície foram simuladas, e os autores observaram que a nucleação de bolhas ocorre na região central da cavidade para superfícies hidrofílicas e nos cantos para condição de

Figura 7 – Curva de ebulição para superfície hidrofóbica (A-B-C-D-E-F-G-H) e hidrofóbica (A'-B'-C'-D'-E'-F'-G'-H').



Fonte: Gong e Cheng (2015a).

superfície hidrofóbica. O diâmetro de desprendimento da bolha cresce à medida que se aumenta o ângulo de contato da superfície. Além disso, os autores também observaram pouca influência no comportamento de crescimento e desprendimento quando a profundidade da cavidade é pequena. Porém, para a superfície hidrofílica, foi observado um valor de profundidade crítica a partir do qual há a formação de uma bolha residual, aumentando a frequência de desprendimento. Da mesma forma, também foi reportado uma largura crítica, a partir da qual o diâmetro e frequência de desprendimento das bolhas, e conseqüentemente, a transferência de calor aumentam com o aumento da largura da cavidade.

Na segunda parte do estudo anterior, Gong e Cheng (2016), empregando os mesmos modelos e condições, investigaram o fenômeno de ebulição com múltiplas cavidades retangulares na superfície aquecida. Dentre as observações, os autores notaram que existe uma inibição mútua de nucleação entre as cavidades, que depende das posições, das distâncias relativas e das dimensões das cavidades. De maneira geral, as cavidades mais largas e com maior profundidade tendem a ser mais ativas no quesito de nucleação do que cavidades rasas e estreitas, as quais

podem ter sua nucleação completamente suprimida se o espaçamento entre elas for muito pequeno. Os autores também observaram um maior fluxo de calor quando se utiliza múltiplas cavidades, com efeito mais pronunciado em superfícies hidrofóbicas. Também, foi simulada uma superfície mista, com a cavidade hidrofóbica e o resto da superfície hidrofílica. Nessa configuração, foi obtido o maior fluxo de calor na ebulição nucleada quando comparado com a superfície totalmente hidrofóbica ou hidrofílica.

Li, Zhou e Yan (2017) apresentaram algumas inconsistências na abordagem de resolução da equação de temperatura com uma segunda função de distribuição de Gong e Cheng (2012a). Os autores argumentaram que o modelo utiliza simplificações que podem ser válidas para escoamentos monofásicos incompressíveis ou nas regiões onde há uma fase predominante, mas que não são totalmente válidas nas regiões interfaciais, como mencionado anteriormente na Seção 2.3.3. Utilizando a análise de Chapman-Enskog, os autores propuseram então uma nova formulação, com operador de colisão MRT, capaz de tratar as inconsistências na equação de conservação de energia, ocasionadas pelo termo fonte e termos da função de distribuição de equilíbrio. Em seguida, a equação de Peng-Robinson, com parâmetros  $a = 3/49$ ,  $b = 2/21$  e  $R = 1$ , foi utilizada para comparação em uma simulação da nucleação de uma única bolha. Para simular o sítio de nucleação, um único ponto central é colocado a  $T = 1.25T_c$ . Com isso, os autores demonstraram diferenças consideráveis em diâmetro e frequência de desprendimento comparando o modelo proposto e de Gong e Cheng (2012a), mas sem diferenças significativas com a abordagem híbrida com diferenças finitas.

Gong e Cheng (2017) utilizaram a equação de energia com o termo fonte apresentado por Li, Zhou e Yan (2017) para investigação dos efeitos das propriedades térmicas da parede sólida e da fase de vapor na ebulição. Os autores utilizaram a equação de Peng-Robinson com os parâmetros  $a = 2/49$ ,  $b = 2/21$ ,  $R = 1$  e o fator acêntrico da água de 0.344. Inicialmente, o domínio é preenchido com fluido a  $T = 0.9T_c$ . Este é um dos poucos trabalhos que mostram terem realizados validação com duas malhas,  $200 \times 700$  e  $400 \times 1400$ , mostrando valores de coeficiente de calor muito próximos nessas duas malhas, no regime de ebulição em filme. Os resultados encontrados de fluxo de calor no regime de ebulição em filme foi comparado com a correlação de Berenson (1961), com divergências de 3.4%. O fluxo de calor crítico também foi confrontado com a correlação de Kandlikar (2001), com diferenças de até 16.6%. Importante ressaltar que foram utilizados os valores adimensionalizados para comparação. Entre os resultados do estudo, os autores não encontraram influência da condutividade térmica da fase de vapor no fluxo crítico de calor. No entanto, o aumento do valor dessa propriedade restringe o regime de transição a uma menor faixa de sobreaquecimento. Além disso, foi observada uma distribuição de temperatura irregular na superfície do aquecedor que fica em contato com o líquido, mostrando que efeitos bidimensionais devem ser levados em conta para avaliar o fluxo de calor nessa região. Por fim, também não se observou influência das propriedades térmicas do sólido do substrato nos regimes de nucleação e em filme, apenas no regime de transição. Os valores de fluxo crítico de calor também não se alteram com essas variáveis, mas ocorrem a uma

menor temperatura de sobreaquecimento para capacidade térmica maior do aquecedor.

Yu et al. (2018) realizaram investigações utilizando a abordagem híbrida com operador de colisão MRT em simulações tridimensionais. Na parede inferior, existe um aquecedor formado por um substrato sólido no formato de um pilar retangular, cuja superfície superior é hidrofóbica, sendo todas as outras superfícies do domínio hidrofílicas. A equação de estado de Peng-Robinson foi utilizada sem maiores especificações sobre os parâmetros empregados. Inicialmente, o domínio é preenchido por líquido saturado a  $T = 0.8T_c$ . Nesse trabalho, foi investigada a influência no fluxo de calor pelas dimensões do pilar e ângulo de contato das superfícies. Foi observado que o fator mais influente é o ângulo de contato das superfícies hidrofílicas do domínio. Um aumento em seu valor pode aumentar a formação das bolhas. No entanto, isso também pode facilitar atingir o regime de ebulição de transição ou em filme, que são menos eficientes em termos de troca de calor. O ângulo de contato e dimensões ótimas do pilar são dependentes do sobreaquecimento aplicado no aquecedor, sendo que ambas variáveis diminuem de valor com o aumento do superaquecimento.

Li et al. (2020) empregaram o mesmo modelo apresentado em Yu et al. (2018) para simulações tridimensionais de uma superfície aquecida com um pilar retangular, cuja superfície superior é hidrofóbica. Além disso, a superfície superior dos pilares está sujeita a uma região de diferente molhabilidade, que podem assumir formatos quadrados, circulares ou quadrados rotacionados a  $45^\circ$ . Para as simulações, empregou-se os parâmetros  $a = 3/49$  e  $b = 1$  para a equação de Peng-Robinson, e o domínio é iniciado parcialmente com líquido e vapores saturados a  $T = 0.8T_c$ . Os autores mostraram que a largura da região hidrofóbica tem grande relevância na melhora da performance de transferência de calor. A melhor performance é atingida quando a largura dessa região permite nucleação de bolhas que não coalescem com outras bolhas que se formam na base do pilar. Além disso, o uso de um formato quadrado para a região hidrofóbica na superfície superior do pilar resultou em maiores trocas de calor quando comparado com os outros formatos estudados.

No âmbito de aplicação, alguns trabalhos mais recentes utilizando o método do pseudopotencial tem seguido na direção de investigação da troca de calor de superfícies com molhabilidade mista (LI et al., 2021; YU et al., 2021; CAO et al., 2022; CAI et al., 2023). No aspecto mais fundamental, também existem estudos dedicados a melhor compreensão dos mecanismos e comportamentos do método. Por exemplo, Yu et al. (2020) investigaram duas condições de contorno para interação fluido-sólido: uma abordagem muito popular chamada de *halfway bounce-back* (KRÜGER et al., 2017) e uma proposta por Mei, Luo e Shyy (1999) para superfícies curvas. Os autores concluíram que o emprego de *halfway bounce-back* não é muito adequado para simulações de ebulição devido à criação de sítios de nucleação artificiais em superfícies curvas. Com a condição de Mei, Luo e Shyy (1999), por outro lado, foram constatados problemas de conservação de massa, e por isso, os autores propuseram um termo de correção. Em outro exemplo, Li, Yu e Wen (2020) realizaram uma análise teórica com uma formulação simplificada



para estudar o mecanismo de nucleação do método do pseudopotencial. Os autores demonstraram que, para o mesmo superaquecimento de superfície, a densidade reduz mais rapidamente para superfícies hidrofóbicas que uma superfície hidrofílica, e por isso nucleação ocorre mais facilmente naquele tipo de superfície. A mesma análise também foi utilizada para mostrar como gradiente de densidade decai mais rapidamente em superfícies côncavas, facilitando a nucleação também nessas regiões. Recentemente, Czelusniak, Cabezas-Gómez e Wagner (2023) realizaram estudos teóricos e numéricos para discutir a implementação numérica da força da gravidade utilizando a formulação  $\mathbf{F} = \rho\mathbf{g}$  e a frequentemente utilizada  $\mathbf{F} = (\rho - \bar{\rho})\mathbf{g}$ ,  $\bar{\rho}$  sendo a densidade média no domínio. Os autores mostraram que para um problema unidimensional, as duas formulações resultam em fenômenos físicos distintos, com mudanças de fases espúrias devido às variações de pressão pelo efeito gravitacional, especialmente, na segunda formulação.

Alguns pontos do método do pseudopotencial ainda estão em aberto para torná-lo uma ferramenta mais plausível para simulações comparáveis a experimentos físicos. O primeiro a se comentar é que a estabilidade do método decai quando se resolve a conservação de energia, o que limita sua aplicação a temperaturas mais próximas às temperaturas críticas, em geral  $T \geq 0.7T_c$ , o que diminui as razões de densidades da ordem de  $10^3$  para  $10^2$ . Um segundo ponto pouco discutido nos trabalhos anteriores diz respeito ao refinamento de malhas, e de certa forma, a relação das unidades físicas e de redes. Isto porque para o refinamento, é necessário que seja mantido o mesmo problema físico, simulado com um menor  $\Delta x$ , e poucos trabalhos trazem se seus dados são independentes da malha.

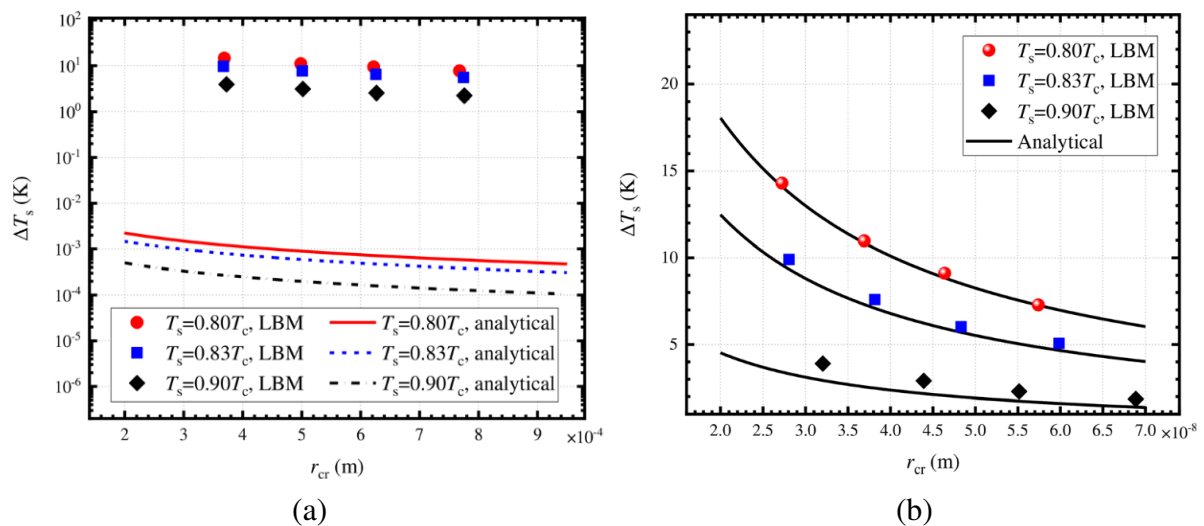
Um trabalho recente que investiga esse ponto foi realizado por Wang et al. (2022). Os autores mostraram que o mapeamento entre unidades de rede e unidades físicas possui algumas peculiaridades utilizando o método do pseudopotencial quando comparado com o método de Boltzmann para problemas monofásicos. Isso ocorre pois deve ser levado em conta uma conversão consistente também da tensão superficial, entre unidades de rede e unidades físicas. Os autores fizeram um levantamento, exibido na Tab. 5, mostrando que a maioria dos trabalhos utiliza a estratégia de adimensionalização quando realizam comparações com dimensões físicas. No Apêndice C, os principais números adicionais utilizados em trabalhos de ebulição e suas interpretações físicas são apresentados. No geral, utiliza-se o comprimento capilar,

$$l_0 = \frac{\sigma}{g(\rho_V - \rho_L)}, \quad (2.107)$$

como um comprimento característico e  $t_0 = \sqrt{l_0/g}$  como tempo característico para adimensionalização tanto nas unidades de redes e físicas, para comparação. Ao mesmo tempo, também espera-se que os valores reduzidos de temperatura  $T/T_c$  e pressão  $p/p_c$  sejam equivalentes nos dois sistemas. No entanto, os adimensionais obtidos com teorema de Buckingham são dependentes apenas de variações da temperatura e pressão, sem dependência dos valores absolutos de temperatura e pressão crítica, indicando uma certa inconsistência nesse método. Com isso, os autores realizaram uma análise das unidades físicas e encontraram um método de mapeamento que é determinado pela tensão superficial e pela equação de estado. No estudo publicado, a

equação de estado de Peng-Robinson foi empregada para exemplificação do mapeamento, por ser uma das mais utilizadas. Com isso, foi demonstrado que a conversão consistente para esse caso depende dos parâmetros  $a$ ,  $b$ ,  $R$  da equação de Peng-Robinson, Eq. (2.88), e da tensão superficial  $\sigma$ , em unidades de rede. Para ilustrar a diferença entre o método de conversão tradicional e o proposto, os autores realizaram a simulação da ebulição em uma cavidade retangular, com domínio preenchido com líquido saturado a  $T = 0.8T_c, 0.83T_c, 0.90T_c$ . Os resultados observados de raio crítico necessário para crescimento da bolha para fora da cavidade foram convertidos de unidades de rede para unidades físicas utilizando os dois mapeamentos, e comparados com a relação desenvolvida por Hsu (1962). Os valores de sobreaquecimento da superfície e raio críticos são exibidos na Fig. 8.

Figura 8 – Raio crítico de nucleação da bolha com a temperatura de superaquecimento utilizando (a) sistema convencional de conversão de unidades, (b) sistema de conversão proposto por Wang et al. (2022).



Fonte: Wang et al. (2022).

Desses resultados, nota-se que utilizando o sistema de conversão proposto pelos autores, há uma melhor concordância com o valor esperado analiticamente. Porém, um ponto a ser destacado e não muito discutido no trabalho é em relação às escalas obtidas. Empregando o método proposto pelos autores, os raios críticos são da ordem de  $10^{-8}$  m, enquanto o  $\Delta x$  na ordem de  $10^{-10}$  m, valores extremamente pequenos. No trabalho presente, algumas implicações desse sistema serão discutidas.

### 2.4.3 Comentários finais

Nesta seção, foi apresentada a formulação original do método do pseudopotencial, suas desvantagens e os principais trabalhos e estudos para superá-las. No que diz respeito ao aprimoramento do controle de características pertinentes, pode-se dizer que existem duas frentes

Tabela 5 – Levantamento realizado por Wang et al. (2022) sobre modelos utilizados para simulações de ebulição e representação das variáveis simuladas.

| Trabalho                  | Modelos e condições das simulações   | Representação das variáveis.  |
|---------------------------|--|---|
| Fang et al. (2017)        | Operador MRT acoplado ao LBM térmico. Peng-Robinson, $a = 0.02267$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.86T_c$ e $T_s = 0.68T_c$ . | Tempo, comprimento e fluxo de calor em unidades de rede. Temperaturas na forma reduzida $T_r = T/T_{cc}$ . Sobreaquecimento da superfície dado pelo numero de Jakob (Ja).   |
| Mu et al. (2017)          | Operador MRT acoplado ao LBM térmico. Peng-Robinson, $a = 3/49$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.86T_c$ .                      | Tempo, comprimento e fluxo de calor são todos representados em unidades do Sistema Internacional (SI). Entretanto, o processo de conversão de unidades não foi detalhado.   |
| Sayyari e Esfahani (2018) | Operador MRT acoplado ao LBM térmico. Peng-Robinson, $a = 3/49$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.86T_c$ .                      | Tempo e comprimento adimensionalizados por valores característicos. Fluxo da calor em unidades de rede. Temperatura na forma reduzida $T_r = T/T_c$ . Empregados números de Nusselt e Jakob.                                    |
| Zhang et al. (2018)       | Operador MRT abordagem híbrida com DF. Peng-Robinson, $a = 3/49$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.86T_c$ .                     | Tempo e comprimento adimensionalizados por valores característicos. Temperatura superfície dada por Ja.   |
| Chang et al. (2019)       | Operador BGK. Peng-Robinson, $a = 1/49$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.85T_c$ .  | O tempo e comprimento adimensionalizados por valores característicos. O fluxo de calor é dado em unidades de rede. Temperaturas dadas na forma reduzida. A tensão superficial dada pelo número de capilaridade (Ca).            |
| Ma e Cheng (2019)         | Operador MRT acoplado ao LBM térmico. Peng-Robinson, $a = 2/49$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.9T_c$ .                       | O tempo e comprimento adimensionalizados por valores característicos. O fluxo de calor é adimensionalizado por um valor de referência. Temperatura dada na forma reduzida. Temperatura de superfície dada pelo número de Jakob. |
| Zhang et al. (2021)       | Operador MRT acoplado ao LBM térmico. Peng-Robinson, $a = 3/49$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.91T_c$ .                      | O tempo e comprimento adimensionalizados por valores característicos. O coeficiente de transferência de calor é dado pelo Nu. O fluxo de calor é dado em unidades de rede. O superaquecimento adimensionalizado como Ja.        |
| Chen et al. (2022)        | Operador MRT acoplado ao LBM térmico. Peng-Robinson, $a = 2/49$ , $b = 2/21$ , $R = 1$ . Temp. da superfície: $T_s = 0.88T_c$ .                      | O tempo e o comprimento adimensionalizados por valores característicos. O fluxo de calor é dado por um valor de referência. As temperaturas são dadas na forma reduzida. O superaquecimento é dado pelo número de Ja.           |

Fonte: Wang et al. (2022).

principais, que compõem o estado da arte. Uma delas é o controle do comportamento da espessura de interface, tensão superficial e curva de saturação através da inclusão de parâmetros livres. Esse tipo de abordagem já foi utilizada em trabalhos como Sbragaglia et al. (2007) e Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009), mas os efeitos de terceira ordem devido à força pseudopotencial começaram a serem mais estudados e compreendidos na última década (LYCETT-BROWN; LUO, 2015; ZHAI; ZHENG; ZHENG, 2017; CZELUSNIAK et al., 2020).

A segunda abordagem que tem mostrado potencial para reduzir as instabilidades do método, principalmente para temperaturas em torno da metade da temperatura crítica em valores absolutos, é a alteração da equação de estado de forma a reproduzir comportamentos macroscópicos de interesse. Alguns trabalhos recentes que procuraram explorar alterar o comportamento da equação de estado para aprimorar a performance são Huang, Wu e Adams (2019), Peng et al. (2020) e Czelusniak et al. (2022).

Quando olhamos para escoamentos com nucleação, embora uma gama de estudos tenha produzido resultados interessantes, é possível notar que os resultados ficam limitados a regiões termodinâmicas próximas do ponto crítico, com temperaturas absolutas em torno de 70% da temperatura crítica. Vários motivos para isso podem ser destacados. O primeiro é que não são todas as técnicas de parâmetros ou alteração da equação de estado que são empregadas nesses estudos, atualmente. Além disso, a solução da equação de conservação de energia também adiciona complexidade e também tem contribuições nas instabilidades. Ainda, condições dinâmicas são mais severas que os testes estáticos, comumente utilizados para comparação e desenvolvimento de novas técnicas. Alguns estudos a respeito da influência de interfaces curvas nas densidades de equilíbrio são relativamente recentes (HUANG; YIN; KILLOUGH, 2019), bem como o mecanismo de nucleação do método pseudopotencial (LI; YU; WEN, 2020) e a consistência do esquema para solução da equação de energia (GUO; FENG; SAGAUT, 2021). Por fim, muitos resultados apresentados em estudos de nucleação ainda são apresentados de forma qualitativa, utilizando adimensionalização ou mesmo resultados em unidades de rede, apenas mostrando alguma tendência. Nesse ponto, um trabalho recente realizado por Wang et al. (2022) trouxe uma discussão importante sobre as inconsistências na conversão do sistema de unidades de rede para unidades físicas com o método do pseudopotencial.

Nesse contexto, o intuito do presente trabalho é, além de analisar e empregar novas técnicas do método do pseudopotencial, contribuir com discussões teóricas e simulações de ebulição a fim de elucidar pontos importantes ainda pouco discutidos como a convergência de resultados entre malhas. Com isso, espera-se contribuir para a robustez e evolução do método a ponto de torná-lo uma ferramenta computacional de valor para problemas de ebulição.



### 3 METODOLOGIA

#### 3.1 Implementação do método de Boltzmann em rede

A implementação computacional do método de Boltzmann em rede é muito relacionada com os conhecimentos utilizados nos métodos LGCA. Assim, a implementação computacional comum é dividida em dois passos: colisão (ou relaxação) e propagação, como mostrado na Fig. 9. A nomenclatura de colisão, relacionado aos métodos LGCA, se deu pois nessa etapa que ocorria a mudança da direção das velocidades das partículas. No LBM, também é nesse passo que se implementa a influência do operador de colisão. No entanto, alguns autores preferem a nomenclatura de relaxação, pois outros fatores podem ser levados em conta, principalmente as forças externas. O método de colisão, portanto, é responsável por atualizar os valores das funções de distribuição para cada uma das velocidades do conjunto, e pode ser escrito da seguinte forma:

$$f_i^*(t, \mathbf{x}) = f_i(t, \mathbf{x}) + \Omega(f_i, f_i^{\text{eq}}) + F_i. \quad (3.1)$$

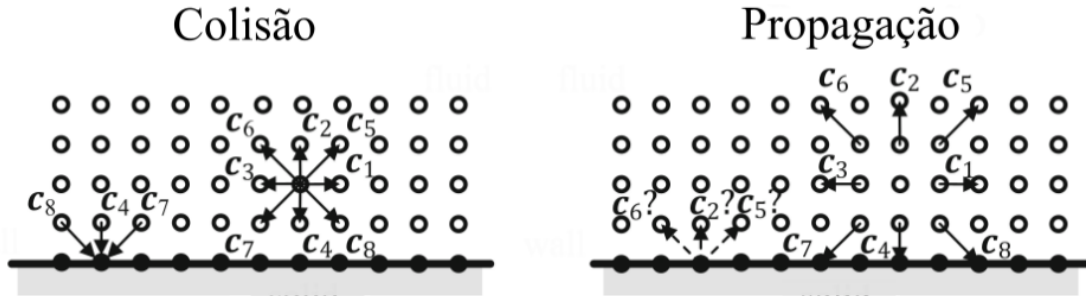
Na segunda etapa, esses valores são propagados para os nós adjacentes, seguindo:

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) = f_i^*(t, \mathbf{x}). \quad (3.2)$$

Aqui, conseguimos notar algumas características interessantes do LBM. No passo de colisão, por exemplo, Eq. (3.1), se desconsiderado o termo relacionado à força externa  $F_i$ , as operações são totalmente locais. Ou seja, é possível calcular o valor da função colidida  $f_i^*$  apenas com o conhecimento dos valores de variáveis na própria posição  $\mathbf{x}$ . No caso, os valores de  $f_i(t, \mathbf{x})$ , e também de  $\rho(\mathbf{x})$  e  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ , necessários para o cálculo de  $f_i^{\text{eq}}$ . Essa característica torna o LBM um excelente candidato para técnicas computacionais de paralelização, seja em sistemas de memória distribuída ou compartilhada. No campo de computação de alta performance, há muitas pesquisas ativas com intuito de aumentar o desempenho das mais variadas técnicas de computação relacionadas ao método (TÖLKE; KRAFCZYK, 2008; XIAN; TAKAYUKI, 2011; OBRECHT et al., 2011; OLIVEIRA, 2015; KRAUSE et al., 2021; LATT et al., 2021).

O termo relacionado às forças externas  $F_i$  dependem do problema de interesse. Para os casos em que há um campo constante, como é o caso da gravidade, o passo de colisão continua totalmente localizado, já que é possível avaliar o efeito em cada um dos nós por  $\mathbf{F}(t, \mathbf{x}) = \rho(t, \mathbf{x})\mathbf{g}$ . No entanto, quando utilizamos o método do pseudopotencial para simulações com mais de uma fase, é necessário avaliar a força intermolecular, Eq. (2.81), que envolve a avaliação da função pseudopotencial em nós adjacentes,  $\psi(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$ . Isso adiciona uma não-localidade ao passo de colisão. Vale notar que isso não é exclusividade do método pseudopotencial, mas também ocorre nas outras abordagens, uma vez que o equilíbrio de fases macroscópico está relacionado com o gradiente da densidade, um termo inerentemente não-local. Dessa forma,

Figura 9 – Representação esquemática da colisão e propagação das funções de distribuição  $f_i$ . Embora apenas alguns nós são representados, as operações ocorrem para todos os pontos do domínio.



Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017, p. 165).

considerando a possibilidade de quebrar o domínio indefinidamente e delegar cada uma dessas partições a uma unidade de processamento, a menor unidade computacional deve ter em sua memória os valores do nó a ser atualizado e de toda a sua vizinhança. Logo, as operações não-locais causam impacto na paralelização, pois para serem realizadas corretamente, é necessário incluir informações das vizinhanças das fronteiras do subdomínio, e também comunicar corretamente essa informação entre as partições. Esse fato também pode ser considerado um argumento computacional a favor do desenvolvimento do método pseudopotencial com o conjunto D2Q9 em detrimento dos métodos *multirange* ou representações de maiores ordem, que podem englobar até 32 pontos da vizinhança para atualização do nó central.

Em relação ao passo de propagação, Eq. (3.2), sua formulação que é inerentemente não-local, e vale as mesmas observações em relação ao método pseudopotencial. Essa divisão em dois passos, portanto, também tem suas razões computacionais. No entanto, apesar de ser muito comum devido à simplicidade e familiaridade, não é necessariamente universal. Na verdade, a realização da relaxação e propagação ao mesmo tempo, quando possível, evita percorrer o domínio repetidamente e traz ganhos de performance (LATT et al., 2021). Porém, mesmo nesses casos, a nomenclatura é mantida, e diz-se que os passos de colisão e relaxação são realizados em uma única varredura do domínio.

### 3.2 Inicialização

A inicialização do LBM também traz maior complexidade quando comparado com as técnicas de mecânica dos fluidos computacional tradicionais. Isso ocorre por termos que lidar com os valores de funções de distribuição,  $f_i$ , ao invés dos campos macroscópicos de densidade,  $\rho$ , e velocidade,  $\mathbf{u}$ . Como a relação entre a função de distribuição e as variáveis macroscópicas se dão através dos cálculos de momento, temos mais incógnitas que equações, e diferentes técnicas de inicialização podem ser desenvolvidas. Como exemplo, podemos utilizar a aproximação da

função de distribuição inicial como  $f \approx f^{(0)} + f^{(1)}$ . Essa função  $f^{(1)}$ , da análise de Chapman-Enskog, é dependente dos gradientes das variáveis macroscópicas. Assim, o seu cálculo se torna mais complexo, mas o emprego dessa inicialização resulta em valores do tensor de tensões mais coerentes com os campos macroscópicos iniciais. Esse tipo de inicialização é importante em problemas cuja evolução temporal são muito dependentes da condição inicial. Essas e outras técnicas são discutidas mais profundamente no trabalho de Caiazzo (2005) e Huang, Wu e Yong (2015).

Em simulações que são independentes da condição inicial, como por exemplo em simulações com regime permanente, ou simulações que decaem para um estado definido após um período transiente, a inicialização com a função de equilíbrio geralmente é suficiente (KRÜGER et al., 2017). Dessa forma, temos:

$$f_i(t = 0, \mathbf{x}) = f_i^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}), \quad (3.3)$$

ou seja, os valores das funções de distribuição podem ser calculadas apenas com o conhecimento dos campos macroscópicos iniciais de interesse.

### 3.3 Condições de contorno

A implementação de condições de contorno no LBM, assim como as condições iniciais, também devem ser realizadas sobre as funções de distribuição ao invés dos valores macroscópicos diretamente. Com isso, diferentes técnicas para levar a um mesmo comportamento macroscópico podem ser desenvolvidas. A seguir, as condições utilizadas no trabalho presente são exibidas.

#### 3.3.1 Condições periódicas

Essas condições são utilizadas em escoamentos que possuem uma periodicidade espacial. Ou seja, a ideia é fazer com que os valores dos campos macroscópicos em uma região de saída do domínio computacional sejam iguais ao campos na região de entrada. Isso pode ser alcançado no LBM aplicando essa mesma lógica para as funções de distribuição  $f$ .

Uma das formas de se implementar essa condição consiste em utilizar nós fantasmas ou virtuais para além do domínio, e assegurar que as funções colididas  $f^*$  nessas regiões são iguais às funções na iminência da entrada do domínio computacional na fronteira oposta, como visto na representação na Fig. 10. Considerando a região periódica com tamanho  $\mathbf{L}$ , pode-se escrever a relação:

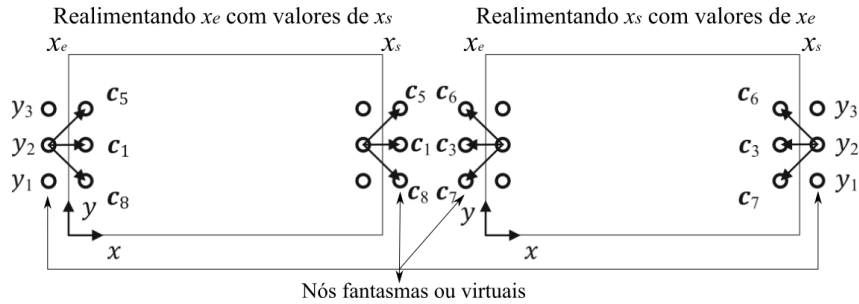
$$f^*(t, \mathbf{x}) = f^*(t, \mathbf{x} + \mathbf{L}). \quad (3.4)$$

#### 3.3.2 Condições de parede

Para as condições de não deslizamento na parede, foi empregado a condição de contorno de Zou e He (1997), juntamente com os termo de correção da quantidade de movimento propostos



Figura 10 – Representação esquemática da implementação de condição de contorno periódica.



Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017, p. 172)

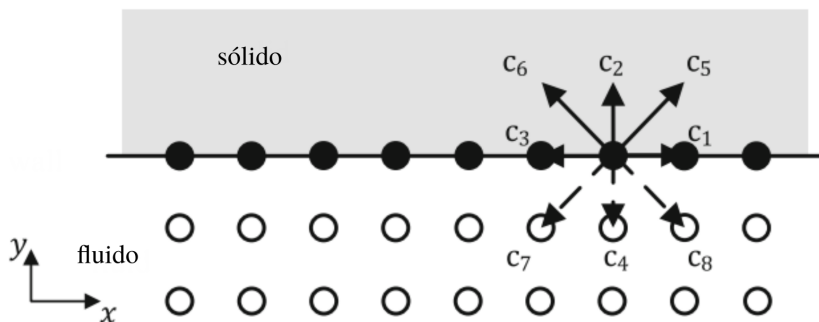
por Hecht e Harting (2010). Resumidamente, essa condição de contorno impõe que o desvio da função de equilíbrio,  $f_i^{neq} = f - f_i^{eq}$ , é rebatida ao encontrar uma parede sólida. Por essa razão, também é chamada de *bounce-back* de não-equilíbrio. Matematicamente, isso é expresso por:

$$f_{\bar{i}}^{neq}(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{neq}(\mathbf{x}_b, t) - \frac{\mathbf{t} \cdot \mathbf{c}_i}{|\mathbf{c}_i|} N_t - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{c}_i}{|\mathbf{c}_i|} N_n, \quad (3.5)$$

em que  $\bar{i}$  representa a população na direção do vetor de velocidade  $\mathbf{c}_{\bar{i}} = -\mathbf{c}_i$ ,  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{n}$  são, respectivamente, vetores unitários na direção tangente e normal à fronteira e  $N_t$  e  $N_n$  são os termos de correção na quantidade de movimento relacionados às direções de  $\mathbf{t}$  e  $\mathbf{n}$ , respectivamente.

Para exemplificar, vamos considerar a imposição de uma velocidade conhecida,  $\mathbf{u}_w = (u_{w,x}, u_{w,y})$ , na parede superior, em uma simulação bidimensional, com o modelo D2Q9, como representado na Fig. 11.

Figura 11 – Representação esquemática de uma parede superior coincidente com a direção horizontal das velocidades discretizadas. As populações desconhecidas são representadas por linhas tracejadas, e as conhecidas do passo de propagação, em linhas contínuas.



Fonte: Krüger et al. (2017).

Neste exemplo, as funções de distribuição  $f_4$ ,  $f_7$  e  $f_8$ , que seriam propagadas de uma região exterior para o interior do domínio, são desconhecidas. Dos momentos de ordem 0 e da

componente y do momento de ordem 1, sabemos que:

$$\begin{cases} \rho_w = \sum_i f_i = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \\ \rho_w u_{w,y} = \sum_i c_{iy} f_i + \frac{F_y}{2} = (f_2 + f_5 + f_6) - (f_4 + f_7 + f_8) + \frac{F_y}{2}. \end{cases} \quad (3.6)$$

Apesar de termos 4 variáveis desconhecidas no sistema na Eq. (3.6) ( $f_4, f_7, f_8$  e  $\rho_w$ ), podemos tratar a soma das funções de distribuição desconhecidas,  $f_4 + f_7 + f_8$ , como uma única variável. Dessa forma, é possível encontrar a densidade do nó da fronteira consistente com a condição da velocidade que queremos impor:

$$\rho_w = \frac{1}{1 + u_{w,y}} \left[ f_0 + f_1 + f_3 + 2(f_2 + f_5 + f_6) + \frac{F_y}{2} \right]. \quad (3.7)$$

Para as funções desconhecidas  $f_4, f_7$  e  $f_8$ , aplicamos então a regra exibida na Eq. (3.5):

$$\begin{cases} f_4 = f_2 + (f_4^{eq} - f_2^{eq}) - N_y \\ f_7 = f_5 + (f_7^{eq} - f_5^{eq}) - N_x - N_y \\ f_8 = f_6 + (f_8^{eq} - f_6^{eq}) + N_x - N_y. \end{cases} \quad (3.8)$$

Pela equação da função de equilíbrio, Eq. (2.36), é possível reescrever o sistema dado na Eq. (3.8) como:

$$\begin{cases} f_4 = f_2 - \frac{2}{3} \rho_w u_{w,y} - N_y \\ f_7 = f_5 - \frac{1}{6} \rho_w (u_{w,x} + u_{w,y}) - N_x - N_y \\ f_8 = f_6 - \frac{1}{6} \rho_w (-u_{w,x} + u_{w,y}) + N_x - N_y. \end{cases} \quad (3.9)$$

O termo de correção  $N_x$  é definido através do momento de primeira ordem ao longo da direção tangencial à fronteira:

$$\begin{aligned} \rho_w u_{w,x} &= \sum_i c_{ix} f_i + \frac{F_x}{2} = (f_1 + f_5 + f_8) - (f_3 + f_6 + f_7) + \frac{F_x}{2} \\ &= (f_1 - f_3) - (f_7 - f_5) + (f_8 - f_6) + \frac{F_x}{2} \\ &= (f_1 - f_3) - \frac{1}{3} \rho_w u_{w,x} + 2N_x + \frac{F_x}{2}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

o qual resulta em  $N_x$ :

$$N_x = -\frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{1}{3} \rho_w u_{w,x} - \frac{F_x}{4}. \quad (3.11)$$

De forma similar, o termo  $N_y$  pode ser encontrado através da componente y do momento de primeira ordem:

$$\begin{aligned} \rho_w u_{w,y} &= \sum_i c_{iy} f_i + \frac{F_y}{2} = (f_2 + f_5 + f_6) - (f_4 + f_7 + f_8) + \frac{F_y}{2} \\ &= (f_2 - f_4) - (f_7 - f_5) + (f_6 - f_8) + \frac{F_y}{2} \\ &= \frac{1}{3} \rho_w u_{w,y} + 3N_y + \frac{F_y}{2}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

resultando em:

$$N_y = -\frac{F_y}{6}. \quad (3.13)$$

Substituindo as Eqs. (3.11) e (3.13) no sistema apresentado na Eq. (3.9), obtemos os valores a serem impostos para as funções desconhecidas que garantem a velocidade da fronteira  $u_w$  desejada:

$$\begin{aligned} f_4 &= f_2 - \frac{2}{3}\rho_w u_{w,y} - \frac{1}{6}F_y \\ f_7 &= f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) - \frac{1}{2}\rho_w u_{w,x} - \frac{1}{6}\rho_w u_{w,y} - \frac{1}{4}F_x - \frac{1}{6}F_y \\ f_8 &= f_6 - \frac{1}{2}(f_1 - f_3) + \frac{1}{2}\rho_w u_{w,x} - \frac{1}{6}\rho_w u_{w,y} + \frac{1}{4}F_x - \frac{1}{6}F_y. \end{aligned} \quad (3.14)$$

### 3.3.3 Molhabilidade da superfície

A interação fluido-sólido que determina a molhabilidade da superfície foi simulada nesse trabalho utilizando três modelos distintos. Os dois primeiros utilizam um conceito de incluir uma força de adesão  $\mathbf{F}^{\text{ads}}$ , que possui influência apenas nas regiões de interface com o sólido.

O primeiro modelo utilizado, proposto por Benzi et al. (2006), é dada por:

$$\mathbf{F}^{\text{ads}}(\mathbf{x}, t) = -G \psi(\rho(\mathbf{x}, t), T(\mathbf{x}, t)) \psi(\rho_w(\mathbf{x}), T_w^*(\mathbf{x}, t)) \sum_i w_i s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) \mathbf{c}_i, \quad (3.15)$$

em que  $s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$  é uma função indicadora, que assume valor igual a 1 quando  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$  é uma posição correspondente a um nó sólido, e 0, caso contrário. O valor  $\rho_w$  é um parâmetro livre que determina a molhabilidade da superfície. No caso, quando se utiliza valores mais próximos à densidade de fase de vapor, temos uma superfície hidrofóbica, e da mesma maneira, para valores mais próximos da densidade de líquido, obtem-se uma superfície hidrofílica.

O segundo modelo, proposto por Li et al. (2014), é definida pela seguinte expressão:

$$\mathbf{F}^{\text{ads}}(\mathbf{x}, t) = -G_w \mathbf{x} \psi^2(\rho(\mathbf{x}, t), T(\mathbf{x}, t)) \sum_i w_i s(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) \mathbf{c}_i, \quad (3.16)$$

em que  $G_w$  é o parâmetro de controle da molhabilidade da superfície.

Quando empregado esses dois modelos, a força de interação em um nó da fronteira fluido-sólido é calculada, portanto, da seguinte forma:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = -G \psi(\mathbf{x}, t) \left( \sum_{j \in I^{\text{fluido}}} w_j \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t) \mathbf{c}_{ji} \right) + \mathbf{F}_i^{\text{ads}}(\mathbf{x}, t). \quad (3.17)$$

A última formulação empregada não utiliza uma força de adesão, mas uma camada de células fantasma nas fronteiras sólido-fluido, que seguem a seguinte relação, dada por Ding e Spelt (2007):

$$\rho_{i,0} = \rho_{i,2} + \tan\left(\frac{\pi}{2} - \theta\right) |\rho_{i+1,1} - \rho_{i-1,1}|, \quad (3.18)$$

em que  $\rho_{i,0}$  é a densidade na camada de células fantasmas na posição  $i$ , na direção  $x$  nesse caso. Esse modelo também é chamado por vezes de modelo geométrico. Nesse caso, a força de interação molecular pode ser calculada nos nós da interface fluido-sólido utilizando os valores dos nós fantasmas.

### 3.4 Algoritmo

A implementação do método de Boltzmann em rede pode ser resumida nos seguintes passos:

1. Inicialização da função de distribuição e termo de forças a partir dos campos macroscópicos conhecidos no instante inicial. Assim, utiliza-se a Eq. (2.36) para calcular  $f_i(t = 0, \mathbf{x}) = f_i^{\text{eq}}(t = 0, \mathbf{x})$ , e a Eq. (2.54) com o esquema de força escolhido para  $F_i(t = 0) = F_i(\mathbf{F})$ ;
2. Cálculo da função colidida  $f_i$  dada Eq. (3.1), utilizando operador BGK ou MRT;
3. Propagação das funções colididas, Eq. (3.2), para os nós adjacentes;
4. Implementação das condições de contorno nas regiões de fronteira para as funções de distribuição. Por exemplo, para a condição periódica, utiliza-se a Eq. (3.4) nas bordas do domínio computacional;
5. Com os campos macroscópicos do instante  $t$ , realizar o cálculo do avanço temporal do campo de temperaturas com o método de Runge-Kutta de 4 ordem;
6. Com a função  $f_i(t + \Delta t)$  definida em todo o domínio, é possível atualizar os campos macroscópicos de densidade, velocidade e força. Assim, ao final desse passo, todos os campos macroscópicos, incluindo temperatura, realizaram um avanço temporal de  $t$  para  $t + \Delta t$ ;
7. Repetição do passo 2 ao passo 5 até que um critério de convergência ou número de passos limite seja alcançado.

Assim, simplificando ainda mais, temos:

---

**Algoritmo 1:** Algoritmo simplificado do método de Boltzmann em rede.

---

**Entrada:**  $\rho(t = 0)$ ,  $\mathbf{u}(t = 0)$ , Número de nós  $n_x, n_y, (n_z)$ , Conjunto de velocidades (D2Q9, D3Q19, D3Q27, etc...)

**início**

$f_i(t = 0) \leftarrow f_i^{\text{eq}}(\rho(t = 0), \mathbf{u}(t = 0));$

$F_i(t = 0) \leftarrow F_i(\mathbf{F}(t = 0));$

$T \leftarrow T(t = 0);$

**enquanto** erro < tolerância OU número de passos < número máximo de passos

**permitido faça**

$f_i^* \leftarrow \Omega_i + F_i;$

$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) \leftarrow f_i^*(t, \mathbf{x});$

    Aplicar condições de contorno em  $f_i;$

$T \leftarrow$  atualizar campo de temperatura com método de Runge-Kutta;

$\rho \leftarrow \sum_i f_i;$

$\mathbf{u} \leftarrow \sum_i c_{i\alpha} f_i / \rho + F_i / (2\rho);$

**fim**

**fim**

---

### 3.5 Palabos

As simulações do trabalho presente, mais especificamente, as apresentadas no Capítulo 4, foram desenvolvidas utilizando a biblioteca de código livre Palabos, um acrônimo em inglês para *Parallel Lattice Boltzmann Solver*, em tradução livre, simulador paralelizado com método de Boltzmann em rede. A biblioteca Palabos é escrita na linguagem C++ e oferece uma gama de funções, que utilizam conhecimentos de computação de alta performance, estrutura de dados convenientes e paralelização em memória distribuída ou compartilhada através de troca de mensagens entre processos, definidas pelo padrão *Message Passage Interface* (MPI). Além disso, também há uma série de ferramentas relacionados com pré e pós-processamento, facilitando o armazenamento e análise de dados e interface com outras ferramentas. A manutenção e desenvolvimento de um software como esse, com uma certa robustez e capacidade de suportar extensões e mantendo uma boa performance, requer habilidades e quantidade de tempo que facilmente excedem o tempo de projeto de pesquisa de mestrado e doutorado (LATT et al., 2021), fato que incentiva o entendimento e uso dessas ferramentas.

A biblioteca vem sendo escrita desde 2010, sendo idealizada por Jonas Latt, e por isso, possui relações também com outra ferramenta de código aberto conhecida como OpenLB (KRAUSE et al., 2021), projeto também concebido inicialmente por Latt. Desde 2011, o Palabos é desenvolvido conjuntamente pela Universidade de Genebra e pelo grupo FlowKit-Numeca Group Ltd, sendo que em 2018, uma versão comercial chamada Omnis<sup>TM</sup> foi lançada, sem descontinuar a versão de código livre.

É válido ressaltar que existem também diversas outras bibliotecas com objetivos similares ao da biblioteca Palabos de fornecer ferramentas robustas para a comunidade científica.

Além do próprio OpenLB (KRAUSE et al., 2021), que apesar de origem e filosofia similares com o Palabos, já não compartilham nenhum código entre si, podemos citar a biblioteca Sailfish (JANUSZEWSKI; KOSTUR, 2014), mais focada em paralelização em unidades gráficas de processamento (*Graphical Processing Unit*, GPUs), foco semelhante ao do *solver* TCLB (ŁANIEWSKI-WOŁŁK; ROKICKI, 2016). Também existem os softwares HemeLB (MAZZEO; COVENEY, 2008), com técnicas para simulação de geometrias complexas, principalmente para escoamentos em fenômenos biológicos (e.g., aneurismas), e waLBerla (BAUER et al., 2021), com soluções para computação heterogênea, portanto, voltada para clusters computacionais. Todas essas ferramentas possuem código aberto, ou seja, ainda que não incluam o modelo pseudopotencial oficialmente, existe a possibilidade de acessar o código e realizar a alteração do código para implementá-lo. Também existem ferramentas computacionais comerciais que empregam o LBM, como o Omnis™ do FlowKit-Numeca Group Ltd, o PowerFLOW da Dassault Systèmes e o ProLB da CS Group.

A descrição completa de características técnicas e científicas do Palabos podem ser verificadas em Latt et al. (2021) e no manual do usuário (UNIVERSIDADE DE GENEVRA, 2020). Mas aqui, vamos destacar alguns conceitos chaves da ferramenta.

### 3.5.1 Ideia central

De forma resumida, pode-se dizer que o conceito central da biblioteca Palabos consiste na avaliação de que o passo de relaxação, Eq. (3.1), é responsável pelo modelo do fluido, uma vez que a evolução da função de distribuição  $e$ , por consequência, a equação macroscópica recuperada, dependem fortemente do que é implementado nessa etapa. Já a propagação, Eq. (3.2), apesar de sua importância para equação macroscópica, pode ser considerada como uma sequência de passos invariante, apenas responsável por levar a função de distribuição para os nós adjacentes. A ideia do Palabos, então, é fazer com que seu usuário foque apenas na implementação (e/ou definição) da dinâmica da colisão, enquanto o passo de propagação é realizado de maneira automática, eficiente e paralelizada.

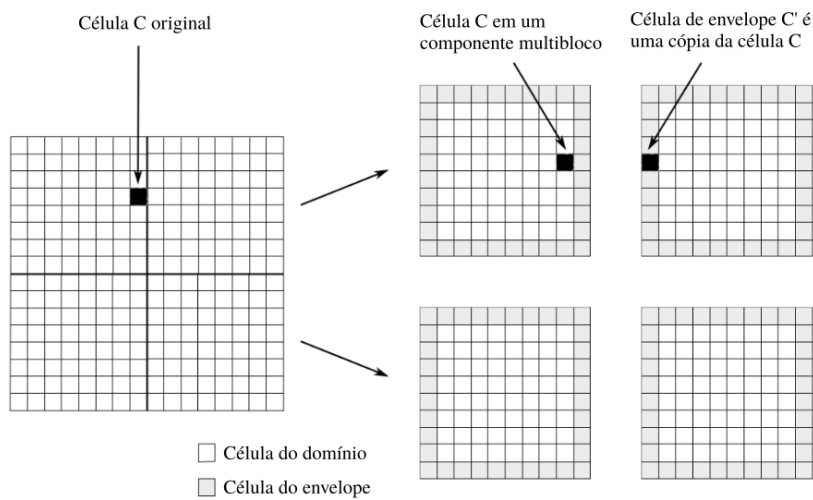
### 3.5.2 Estrutura de dados

A principal abstração das estruturas empregadas no Palabos disponibilizadas ao usuário é chamada de *MultiBlockLattice*. Essa estrutura é composta por uma outra abstração denominada células (*Cells*). Cada uma dessas células armazenam os valores da função de distribuição  $f_i$ , variáveis externas locais de interesse, como por exemplo, o valor de uma força  $\mathbf{F}(t, \mathbf{x})$ , e um funcional que contém a lógica de colisão dessa célula. A estrutura *MultiBlockLattice* possui esse nome, pois ela pode ser composta de um ou mais blocos, dependendo se o programa está sendo executado em um ou mais processos.

A quebra do domínio em diversos blocos é feita de maneira automática pela biblioteca, mas com a possibilidade de um certo controle por parte do usuário. Com isso, é possível rodar

o mesmo código de forma serializada ou paralela, com praticamente nenhuma mudança no código do usuário, apenas alterando parâmetros de número de processos durante a execução. A comunicação entre esses blocos também é gerenciada pelo Palabos. Essa comunicação basicamente consiste em atualizar as células em uma camada chamada de envelope, que são cópias das células de fronteira dos blocos adjacentes, como mostrado na Fig. 12. Com isso, garante-se a interdependência dos cálculos não-locais com vizinhança de um nó.

Figura 12 – Representação esquemática da quebra de uma estrutura *MultiBlockLattice* em diversos blocos, com adição de uma camada de células de envelope em cada um dos blocos particionados.



Fonte: Latt et al. (2021)

A estrutura *MultiBlockLattice* é, portanto, responsável por guardar todos os dados da simulação, e pode ser definida de diferentes maneiras pelo usuário. Assim, a intenção é que seja uma ferramenta geral para o usuário final, sendo o que o intuito nunca é que se reescreva ou se altere as linhas de código referente a essa estrutura.

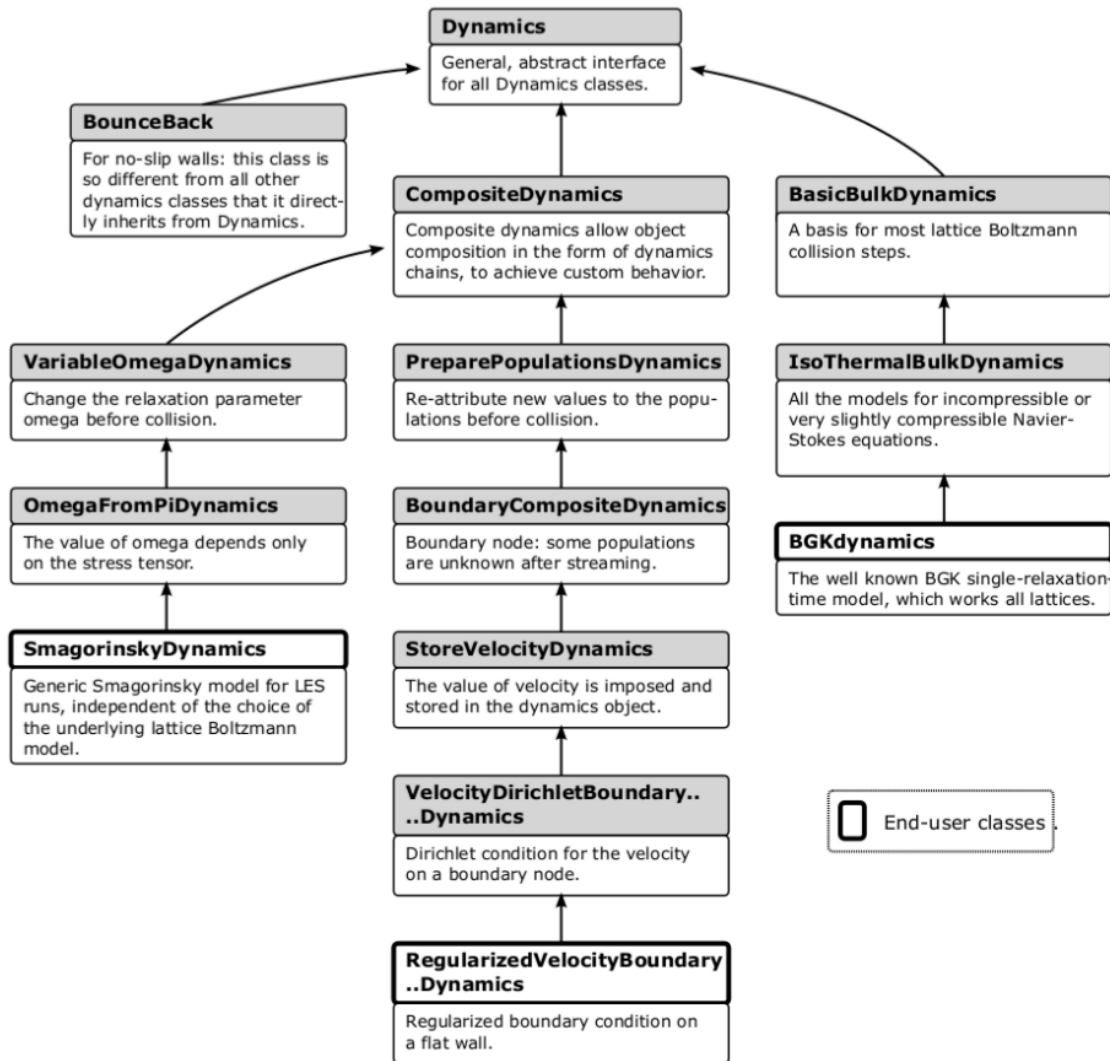
### 3.5.3 Extensibilidade dos modelos implementados

A biblioteca Palabos oferece três abstrações computacionais que podem ser reimplementadas ou modificadas pelo usuário, que são, a classe *Dynamics*, a descrição da célula através dos *Lattice Descriptors*, e o processamento de dados pelos *Data Processors*.

A classe *Dynamics* é responsável pelo cálculo de relaxação, Eq. (3.1). Logo, aqui é que se define o operador de colisão a ser utilizado e também o esquema de forças a ser implementado. Muitos cálculos de relaxação possuem uma certa semelhança no conjunto de passos a ser descritos. Por exemplo, considerando o uso do operador BGK, a implementação do esquema de forças pode ser considerada como um passo a mais a ser realizado além do cálculo de  $\Omega_i$ . Por essa razão, a biblioteca Palabos utiliza os conceitos de herança, disponíveis em C++ e em várias

outras linguagens de programação que suportam a orientação a objetos, de forma que a cada classe filha, pode-se adicionar ou reescrever alguns passos do cálculo de colisão.

Figura 13 – Representação gráfica da herança de alguma das classes *Dynamics* disponíveis na biblioteca Palabos.



Fonte: Latt et al. (2021).

Por exemplo, o operador de colisão BGK pode ser implementado pela classe *BGKdynamics*, que possui características em comum com as classes isotérmicas *IsoThermalBulkDynamics* e *BasicBulkDynamics*. Extensões, então, podem ser implementadas criando classes que herdam da classe *BGKdynamics*, como é o caso da implementação do esquema de forças externas de Guo, pela classe *ExternalGuoBGKdynamics*, presente na biblioteca. Para as simulações que serão apresentadas, foi necessário desenvolver novas classes para implementar o esquema de forças de Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009), Ladd e Verberg (2001), as modificações de Li, Luo e Li (2012) para melhor ajuste da curva de coexistência, o modelo MRT de Li, Luo e Li (2013), e sua posterior adição de controle de tensão superficial proposta em Li e Luo (2013).



Os *Lattice Descriptors* são responsáveis por definir os constituintes das células. Ou seja, o conjunto de velocidades (e.g., D2Q9), assim como a quantidade de variáveis extras que cada célula irá necessitar (e.g.,  $F_x$  e  $F_y$ ) são definidos através de um *Lattice Descriptor*. Internamente, a biblioteca consegue utilizar essas informações para alocar corretamente a quantidade de memória necessária para toda a malha computacional, dentro da estrutura *MultiBlockLattice*. Para o trabalho presente, foi necessário criar apenas um *Lattice Descriptor* distinto daqueles já implementados na biblioteca, que armazenasse o valor da função pseudopotencial  $\psi$  para cada célula.

Por fim, tem-se os *data processors*. Essa classe, na verdade, é bastante geral, e pode ser entendida como uma função especializada em varrer todo o domínio computacional, mesmo quando dividido em diversos blocos. Assim, podem ser utilizados com os mais diversos objetivos. Duas grandes aplicações é inicialização do domínio e cálculos de pós-processamento, em que há uma gama de implementações ofertadas por padrão pela biblioteca. Além disso, cálculos não-locais também são aconselháveis a serem realizados por esses processadores. Com isso, também podem ser utilizados para implementação de condições de contorno. No caso do trabalho presente, o cálculo da força intermolecular, Eq. (2.81), é realizado através de um *data processor*. Algumas modificações foram necessárias para se implementar as proposições do trabalho de Li, Luo e Li (2013) e Li e Luo (2013).

### 3.6 Códigos próprios

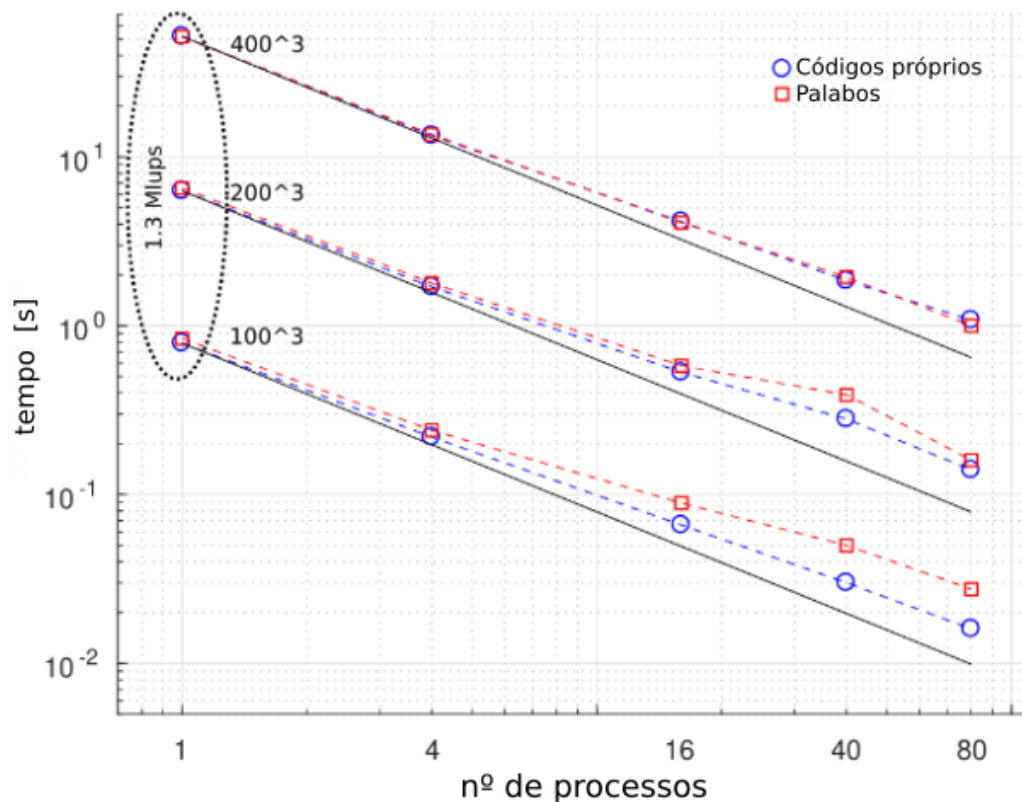
Além da biblioteca do Palabos, também foram desenvolvidos códigos próprios na linguagem C, utilizando *Message Passage Interface* para paralelização entre processos. A estrutura de partição do domínio entre os diferentes processos segue a mesma ideia de camada de células fantasmas para a comunicação interprocessos, apresentadas na Fig. 12.

De fato, algumas estruturas e organizações foram inspiradas na biblioteca do Palabos, no entanto, o código em C desenvolvido é bem mais simples em termos de abstrações, tornando mais explícito a estrutura de dados e os laços de repetição percorridos durante a execução. Assim, para desenvolver um novo modelo de colisão, por exemplo, é necessário adicionar uma tratativa em um arquivo de configuração e uma função que descreva as operações a serem realizadas com o laço de repetição dentro do domínio, ao invés de utilizar um esquema de herança de classes, como o mostrado na Fig. 13, empregado pela biblioteca Palabos. O objetivo é que o código mais simplificado tenha uma curva de aprendizado menor, de forma a atender também uma demanda interna do grupo por uma linguagem de programação mais conhecida entre os alunos do grupo. Esses desenvolvimentos facilitaram na resolução da implementação da abordagem híbrida para resolução da evolução do campo de temperatura. Esses códigos foram empregados principalmente nos resultados apresentados no Cap .5.

Para efeitos de comparação, uma simulação tridimensional de uma gota caindo sobre um filme líquido foi realizada utilizando a biblioteca do Palabos e os códigos próprios, com

o modelo proposto por Fei et al. (2019). Foi realizada uma comparação entre as velocidades computacionais para uma paralelização entre 1 e 80 nós, para malhas de  $100 \times 100 \times 100$ ,  $200 \times 200 \times 200$  e  $400 \times 400 \times 400$ , por 100 passos de tempos. Os resultados são exibidos na Fig. 14, e comparados com um decaimento de tempo linear, em linhas sólidas. Nesses testes, é possível observar que performances similares entre a execução da simulação utilizando códigos próprios e a biblioteca, com ambos tendo um desvio da queda de tempo linear com o aumento do número de processos. Na malha de  $100 \times 100$ , os códigos desenvolvidos até tiveram uma performance melhor para um maior número de processos, sendo que a principal hipótese é de que a biblioteca do Palabos possui mais abstrações utilizando diferentes classes para separar comunicação entre processos, classes responsáveis pelo operador de colisão, e processadores de dados.

Figura 14 – Comparação da performance computacional para uma gota colidindo sobre um filme líquido com os códigos próprios e a biblioteca Palabos, para um número variável de processos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

### 3.7 Métodos empregados

#### 3.7.1 Influência do esquema de força na curva de saturação

Para o estudo da influência do esquema de forças na curva de saturação, retomamos a equação do método de Boltzmann com operador BGK:

$$f_i(t + \Delta t, \mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - f_i(t, \mathbf{x}) = -\frac{\Delta t}{\tau} [f_i(t, \mathbf{x}) - f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}^{eq})] + F_i(\bar{\mathbf{u}}), \quad (3.19)$$

em que o esquema de força genérico é dado por:

$$F_i = w_i \left( A \frac{c_{i\alpha}}{c_s^2} F_\alpha + B \frac{c_{i\alpha} c_{i\beta} - c_s^2 \delta_{\alpha\beta}}{2c_s^4} (F_\alpha \bar{u}_\beta + F_\beta \bar{u}_\alpha) \right), \quad (3.20)$$

e as velocidades de equilíbrio,  $\mathbf{u}^{eq}$ , e do esquema de forças,  $\bar{\mathbf{u}}$ :

$$\rho u_\alpha^{eq} = \sum c_{i\alpha} f_i + m \Delta t F_\alpha, \quad \rho \bar{u}_\alpha = \sum c_{i\alpha} f_i + n \Delta t F_\alpha. \quad (3.21)$$

Essa formulação é conveniente, pois podemos representar diferentes esquemas de forças pelos parâmetros  $m, n, A, B$  de acordo com a Tab. 3. As equações macroscópicas resultantes, utilizando análise de Chapman-Enskog e considerando os erros de terceira ordem espacial do esquema de forças, Eq. (2.91), são dadas:

$$\partial_t \rho + \partial_\gamma (\rho \hat{u}_\gamma) = 0, \quad (3.22a)$$

$$\partial_t (\rho \hat{u}_\alpha) + \partial_\beta (\rho \hat{u}_\alpha \hat{u}_\beta) = -\partial_\beta p \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta \sigma_{\alpha\beta} + F_\alpha + \partial_\beta \left[ \frac{c_s^2}{12} [(\partial_\gamma F_\gamma) \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta F_\alpha + \partial_\alpha F_\beta] \right], \quad (3.22b)$$

em que  $\sigma_{\alpha\beta} = \mu (\partial_\beta \hat{u}_\alpha + \partial_\alpha \hat{u}_\beta)$ , e  $\rho \hat{u} = \sum c_{i\alpha} f_i + \Delta t F_\alpha / 2$ .

Para testarmos a curva de saturação dos métodos, tomamos um problema de estático que há uma interface plana ao longo do eixo  $y$  em uma determinada posição  $x$ . Assim, utilizando a condição de problema estático  $\hat{u}_\alpha = 0$ , pode-se mostrar que a equação governante do problema se resume em:

$$\partial_\beta P_{\alpha\beta} \equiv \partial_\beta \left[ \rho c_s^2 \delta_{\alpha\beta} - \left( \tau - \frac{1}{4} - \tau \gamma \right) \frac{F_\alpha F_\beta}{\rho} - \frac{c_s^2}{12} [(\partial_\gamma F_\gamma) \delta_{\alpha\beta} + \partial_\beta F_\alpha + \partial_\alpha F_\beta] \right] - F_\alpha = 0, \quad (3.23)$$

em que  $P_{\alpha\beta}$  é denominado o tensor de pressão, e o parâmetro  $\gamma$  é dependente do esquema de força utilizado (LYCETT-BROWN; LUO, 2015):

$$\gamma = \frac{m^2}{\tau} + 2nB. \quad (3.24)$$

A relação acima é válida desde que  $A = B = 1 - m/\tau$ . Substituindo a força intermolecular com auxílio da expansão de Taylor, como na Eq. (2.92), pode-se mostrar que o tensor de

pressão resulta na seguinte relação:

$$P_{\alpha\beta} = \left[ \rho c_s^2 + \frac{Gc_s^2}{2}\psi^2 + Gc_s^4 \left( \frac{1}{3} \right) (\partial_\gamma \psi)^2 + Gc_s^4 \left( \frac{7}{12} \right) \psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right] \delta_{\alpha\beta} + Gc_s^4 \left[ -\frac{1}{3} - \frac{G\psi^2}{\rho} \left( \tau - \frac{1}{4} - \tau\gamma \right) \right] (\partial_\alpha \psi)(\partial_\beta \psi) + \frac{Gc_s^4}{6} \psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (3.25)$$

Com isso, a componente  $xx$  do tensor de pressão é dada por:

$$P_{xx} = \rho c_s^2 + \frac{Gc_s^2}{2}\psi^2 + Gc_s^4 \left( \frac{3}{4} \right) \psi \frac{d^2\psi}{dx^2} + Gc_s^4 \left[ -\frac{G\psi^2}{\rho} \left( \tau - \frac{1}{4} - \tau\gamma \right) \right] \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2. \quad (3.26)$$

Para que o sistema se mantenha em equilíbrio mecânico, o valor de  $P_{xx}$  deve ser constante, i.e.,  $P_{xx} = p_{sat}$ , que resulta em uma equação diferencial ordinária (EDO). Sua solução pode ser feita em função de uma nova variável  $z \equiv (d\rho/dx)^2$ , e empregando as relações:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d^2\psi}{d\rho^2} z + \frac{1}{2} \frac{d\psi}{d\rho} \frac{dz}{d\rho}, \quad \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 = \left( \frac{d\psi}{d\rho} \right)^2 z. \quad (3.27)$$

Com isso, pode-se escrever a EDO  $\dot{z} + f(\rho)z = g(\rho)$ , em que  $\dot{z} = dz/d\rho$  e:

$$f(\rho) = \frac{2\ddot{\psi}}{\dot{\psi}} - \frac{8}{3} G\Gamma \frac{\psi \dot{\psi}}{\rho}, \quad (3.28a)$$

$$g(\rho) = \frac{8}{3} \left( p_{sat} - \rho c_s^2 - \frac{Gc_s^2}{2}\psi^2 \right) \frac{1}{\psi \dot{\psi}}, \quad (3.28b)$$

$$\Gamma(\tau, \gamma) = \tau - \frac{1}{4} - \tau\gamma. \quad (3.28c)$$

Resolvendo essa equação e utilizando as condições de contorno em que os gradientes são zero nas regiões de líquido e vapor, i.e.,  $z(\rho_g) = z(\rho_l) = 0$ , a curva de saturação é então definida:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} e^{-\frac{8}{3} G\Gamma \int^\rho \psi \dot{\psi} \bar{\rho}^{-1} d\bar{\rho}} \left( p_{sat} - c_s^2 \rho - \frac{Gc_s^2}{2}\psi^2 \right) \frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\varepsilon}} d\rho = 0, \quad (3.29a)$$

$$p_{sat} = \rho_l c_s^2 + \frac{Gc_s^2}{2}\psi^2(\rho_l) = \rho_g c_s^2 + \frac{Gc_s^2}{2}\psi^2(\rho_g), \quad (3.29b)$$

sendo o parâmetro  $\varepsilon = 0$ . O motivo por deixarmos este parâmetro explícito é pela sua relação com outros métodos empregados adiante, de Li, Luo e Li (2013) e Li e Luo (2013).

Para as simulações, foram empregados 5 diferentes esquemas de força, em que os parâmetros são apresentados na Tab. 6. Além disso, utilizou-se também a função de pseudopotencial proposta originalmente por Shan e Chen (1993):

$$\psi = 1 - e^{-\rho}. \quad (3.30)$$

Apesar das limitações da razão de densidade pelo emprego dessa relação para  $\psi$ , como exposto na Sec. 2.2, o seu uso permite a comparação de características dos esquemas de força, além de podermos utilizar uma simplificação para a integral que aparece no termo exponencial da Eq. (3.29a):

$$\int^{\rho} \frac{\psi \dot{\psi}}{\tilde{\rho}} d\tilde{\rho} = \text{Ei}(\rho) - \text{Ei}(2\rho), \quad (3.31)$$

em que  $\text{Ei} = \int e^{\rho}/\rho d\rho$ . Podemos, assim, utilizar uma expressão explícita aproximada adequada para essa integral, o que simplifica os cálculos da curva de saturação. Neste trabalho, foi utilizada a aproximação proposta por Allen (1954).

Como referência, os resultados também podem ser comparados com a curva de saturação dada regra de Maxwell com a equação de estado do método:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left( p_{sat} - c_s^2 \rho - \frac{Gc_s^2}{2} \psi^2 \right) \frac{d\rho}{\rho^2} = 0. \quad (3.32)$$

Tabela 6 – Parâmetros  $m$ ,  $n$ ,  $A$ ,  $B$  e  $\gamma$  para os esquemas de força estudados.

| Esquema de força                      | $m$ | $n$      | $A$           | $B$           | $\gamma$      |
|---------------------------------------|-----|----------|---------------|---------------|---------------|
| He, Shan e Doolen (1998)              | 1/2 | 1/2      | $1 - 1/2\tau$ | $1 - 1/2\tau$ | $1 - 1/4\tau$ |
| Guo, Zheng e Shi (2002)               | 1/2 | 1/2      | $1 - 1/2\tau$ | $1 - 1/2\tau$ | $1 - 1/4\tau$ |
| Shan e Chen (1993)                    | 0   | $\tau/2$ | 1             | 1             | $\tau$        |
| Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009) | 0   | 1/2      | 1             | 1             | 1             |
| Ladd e Verberg (2001)                 | 0   | 0        | 1             | 1             | 0             |

Fonte: elaborado pelo autor.

### 3.7.2 Controle da curva de saturação

Como exposto na Sec. 2.2, o controle da curva de saturação do método é de grande importância, principalmente, para conseguir simular maiores razões de densidade e tornar o método mais termodinamicamente consistente. Assim, a implementação de algum método com essas capacidades também é de interesse ao trabalho presente. Em uma primeira etapa, procurou-se implementar o esquema de Li, Luo e Li (2013), dado por:

$$\mathbf{m}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) + \Lambda(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{eq}) + (\mathbf{I} - 0.5\Lambda)\mathbf{S}, \quad (3.33)$$

em que  $\mathbf{m} = Mf_i$ ,  $\mathbf{m}^{eq} = Mf^{eq}$ , e as representações  $M$ ,  $\mathbf{m}^{eq}$  são dadas no Apêndice B, para o conjunto D2Q9. O termo  $\mathbf{S}$  representa o esquema de forças no espaço de momentos  $\mathbf{S} = MF_i$ , e para o esquema em questão, é dado por:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F} + \frac{\varsigma |\mathbf{F}^{\text{SC}}|^2}{\psi^2 c_s^2 (\tau_\epsilon - 0.5)} \\ -6\mathbf{u} \cdot \mathbf{F} + \frac{\varsigma |\mathbf{F}^{\text{SC}}|^2}{\psi^2 c_s^2 (\tau_\epsilon - 0.5)} \\ F_x \\ -F_x \\ F_y \\ -F_y \\ 2(u_x F_x - u_y F_y) \\ u_x F_y + u_y F_x \end{bmatrix}. \quad (3.34)$$

Esse método corresponde a modificar a velocidade do esquema de Guo por um fator proporcional a  $\varsigma |\mathbf{F}^{\text{SC}}|^2$  de forma a obter o efeito desejado. Assim, quando  $\varsigma = 0$ , o método é idêntico ao esquema de Guo. Através da análise de Chapman-Enskog, o método resulta no seguinte tensor de pressão para problemas estáticos (LI; LUO; LI, 2013):

$$P_{\alpha\beta} = \left[ \rho c_s^2 + \frac{G c_s^2}{2} \psi^2 + 2G^2 c_s^2 \varsigma (\partial_\gamma \psi)^2 + \frac{G c_s^4}{4} \psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right] \delta_{\alpha\beta} + \frac{G c_s^4}{2} \psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi. \quad (3.35)$$

de forma que, repetindo os passos da seção anterior para o problema de interface plana, pode-se recuperar a curva de saturação:

$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} \left( p_{\text{sat}} - c_s^2 \rho - \frac{G c_s^2}{2} \psi^2 \right) \frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\varepsilon}} d\rho = 0, \quad (3.36)$$

sendo que  $\varepsilon = -16G\varsigma$ .

Para as simulações realizadas, também foi utilizado o mesmo procedimento do trabalho de Yuan e Schaefer (2006), em que a função pseudopotencial é calculada por:

$$\psi = \sqrt{\frac{2(p^{\text{EOS}} - \rho c_s^2)}{c_s^2 \Delta t^2 |G|}}, \quad (3.37)$$

com  $G = -1$ , e a equação de estado de Carnahan-Starling:

$$p^{\text{EOS}} = p^{\text{CS}} = \rho RT \frac{1 + (b\rho/4) + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2, \quad (3.38)$$

com  $b = 4$ ,  $R = 1$ , e  $a = 0.5$ . Isso resulta em uma densidade crítica  $\rho_c \approx 0.13045$  e  $T_c \approx 0.047$ . Para os problemas com transferência de calor, foi empregada a equação de estado de Peng-Robinson, com os parâmetros expostos na seção de resultados. Os fatores de relaxação da matriz  $\Lambda$  também seguiram os utilizados por Li, Luo e Li (2013), em que  $\Lambda = \text{diag}(1.0, 1.1, 1.1, 1.0, 1.1, 1.0, 1.1, 0.6, 0.6)$ .

Além da curva de saturação, também pode-se analisar o perfil de densidades ao longo da direção  $x$ . O perfil teórico é calculado através da EDO em  $z$  resultante do tensor de pressão, cuja solução é dada por:

$$z(\rho) = \frac{\psi^\varepsilon}{\dot{\psi}^2} \frac{8}{3G c_s^4} \int_{\rho_g}^{\rho} \left( p_{\text{sat}} - c_s^2 \tilde{\rho} - \frac{G c_s^2}{2} \psi^2 \right) \frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\varepsilon}} d\tilde{\rho}. \quad (3.39)$$

Da própria definição  $z \equiv (d\rho/dx)^2$ , pode-se então calcular as respectivas posições de uma partição entre a densidade do líquido e vapor através da equação:

$$x = \int_{\bar{\rho}}^{\rho} \frac{d\tilde{\rho}}{\sqrt{z}}, \quad (3.40)$$

em que  $\bar{\rho} = \frac{\rho_l + \rho_g}{2}$ . Com isso, é possível comparar os perfis da simulação com os obtidos através das equações macroscópicas resultantes da análise de Chapman-Enskog para o problema de interface plana.

### 3.7.3 Controle da tensão superficial

O controle da tensão superficial também é de grande interesse para simulação de distintas condições de escoamentos multifásicos. Com isso, foi empregado o método proposto por Li e Luo (2013):

$$\mathbf{m}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) + \Lambda(\mathbf{m} - \mathbf{m}^{eq}) + (\mathbf{I} - 0.5\Lambda)\mathbf{S} + \Delta t \mathbf{C}, \quad (3.41)$$

em que, comparando com o modelo dos mesmos autores da Eq. (3.33), há o acréscimo do termo fonte  $\mathbf{C}$ , dado por:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1.5\tau_e^{-1}(Q_{xx} + Q_{yy}) \\ -1.5\tau_e^{-1}(Q_{xx} + Q_{yy}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\tau^{-1}(Q_{xx} - Q_{yy}) \\ -\tau^{-1}Q_{xy} \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

sendo o termo  $\mathbf{Q}$  dado por:

$$\mathbf{Q} = \kappa \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}) \sum_i w_i [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - \psi(\mathbf{x})] \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i. \quad (3.43)$$

Este novo termo tem o intuito de modificar o tensor de pressão para a seguinte relação:

$$P_{\alpha\beta} = \left[ \rho c_s^2 + \frac{G c_s^2}{2} \psi^2 + 2G^2 c_s^2 \zeta (\partial_\gamma \psi)^2 + \frac{G c_s^4}{4} (1 + 2\kappa) \psi \partial_\gamma \partial_\gamma \psi \right] \delta_{\alpha\beta} + \frac{G c_s^4}{2} (1 - \kappa) \psi \partial_\alpha \partial_\beta \psi, \quad (3.44)$$

de forma que ao se calcular o problema de interface plana, a curva de saturação permanece inalterada, ou seja, é a mesma dada pela Eq. (3.36). A diferença se dá pela tensão superficial, que pode ser calculada pela integral de  $P_{xx} - P_{yy}$  ao longo da direção  $x$ . Como há apenas gradientes na direção  $x$ , a tensão superficial, no problema da interface plana, é regida pelos

termos anisotrópicos do tensor de pressão, i.e., :

$$\sigma = \int (P_{xx} - P_{yy}) dx = \frac{Gc_s^4}{2} (1 - \kappa) \psi \frac{d^2 \psi}{dx^2}, \quad (3.45)$$

sendo  $\sigma$ , a tensão superficial. Dessa forma, é possível controlar o valor da tensão superficial através do parâmetro  $\kappa$ .

Para verificar as capacidades do método, duas situações serão simuladas. A primeira é verificar se a curva de saturação realmente se mantém inalterada durante as simulações com diferentes valores de  $\kappa$  e coerente com o esperado pela teoria, dada pela Eq. (3.36). A segunda se resume em realizar aplicar a equação de Young-Laplace, em que uma gota de raio  $R_0$  é simulada, e a tensão superficial pode ser calculada através da relação:

$$\Delta p = p_{\text{int}} - p_{\text{ext}} = \frac{\sigma}{R_0}, \quad (3.46)$$

sendo  $p_{\text{int}}$  e  $p_{\text{ext}}$ , respectivamente, a pressão interna e externa da gota. Para essas simulações, foram utilizadas a mesma equação de estado e parâmetros para o estudo do método de Li, Luo e Li (2013), Eq. (2.89), bem como os fatores de relaxação.

Para as simulações em que há uma fronteira fluido-sólido, como o caso do problema de ebulição, é necessário tratar a implementação nos nós das fronteiras. Esse ponto é pouco esclarecido como é realizado em outros trabalhos, sem grandes comentários por parte dos autores de como consideraram a implementação nesses sítios. No trabalho presente, procurou-se utilizar uma formulação coerente com o modelo de molhabilidade em uso. Assim, para o modelo de Benzi et al. (2006), o termo  $\mathbf{Q}$  é calculado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{Q} = & \kappa \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}, t) \sum_{i \in I^{\text{fluido}}} w_i [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) - \psi(\mathbf{x}, t)] \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \\ & + \kappa \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}, t) \sum_{i \in I^{\text{sólido}}} w_i [\psi(\rho_w(\mathbf{x}, t), T_w^*(\mathbf{x}, t)) - \psi(\mathbf{x}, t)] \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i, \end{aligned} \quad (3.47)$$

e, para o Li et al. (2014):

$$\mathbf{Q} = \kappa \frac{G}{2} \psi(\mathbf{x}, t) \sum_{i \in I^{\text{fluido}}} w_i [\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) - \psi(\mathbf{x}, t)] \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i, \quad (3.48)$$

o que equivale a substituir  $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t)$  por  $\psi(\mathbf{x}, t)$  na Eq. (3.43) quando  $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i$  corresponde a um nó sólido, como ocorre com a força de adesão proposta. Para o modelo geométrico de Ding e Spelt (2007), a relação Eq. (3.43) é calculada utilizando as células fantasmas quando é necessário uma densidade em uma direção para o interior da fronteira sólida.

### 3.7.4 Modelo térmico

O modelo térmico empregado no trabalho presente segue a proposta de Li et al. (2015), resolvendo a evolução temporal da temperatura, dada por:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -u_\alpha \partial_\alpha T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\alpha (k \partial_\alpha T) - \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \partial_\alpha u_\alpha, \quad (3.49)$$



através do método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Assim, os passos intermediários:

$$\begin{aligned}
 h_1 &= \left[ -u_\alpha \partial_\alpha T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\alpha (k \partial_\alpha T) - \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \partial_\alpha u_\alpha \right]_{T_t}, \\
 h_2 &= \left[ -u_\alpha \partial_\alpha T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\alpha (k \partial_\alpha T) - \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \partial_\alpha u_\alpha \right]_{T_t + \frac{\Delta t}{2} h_1}, \\
 h_3 &= \left[ -u_\alpha \partial_\alpha T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\alpha (k \partial_\alpha T) - \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \partial_\alpha u_\alpha \right]_{T_t + \frac{\Delta t}{2} h_2}, \\
 h_4 &= \left[ -u_\alpha \partial_\alpha T + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\alpha (k \partial_\alpha T) - \frac{T}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_v \partial_\alpha u_\alpha \right]_{T_t + \Delta t h_3},
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

são calculadas com os campos de densidade, velocidade e pressão obtidos pelo método de Boltzmann no instante  $t$ .

As derivadas de primeira e segunda ordem são calculadas de acordo com o esquema apresentados por Lee e Lin (2005):

$$\begin{aligned}
 \partial_\alpha T(\mathbf{x}) &\approx \frac{1}{c_s^2 \Delta t} \sum_i w_i T(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) c_{i\alpha} \\
 \partial_\gamma \partial_\gamma T(\mathbf{x}) &\approx \frac{1}{c_s^2 \Delta t^2} \sum_i w_i [T(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t) - T(\mathbf{x})].
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

### 3.8 Casos numéricos

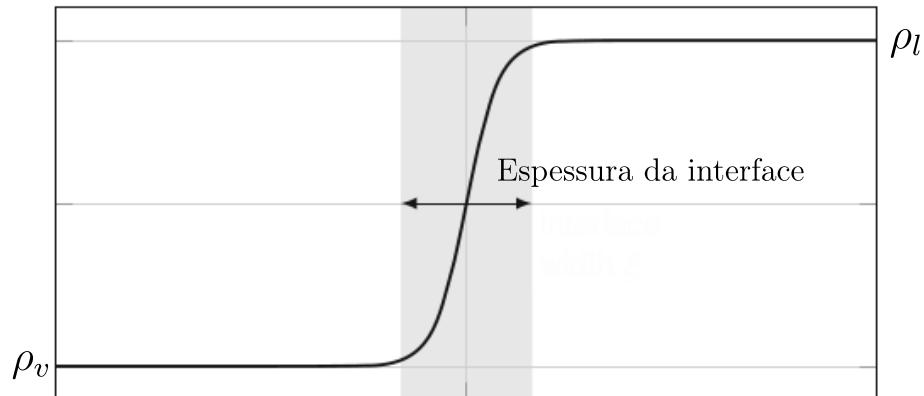
Nesta seção, serão apresentados os casos numéricos utilizados ao longo deste trabalho para validações, estudos paramétricos, comparações entre métodos e estudos de fenômenos físicos. O objetivo é expor os casos de maneira resumida com suas condições iniciais e de contorno, para que sirva como referência, principalmente durante as discussões dos capítulos de resultados.

#### 3.8.1 Interface plana

O teste de interface plana consiste em um problema unidimensional, em que as densidades de duas fases de uma substância são separadas por uma interface, como esquematizado na Fig. 15. Esse teste é muito utilizado para verificar a consistência termodinâmica dos modelos multifásicos do LBM. O objetivo é, portanto, inicializar um perfil de densidades, com velocidade nula, e evoluir a simulação no tempo até que as variações do campo de densidades sejam pequenas. Com isso, é possível validar se o perfil final obtido apresenta valores para as fases coerentes com o que seria esperado teoricamente e também compará-los com o comportamento esperado utilizando a regra de Maxwell, descrita pela Eq. (2.85).

Para a simulação desse teste, é muito comum empregar condições de contorno periódicas. Dessa forma, o perfil inicial de densidades necessariamente possui duas interfaces entre as fases, para garantir que a densidade em  $x = 0$  e  $x = L$  sejam iguais. Essa técnica também é utilizada no trabalho presente. O perfil de densidades inicial é dado pela seguinte equação:

Figura 15 – Representação esquemática do problema de interface plana.



Fonte: Adaptado de Krüger et al. (2017, p. 165).

$$\rho(x) = \rho_g + \frac{\rho_l - \rho_g}{2} \left[ \tanh\left(\frac{2(x - x_1)}{W}\right) - \tanh\left(\frac{2(x - x_2)}{W}\right) \right], \quad (3.52)$$

em que  $x_1$  e  $x_2$  são as posições das interfaces entre as fases, e  $W$  a espessura da interface. Para a maioria dos casos, o critério de parada utilizado é dado por:

$$\frac{\|\rho(t, x, y) - \rho(t - T, x, y)\|_1}{\|\rho(t, x, y)\|_1} \leq t \quad (3.53)$$

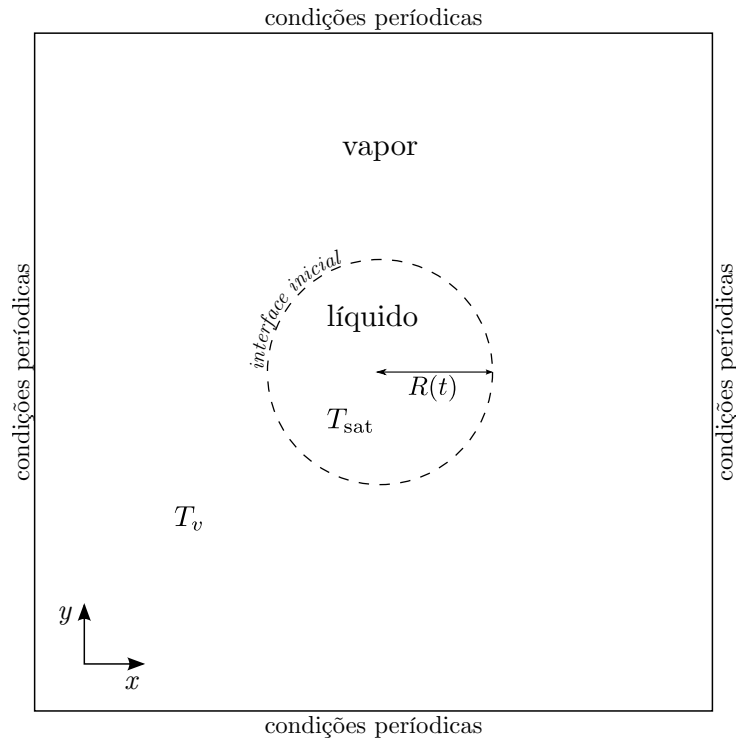
em que  $t$  é a tolerância e  $T$  é o período utilizado, em passos de tempo, para realizar a verificação do valor do campo de densidades. Para o trabalho presente, os valores tipicamente empregados foram  $t = 10^{-6}$  e  $T = 1000$ . Caso contrário, os valores são indicados ao longo do texto.

### 3.8.2 Gota estática

A simulação da gota estática imersa em um meio de vapor saturado também é um dos testes clássicos para realizar validações dos modelos multifásicos do LBM. A representação esquemática é exibida na Fig. 16. Similar à interface plana, as densidades de equilíbrio em uma determinada temperatura de saturação são inicializadas para a gota e o meio de vapor, e a simulação é executada até que a variação respeite o critério de parada, indicado na Eq. (3.53). O principal objetivo dessa simulação é verificar a tensão superficial obtida pelo método, através da relação de Young-Laplace. Com isso, o valor da tensão pode ser comparado com valores teóricos esperados. Outros estudos em que esse tipo de simulação pode ser empregado é na verificação das correntes espúrias na interface e influência da curvatura da interface nos valores de densidade de equilíbrio.

Para realização da simulação, são empregadas condições periódicas nas quatro fronteiras do domínio, e o perfil inicial empregado é dado por:

Figura 16 – Esquematização da simulação de gota estática.



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

$$\rho(x) = \rho_g + \frac{\rho_l - \rho_g}{2} \left[ \tanh \left( \frac{2(R(x, y) - R_0)}{W} \right) \right], \quad (3.54)$$

em que  $R_0$  é o raio inicial da gota,  $W$  a espessura interfacial,  $R$  a distância de uma determinada posição do domínio  $(x, y)$  até a posição do centro da gota  $(x_0, y_0)$ , dada por  $R = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$ .

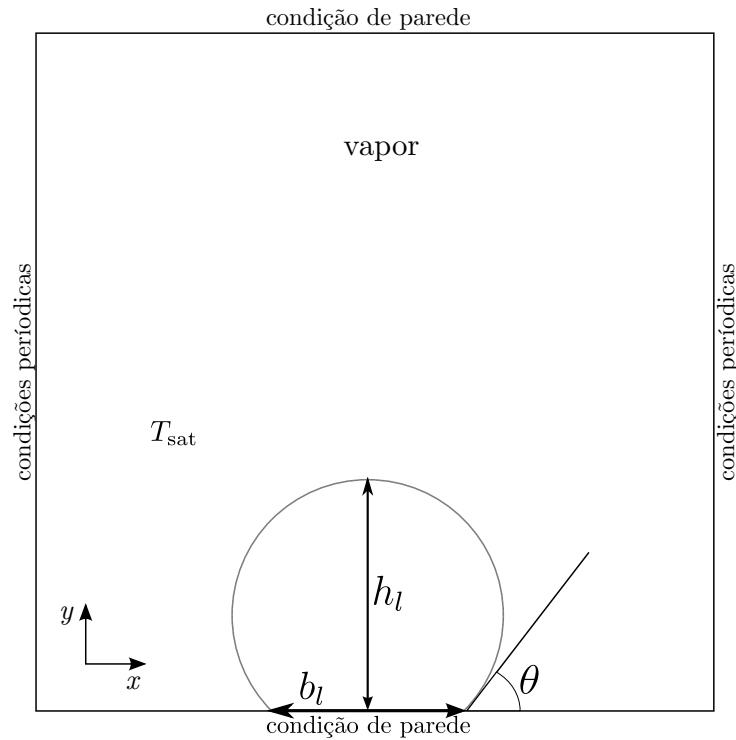
### 3.8.3 Gota sobre uma superfície

A simulação da gota sobre a superfície consiste em um domínio computacional com paredes periódicas nas duas fronteiras verticais, e paredes sólidas nas fronteiras inferior e superior. O campo de densidades é iniciado com a mesma equação exibida na Eq. (3.54). A representação esquemática é exibida na Fig. 17. Essa simulação é utilizada para comparação entre os modelos de ângulo de contato. Ela é executada até que o critério de parada de mudança relativa de  $10^{-6}$  é alcançado. Ao final, os campos de densidade são utilizados para o cálculo do ângulo de contato através da seguinte relação:

$$\theta = \begin{cases} \arcsin \left( \frac{b}{2r} \right), & \text{se } \theta \leq \pi/2 \\ \pi - \arcsin \left( \frac{b}{2r} \right), & \text{se } \theta > \pi/2 \end{cases}, \quad (3.55)$$

em que o valor  $b_l$  e  $h_l$  são os valores, respectivamente, da base e altura da gota, e o valor do raio  $r$  é calculado através da expressão:

Figura 17 – Representação esquemática da simulação de uma gota sobre uma superfície.



Fonte: Elaborado pelo autor.

$$r = \frac{4h_l^2 + b_l^2}{8h_l}. \quad (3.56)$$

#### 3.8.4 Vaporização de uma gota

A configuração inicial do problema de vaporização da gota é semelhante ao problema da gota estática, esquematizado Fig. 16. Inicialmente, a temperatura da fase líquida é ajustada para  $T_{\text{sat}} = 0.86T_c$ , enquanto a temperatura do vapor é ajustada para  $T_v = T_c$ . As configurações hidrodinâmicas são periódicas em ambos os eixos, enquanto a temperatura na fronteira é mantida constante e igual a  $T_v$ . Devido à maior temperatura do vapor, superaquecido na mesma pressão, o líquido evapora com o tempo e o raio da gota diminui até o colapso.

A gota é inicializada no centro do domínio. No instante inicial, a seguinte função é usada para uma inicialização suave dos campos de temperatura e densidade:

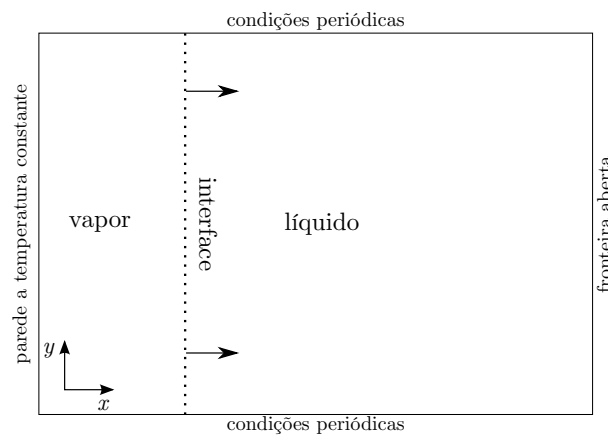
$$\Theta(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left\{ \Theta_v + \Theta_\ell + (\Theta_\ell - \Theta_v) \tanh \left( \frac{4.6}{5.0} (d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_c) - R_0) \right) \right\}, \quad (3.57)$$

onde  $\Theta$  é um campo arbitrário, nesse caso, pode ser densidade ou temperatura,  $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_c)$  é a distância cartesiana de  $\mathbf{x}$  ao centro do domínio,  $\mathbf{x}_c$  e  $R_0 \equiv R(t = 0)$  é o raio inicial da gota.

### 3.8.5 Problema de ebulição unidimensional

Este problema consiste em uma configuração unidimensional na qual a fase líquida do fluido está inicialmente em equilíbrio com a temperatura de saturação  $T_{\text{sat}} = 0.86T_c$  em todo o domínio computacional. Para instantes de tempo  $t > 0$ , a temperatura na parede esquerda,  $T_w$ , assume um valor maior do que a temperatura de saturação  $T_{\text{sat}}$ . Essa diferença de temperatura provoca a mudança de fase de líquido para vapor, formando uma interface líquido/vapor, como esquematizado na Fig. 18. Esse processo de mudança de fase produz o movimento da interface da esquerda para a direita, alcançando a extremidade direita do domínio em um tempo finito, onde são impostas condições de contorno de Neumann nulas (LOU; GUO; SHI, 2013).

Figura 18 – Esquema do problema unidimensional de ebulição.



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

No limite incompressível, a temperatura na fase líquida é homogênea e constante no tempo, sendo igual à temperatura de saturação inicial  $T_\ell \equiv T_{\text{sat}}$ , enquanto na região de vapor, a temperatura decai linearmente da temperatura da parede,  $T_w$ , para a temperatura do líquido,  $T_{\text{sat}}$ . Este é o chamado problema de Stefan unidimensional (SAFARI; RAHIMIAN; KRAFCZYK, 2013). A solução para este problema é obtida resolvendo a equação de conservação de energia para cada fase e aplicando as condições de contorno nos limites do domínio e na interface (ALEXIADES; SOLOMON; LUNARDINI, 1993). Para a interface, assume-se a continuidade dos fluxos de massa e energia. A solução analítica resulta na seguinte expressão para a posição da interface no tempo:

$$s(t) = 2\beta\sqrt{\alpha_v t}, \quad (3.58)$$

onde  $\alpha_\theta \equiv k_\theta/(c_{v,\theta}\rho_\theta)$  denota a difusividade térmica da fase  $\theta$ , e  $\beta$  é a solução da seguinte equação:

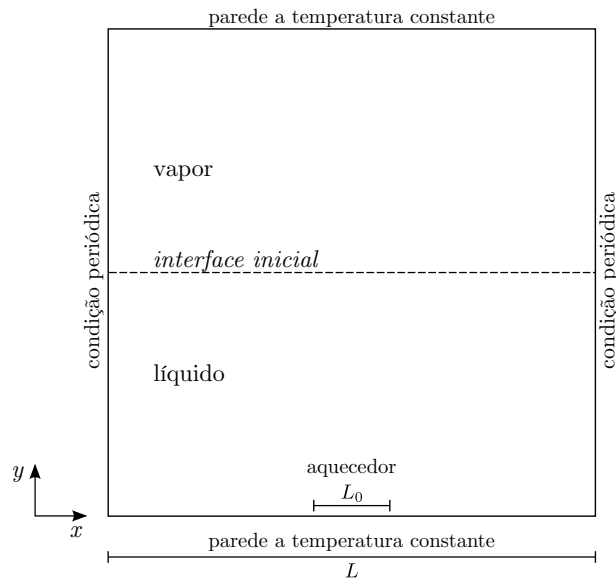
$$\beta \exp(\beta^2) \operatorname{erf}(\beta) = \frac{c_{v,v}(T_w - T_\ell)}{h_{lg}\sqrt{\pi}}, \quad (3.59)$$

sendo  $c_{v,v}$  o calor específico a volume constante do vapor e  $h_{lg}$  o calor latente de vaporização. Esta última propriedade é calculada a partir da equação de estado Peng-Robinson seguindo Gong e Cheng (2013).

### 3.8.6 Ebulição em piscina

O problema de ebulição em piscina simulado é esquematizada na Fig. 19. Condições de contorno periódicas são definidas em  $x = 0$  (esquerda) e  $x = L$  (direita), e a condição de parede de Zou e He (1997) é usada para impor condição de não-deslizamento nas paredes superior e inferior do domínio. Uma região  $L_0$  na parede inferior é utilizada como um aquecedor, ou seja, é imposta uma condição com maior temperatura e/ou um o ângulo de contato distinto.

Figura 19 – Esquematização das condições inicial e de contorno para o problema de ebulição em piscina.



O domínio é inicialmente dado como preenchido até à metade pela fase líquida. Assim, as condições iniciais no interior do domínio são:

$$T(\mathbf{x}, t = 0) = T_{\text{sat}}, \quad \rho(\mathbf{x}, t = 0) = \begin{cases} \rho_{\ell} & \text{se } y < L/2 \\ \rho_v & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (3.60)$$

juntamente com um campo de velocidade nulo.

Na parede superior, a temperatura é assumida igual temperatura de saturação,  $T_{\text{sup}} = T_{\text{sat}}$ , assim como na parede inferior, exceto para a região do aquecedor, com a temperatura  $T_h$ .

## 3.9 Equipamentos utilizados

A configuração das máquinas disponibilizadas pelo laboratório da Universidade de São Paulo e utilizadas para desenvolvimento e simulações mais leves estão descritas na Tab. 7. Para as simulações mais pesadas, como os casos de simulação de ebulição de piscina com malhas refinadas, foram utilizados os recursos computacionais disponibilizados pelos cluster Euler e Santos Dumont. As configurações são apresentadas na Tab. 8. Os tempos de simulações obtidos nos resultados estão apresentados no Apêndice D.

Tabela 7 – Especificações das máquinas utilizadas no trabalho presente.

| Componente          | Máquina 1                                    | Máquina 2  |
|---------------------|--|--|
| Processador         | Intel Xeon CPU E3-1225 v5 3.3GHZ (4 núcleos) | AMD Ryzen 7 1700 3.0GHZ (8 núcleos)  |
| Memória RAM         | 8GB DDR4 1066 MHz                            | 48GB DDR4 1200MHz  |
| HD                  | 1 unidade de disco rígido (HDD) 1TB          | 1 unidade de estado sólido (SSD) 250GB e 1 unidade de disco rígido (HDD) 1TB |
| GPU                 | NVIDIA Quadro K620 2GB GDDR5 (384 núcleos)   | GeForce GTX 1080 Ti 11GB GDDR5X (3584 núcleos)                               |
| Placa mãe           | Dell Inc. Manufactured 0YD6JR                | Gigabyte AB350-Gaming 3-CF   |
| Sistema operacional | Windows 10 Pro v1803                         | Windows 10 Pro v1803   |

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 8 – Especificações técnicas dos nós computacionais utilizados para simulações.

|                     | <i>Cluster Sdumont</i>               | <i>Cluster Euler</i>    |
|---------------------|--------------------------------------|-------------------------|
| Processador         | 2x Intel Xeon Cascade Lake Gold 6252 | 2x Intel Xeon E5-2680v2 |
| Núcleos/processador | 24 (48 por nó)                       | 10 (20 por nó)          |
| Memória RAM/nó      | 384 GB                               | 128 GB                  |
| Comunicação         | InfiniBand                           | InfiniBand              |

Fonte: (SINAPAD, 2023; CeMEAI, 2023).

## 4 RESULTADOS: VALIDAÇÕES DO MÉTODO DO PSEUDOPOTENCIAL

### 4.1 Influência do esquema de força na curva de saturação

Para os estudos conduzidos nessa seção, foi empregada uma malha de  $200 \times 5$  pontos, com condições periódicas em todas as direções. Cinco valores de fator de relaxação foram estudados,  $\tau = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$  e  $1.0$ , com operador de colisão BGK. Todos os dados são relatados em unidades de rede. Também, são simulados 50000 passos no tempo, que foram determinados empiricamente com certa margem para que o regime permanente fosse alcançado. As funções de distribuição  $f_i$ , bem como o esquema de força,  $F_i$ , são inicializados utilizando condição de velocidade inicial nula, com valores de equilíbrio. O perfil ao longo do domínio segue a distribuição (KHARMIANI; NIAZMAND; PASSANDIDEH-FARD, 2019):

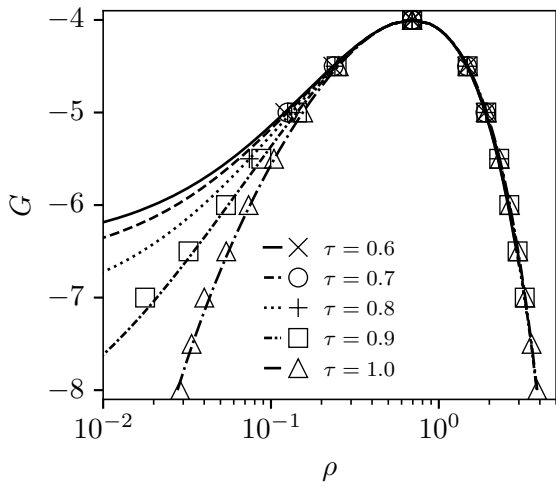
$$\rho(x) = \rho_g + \frac{\rho_l - \rho_g}{2} \left[ \tanh\left(\frac{2(x - 75)}{5}\right) - \tanh\left(\frac{2(x - 125)}{5}\right) \right], \quad (4.1)$$

em que  $\rho_l$  e  $\rho_g$  são iniciadas com os valores dados pela regra de Maxwell. Nessa etapa, procuramos verificar o comportamento de cinco esquemas de forças notórios na literatura, (HE; SHAN; DOOLEN, 1998; GUO; ZHENG; SHI, 2002; SHAN; CHEN, 1993; KUPERSHTOKH; MEDVEDEV; KARPOV, 2009; LADD; VERBERG, 2001) e comparar o comportamento numérico com a análise apresentada na Seção. 3.7.2.

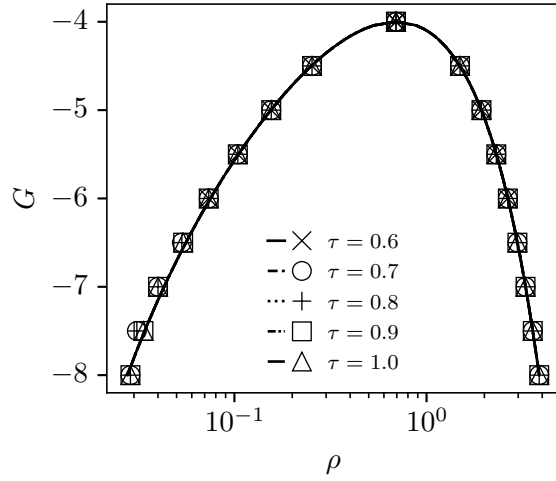
A comparação das curvas de saturação teórica, Eq. (3.29a), e os resultados obtidos pela simulação para cada um dos esquemas de força estudados são apresentados na Fig. 20. É possível observar uma boa concordância entre os resultados da curva de saturação teórica (linhas sólidas) utilizando a abordagem apresentada e os resultados simulados (marcadores). Para o esquema de Shan-Chen (Fig. 20a), é notável uma grande dependência dos resultados com o fator de relaxação. Embora esse seja um fato conhecido na literatura (KUPERSHTOKH; MEDVEDEV; KARPOV, 2009; YU; FAN, 2009), estudos que mostrem uma relação explícita com o fator de relaxação e curva de saturação são escassos na literatura. O esquema de Kupershtokh, Medvedev e Karpov apresenta independência entre a curva de saturação e fator de relaxação, com uma boa estabilidade para maiores razões de densidade, sendo o valor máximo observado próximo de 134. Os esquemas de Guo, Zheng e Shi e He, Shan e Doolen apresentaram resultados basicamente idênticos entre si. Isso é condizente com o esperado através da metodologia apresentada, uma vez que ambos apresentam os mesmos coeficientes para alteração de velocidade de equilíbrio e do esquema de forças (Tab. 6), que resulta nos mesmos parâmetros  $\gamma$  e  $\Gamma$ . Também, ambos esquemas mostram uma curva de saturação independente do fator de relaxação, e simulações estáveis até uma razão de densidade próxima de 39.8. Já com o esquema de Ladd e Verberg, nota-se que o método foi bastante instável, com uma razão máxima de densidade de 7.6, de forma que apenas regiões muito próximas do ponto crítico podem ser simuladas.



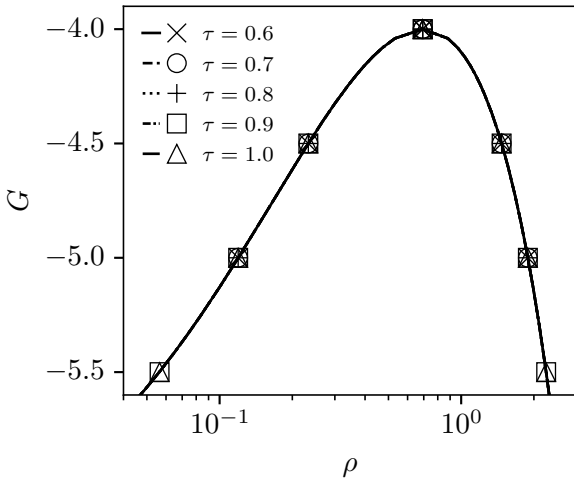
Figura 20 – Comparação entre a curva de saturação teórica, Eq. (3.29), representada por linhas contínuas, com os valores simulados, para diferentes esquemas de força e fatores de relaxação  $\tau = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0$ .



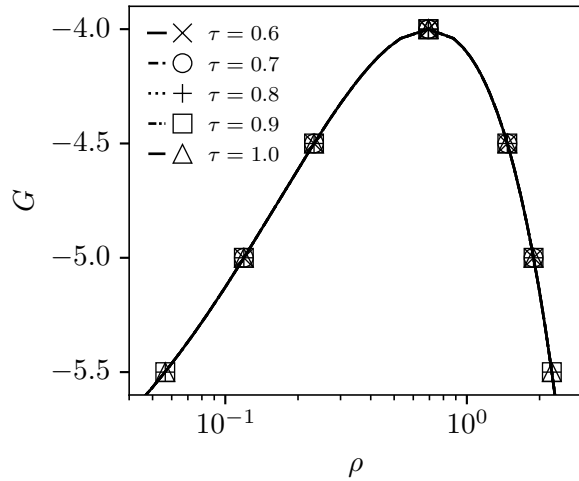
(a) Esquema de Shan e Chen (1993).



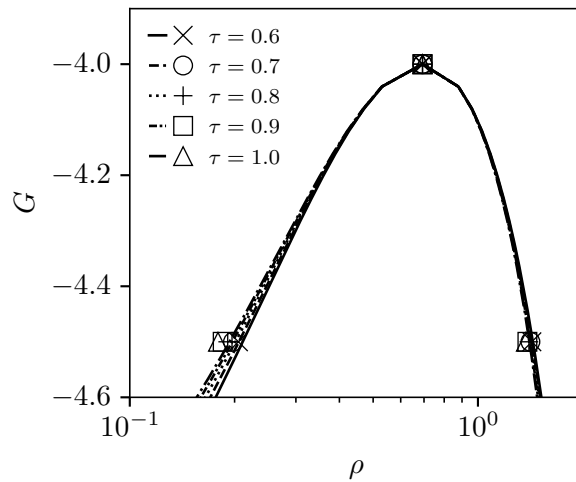
(b) Esquema de Kopershtokh, Medvedev e Karpov (2009).



(c) Esquema de Guo, Zheng e Shi (2002).



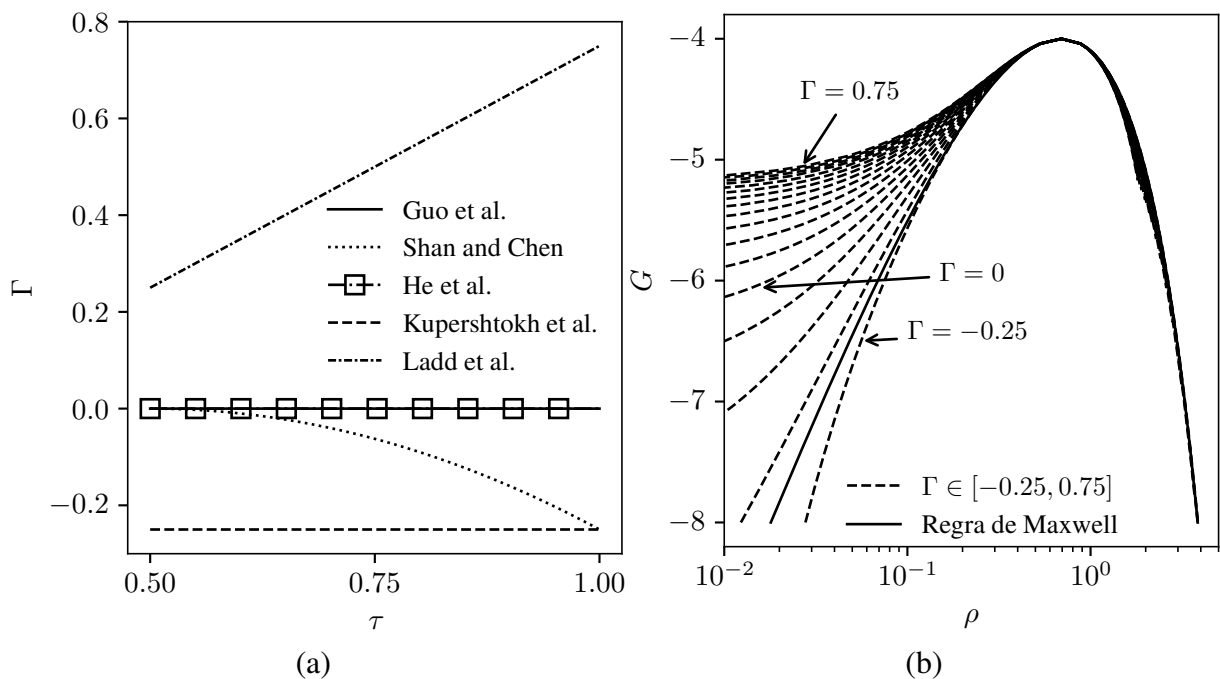
(d) Esquema de He, Shan e Doolen (1998).



(e) Esquema de Ladd e Verberg (2001).

Uma comparação entre todos os esquemas de forças pode ser melhor visualizada em termos do parâmetro  $\Gamma$ , Eq. (3.28c). Utilizar esse parâmetro permite abstrair o esquema de forças na análise, de forma que pode-se verificar posteriormente quais valores de  $\Gamma$  que o esquema reproduz. Dessa forma, a análise pode ser utilizada para outros esquemas de forças além dos empregados nesse estudo, desde que a condição dos parâmetros  $A = B = 1 - m/\tau$  seja satisfeita. O valor de  $\Gamma$  para cada um dos métodos estudados é mostrado na Fig. 21a, em que é possível observar que, para as condições estudadas, o valor do parâmetro  $\Gamma$  é limitado a um intervalo entre  $-0.25$  e  $0.75$ . Na Fig. 20, 17 curvas de coexistência correspondentes a uma partição regular desse intervalo (o que corresponde a  $\Delta\Gamma = 0.625$ ) são exibidas, juntamente com a curva obtida pela regra de Maxwell. Pela Eq. (3.29a), nota-se que a dependência da curva de coexistência com o valor de relaxação  $\tau$  é eliminada quando o esquema de força possui  $\gamma = 1 + \text{cte}/\tau$ , o que implica em  $\Gamma$  sendo um valor constante. Na Tab. 6, pode-se verificar que os métodos que cumprem com tal requisito são os métodos de Guo, Zheng e Shi, de He, Shan e Doolen e de Kupershtokh, Medvedev e Karpov.

Figura 21 – (a) Valores do parâmetro  $\Gamma$  para o fator de relaxação  $\tau \in [0.5, 1.0]$  para cada um dos esquemas de forças estudados e (b) influência do parâmetro  $\Gamma$  na curva de saturação (linhas tracejadas) em comparação com a curva dada pela regra de Maxwell (linha sólida).



Fonte: Elaborado pelo autor

Dentre os esquemas estudados, o método de Guo, Zheng e Shi, e de He, Shan e Doolen possuem valor  $\Gamma = 0$ , com os valores de densidade de vapor menores que o esperado pela regra de Maxwell. Portanto, a razão de densidade cresce mais rapidamente quando nos distanciamos do ponto crítico. No caso do esquema de Kupershtokh, Medvedev e Karpov, com  $\Gamma = -0.25$ , as densidades obtidas para o vapor são superestimadas em relação ao que é esperado pela regra

de Maxwell. Assim, as razões de densidade são menores para um mesmo valor de  $G$ , e logo, os gradientes da função  $\psi$  são menos severos nas regiões interfaciais, trazendo uma maior estabilidade ao método. Um outro ponto interessante de se observar é que a mesma variação  $\Delta\Gamma = 0.625$  possui maiores efeitos na curva de saturação quando  $\Gamma \leq 0$  do que para a região  $\Gamma > 0$ , especialmente nas densidades de vapor. Isso também é notável para o esquema de Shan-Chen, que possui o valor de  $\Gamma \in [-0.25, 0]$  e curvas mais sensíveis a uma variação do fator de relaxação  $\tau$  que o esquema de força de Ladd e Verberg. Este, por sua vez, apresenta uma variação na razão de densidades muito severa quando o valor de  $G$  diminui, de forma que foram observadas simulações estáveis apenas nas regiões próximas do ponto crítico. Em relação ao valor da densidade do líquido, a dependência com o parâmetro  $\Gamma$  é bem pequena, com pequenos aumentos em seu valor quando o valor de  $\Gamma$  aumenta.

Um ponto interessante a ser ressaltado é em relação às estratégias implementadas para se aprimorar a consistência termodinâmica do método sem o acoplamento da razão de densidades com o fator de relaxação. Por exemplo, o método de Kupershtokh, Medvedev e Karpov apresenta uma estratégia bem direta, com um  $\Gamma = -0.25$ , e uma curva de saturação mais próxima do esperado pela regra de Maxwell. Apesar dessa ser uma estratégia válida, é necessário considerar algumas desvantagens que ela traz. Quando se escolhe um valor de  $\Gamma \neq 0$ , para se obter consistência termodinâmica, deve-se ter:

$$\frac{\dot{\psi}}{\psi^{1+\varepsilon}} \exp\left(-\frac{8}{3} G \Gamma \int^{\rho} \psi \tilde{\rho}^{-1} d\tilde{\rho}\right) \propto \frac{1}{\rho^2},$$

para se obter o comportamento da curva de Maxwell. Isso acarreta em um comportamento complexo, especialmente quando se aplica outras equações de estado, como a de Carnahan-Starling. Além disso, essa complexidade também afeta o cálculo da tensão superficial. Dessa forma, outras estratégias foram traçadas pela comunidade científica.

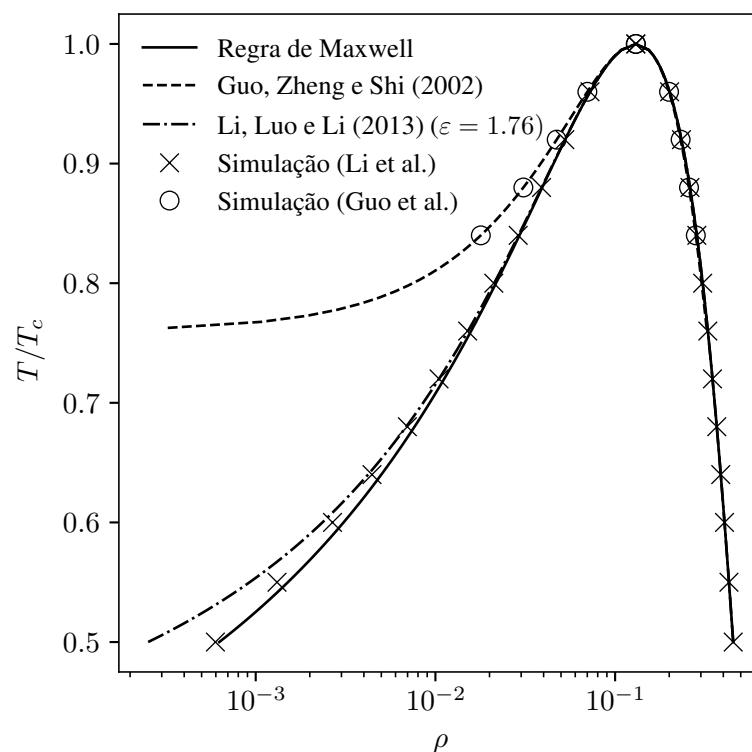
Uma segunda estratégia consiste em modificar o método de Guo, Zheng e Shi, adicionando um termo proporcional a  $\rho/\psi^2$  na velocidade do esquema de força (LYCETT-BROWN; LUO, 2015; LI; LUO, 2013; LI et al., 2012; LI; LUO; LI, 2013). Isso modifica o tensor de pressão de forma que o efeito prático final é alterar o valor de  $\varepsilon$  na equação Eq. (3.29a) de forma independente, enquanto  $\Gamma$  permanece nulo. Isso simplifica o termo exponencial e traz controle da curva de saturação através da inclusão de um novo parâmetro. Uma estratégia mais recente consiste em desenvolver novos termos de forças proporcionais a parâmetros de controle de curva de saturação e tensão superficial. Esses termos são então incorporados na equação de Boltzmann em rede pelo método de Guo et al. (CZELUSNIAK et al., 2020; KHARMIANI; NIAZMAND; PASSANDIDEH-FARD, 2019). Porém, os efeitos finais dessa abordagem no problema de interface plana é similar ao da estratégia de alteração na velocidade: controle da curva de saturação pelo parâmetro  $\varepsilon$ , mantendo  $\Gamma = 0$ .

## 4.2 Controle da curva de saturação

Para os testes de controle da curva de saturação, foi implementando o método de Li, Luo e Li (2013), com a mesma malha e inicialização do problema anterior. O parâmetro  $\varsigma = 0.11$  foi utilizado com o intuito de replicar os resultados do trabalho. Para esse problema, foi utilizada equação de estado de Carnahan-Starling, como descrito em Eq. (3.38), com  $G = -1$ , o que implica uma curva de saturação com  $\Gamma = 0$  e  $\varepsilon = 1.76$  (Eq. (3.36)).

A comparação entre os resultados obtidos para a curva de saturação teórica (linhas contínuas) entre o método de Guo, Zheng e Shi e Li, Luo e Li, assim como os resultados obtidos pela simulação do problema da interface plana são observados na Fig. 22. É possível notar que com a modificação proposta, foi possível realizar simulações com a temperatura reduzida  $T_r = T/T_c = 0.5$ , que corresponde a uma razão de densidade de aproximadamente, 760, enquanto que para o método de Guo et al., a maior razão de densidade simulada obtida foi de 15, mostrando que a modificação traz uma grande estabilidade ao método.

Figura 22 – Comparação entre a curva de saturação empregando o método de Guo, Zheng e Shi (2002) e o modelo modificado de Li, Luo e Li (2013) (valores teóricos dados pelas linhas, e simulados, pelos marcadores) para o problema de interface plana.



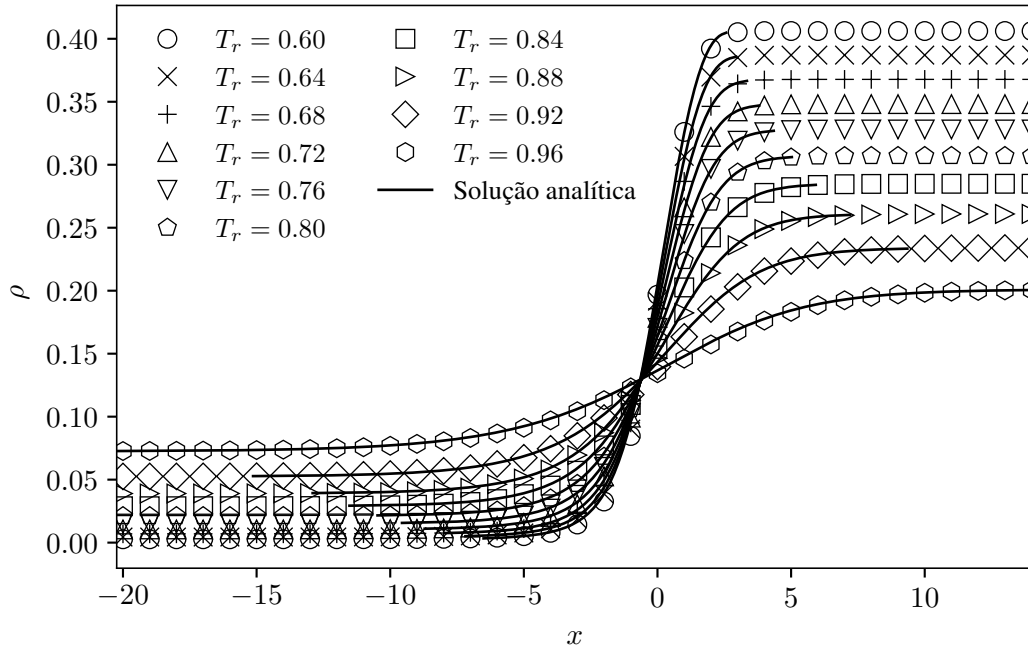
Fonte: Elaborado pelo autor

Comparando os resultados teóricos e os numéricos para o método de Li et al., é notável que para menores valores de temperatura reduzida  $T_r < 0.64$ , os valores simulados começam a divergir do esperado pela teoria. Isso indica que para essas regiões, mesmo com a inclusão dos

erros de terceira ordem na análise, Eq. (2.91), há indícios que termos de maiores ordem deveriam ser levados em conta devido aos altos gradientes na região interfacial. Recentemente, mostrou-se que pode-se obter melhores resultados alterando-se o comportamento da equação de estado no intervalo  $\rho_g < \rho < \rho_l$  (PENG et al., 2020). Em comparação à curva de Maxwell, pode-se notar que o método se mantém consistente até aproximadamente  $T_r = 0.76$ , a partir de onde, os erros crescem acima 5%, e eventualmente, retornam a valores baixos próximos de  $T_r = 0.5$ . Idealmente, o interessante seria que a curva teórica previsse bem os resultados simulados, de forma que pode-se encontrar um valor do parâmetro  $\varepsilon$  que resultasse em pontos mais próximos à regra de Maxwell. Nesses resultados preliminares, empregamos o valor utilizado no trabalho de Li, Luo e Li (2013),  $\varepsilon = 1.76$ , provavelmente pelo melhor ajuste para o problema de gota estática, como será mostrado adiante. No entanto, vale ressaltar que pode-se melhorar a curva dinâmica alterando o parâmetro  $\varepsilon$  e o parâmetro  $a$  da equação de estado, Eq. (3.38), que possui relação inversamente proporcional à espessura da interface (LYCETT-BROWN; LUO, 2016).

Também, comparamos os resultados teóricos do perfil de densidades do problema de interface plana, dado pelas Eqs. (3.39) e (3.40), e os resultados são exibidos na Fig. 23. Aqui, notamos como o gradiente de densidade se torna cada vez maior à medida que nos distanciamos do ponto crítico. Isso ocorre pois a diferença da densidade do vapor e líquido se tornam cada vez maiores. As estratégias comentadas para se amenizar isso acabam por ter como efeito o aumento da espessura da interface, o que faz com que esses gradientes não sejam tão grandes dentro da região interfacial. Aqui vemos que há uma boa concordância entre os valores simulados e a solução analítica dada pela teoria.

Figura 23 – Comparação dos perfis de densidade da solução analítica do problema da interface plana (linhas sólidas) e valores simulados (marcadores) para diferentes temperaturas reduzidas, utilizando o esquema de Li, Luo e Li (2013) com  $\varepsilon = 1.76$ .



Fonte: Elaborado pelo autor

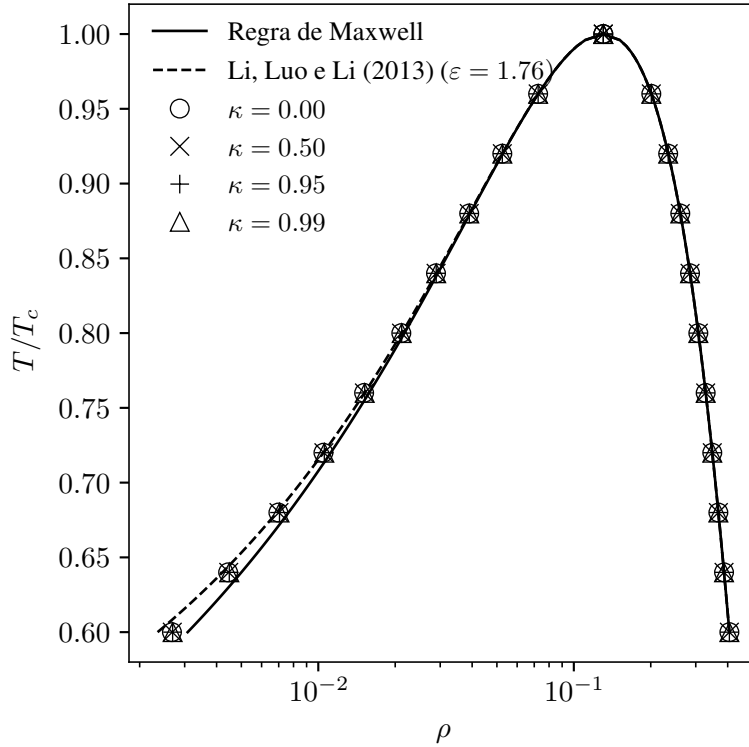
### 4.3 Controle da tensão superficial

#### 4.3.1 Interface plana

Para o controle da tensão superficial, inicialmente, realizou-se os testes com os mesmos parâmetros, adicionando os termos propostos Li e Luo (2013), dados na Eq. (3.44). Primeiramente, procurou-se testar se o método seria capaz de alterar a tensão superficial via parâmetro  $\kappa$ , sem que a curva de saturação fosse alterada. Para isso, os valores de  $\kappa = 0, 0.5, 0.95$  e  $0.99$  foram utilizados. Os resultados para a curva de saturação podem ser vistos na Fig. 24. Nas Figs. 25a e 25b, as densidades obtidas para, respectivamente, vapor e líquido são exibidas em função do parâmetro  $1 - \kappa$ . Através desses resultados, nota-se que os valores quase não se alteram, e as maiores variações ocorreram para a região de vapor, com diferenças relativas inferiores a 1%. Dessa forma, além de concordar com o resultado da literatura, também pode-se dizer que a curva de saturação é independente do parâmetro  $\kappa$ , como esperado.

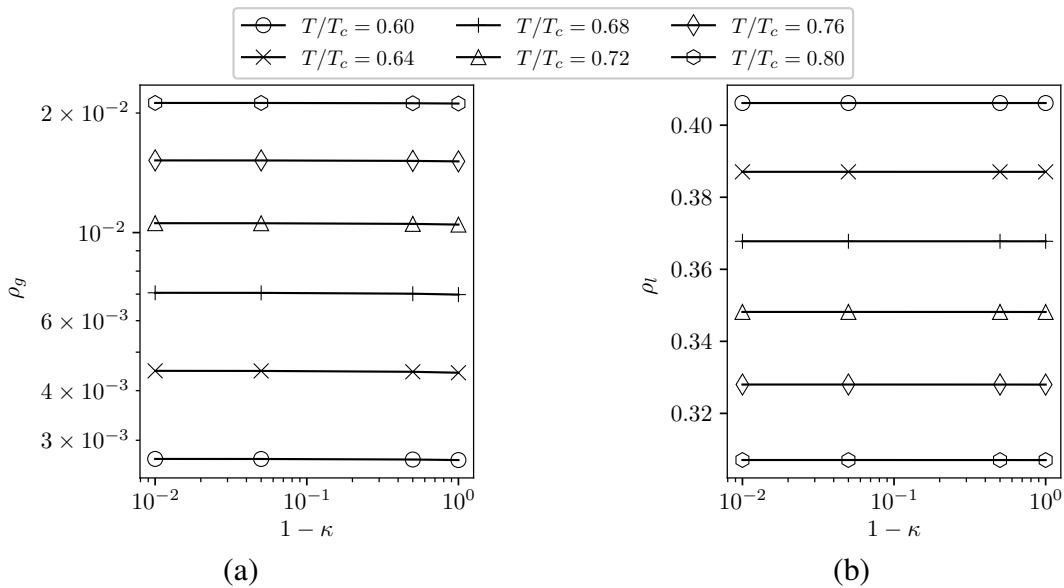
Na Fig. 26, comparamos os resultados de tensão superficial, calculados através da Eq. (3.45) utilizando os valores da simulação, com a tensão superficial calculada a partir do perfil de densidades pela solução analítica do tensor de pressão. No eixo  $x$ , optou-se por utilizar  $1 - \kappa$ , pois a tensão superficial  $\sigma$  é proporcional a esse fator. Aqui, vemos uma excelente concordância entre os resultados analíticos e simulados, de forma que foi possível reduzir o valor de tensão superficial em até 100 vezes com  $\kappa = 0.99$ , para todos os valores de temperatura reduzidas

Figura 24 – Comparação entre os resultados simulados (marcadores) com as curvas teóricas (linhas sólidas) para os parâmetros de controle de tensão superficial  $\kappa = 0, 0.5, 0.95$  e  $0.99$ .



Fonte: Elaborado pelo autor

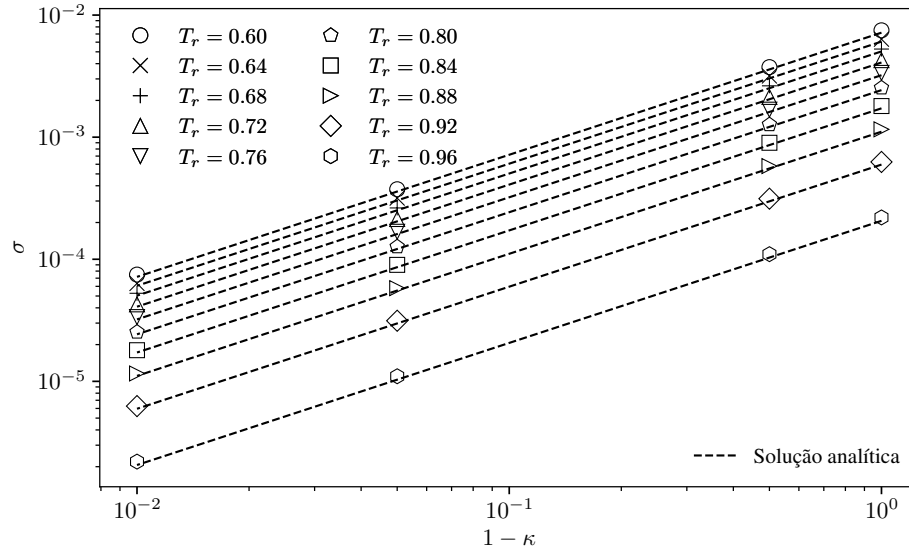
Figura 25 – Relação da densidade de vapor,  $\rho_g$  (a) e líquido,  $\rho_l$  (b) com a alteração do parâmetro  $1 - \kappa$ , para diferentes temperaturas reduzidas, para o problema de interface plana.



Fonte: Elaborado pelo autor

estudados.

Figura 26 – Comparação da variação da tensão superficial,  $\sigma$ , com o parâmetro de controle,  $1 - \kappa$ , esperado pela solução analítica (linhas tracejadas), e obtidos através da simulação (marcadores) para diferentes temperaturas reduzidas, para o problema de interface plana.



Fonte: Elaborado pelo autor

#### 4.3.2 Gota estática

Para continuar testando as capacidades do método em relação ao controle da tensão superficial, realizamos também o teste de uma gota estática imersa em um meio preenchido de vapor. A simulação utiliza condição periódica em todas as direções, com campo nulo de velocidades e o seguinte perfil de densidades inicial:

$$\rho(x, y) = \frac{\rho_g + \rho_l}{2} - \frac{\rho_l - \rho_g}{2} \tanh\left(\frac{r(x, y) - R_0}{W}\right),$$

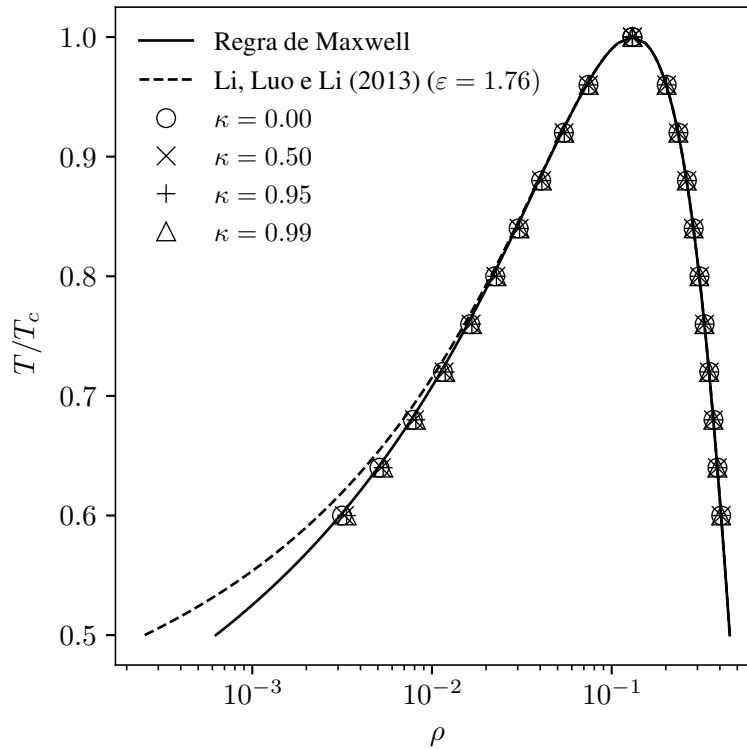
sendo  $W = 5$  nós,  $R_0 = 40$  nós,  $r(x, y)$  a distância euclidiana até o centro da malha computacional, que possuiu dimensões totais de  $200 \times 200$  nós. Exceto a inicialização e seus parâmetros associados, todas as outras condições anteriores foram aplicadas.

Inicialmente, replicamos o teste da curva de saturação, como mostrado na Fig. 27. Aqui, já vemos algum dos efeitos que ocorrem quando estudamos uma interface curva. A principal diferença ocorre na região das densidades de vapor, onde vemos que agora os valores estão muito próximos que é dado pela regra de Maxwell. Essa concordância provavelmente foi o que motivou os autores a utilizarem o parâmetro  $\zeta = 0.11$ , correspondente a um  $\varepsilon = 1.76$  na equação de saturação. No entanto, essa concordância não possui um significado físico rigoroso, uma vez que a regra de Maxwell apresentada é válida para interfaces planas, caso em que é a tensão superficial atua em uma direção ortogonal à variação de densidades. No caso da gota estática,



existe um salto de pressão no interior e exterior da gota no equilíbrio térmico, devido à atuação da tensão superficial, que deve ser levada em conta (CZELUSNIAK et al., 2020).

Figura 27 – Comparação entre os resultados simulados para o problema de gota estática (marcadores) com as curvas teóricas do problema de interface plana (linhas sólidas) para os parâmetros de controle de tensão superficial  $\kappa = 0, 0.5, 0.95$  e  $0.99$ .

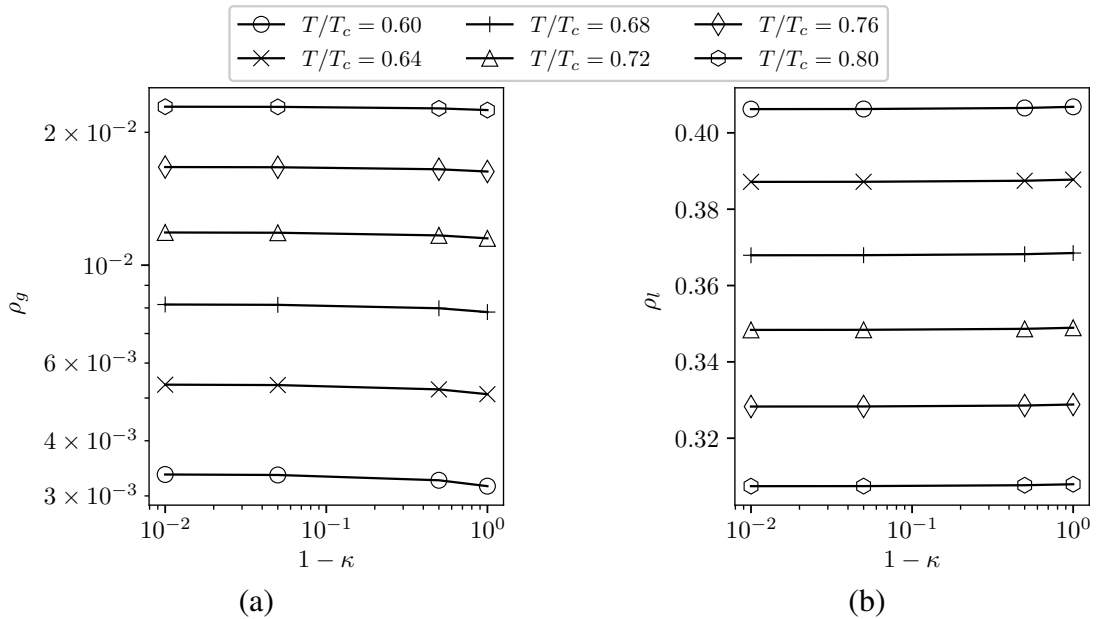


Fonte: Elaborado pelo autor

Nas Figs. 28a e 28b, são apresentados os valores de densidade, respectivamente, do vapor e do líquido, para diferentes temperaturas reduzidas. Aqui, notamos uma sensibilidade maior da densidade do vapor quando tentamos alterar a tensão superficial via parâmetro  $\kappa$ , com variações relativas de até 6.3%, para o caso de  $T_r = 0.6$ . No trabalho de Czelusniak et al. (2020) mostrou-se que essas variações também são relacionadas com a espessura da interface, que pode ser modificada pelo parâmetro da equação de estado. Na região de líquido, também notou-se uma maior sensibilidade, ainda que as variações relativas sejam da ordem de 0.1%.

Para verificarmos o comportamento da tensão superficial com a variação do parâmetro  $\kappa$ , utilizou-se a lei de Young-Laplace, Eq. (3.46), para o cálculo da tensão a partir dos resultados simulados. Os resultados são exibidos como marcadores na Fig. 29, e o comportamento linear com a solução analítica do problema de interface plana são exibidos novamente para comparação. Nesses resultados, notamos que quando  $\kappa = 0$ , ou seja, sem realizar alterações na tensão superficial, os valores obtidos são muito próximos do que se esperaria em um problema de interface plana. Quando reduzimos a tensão superficial, observamos uma boa concordância até por volta de 50% do valor original, i.e.,  $1 - \kappa = 0.5$ . Porém, para  $1 - \kappa = 0.05$  e  $0.01$ , vemos

Figura 28 – Relação da densidade de vapor,  $\rho_g$  (a) e líquido,  $\rho_l$  (b) com a alteração do parâmetro  $1 - \kappa$ , para diferentes temperaturas reduzidas, para o problema de gota estática.

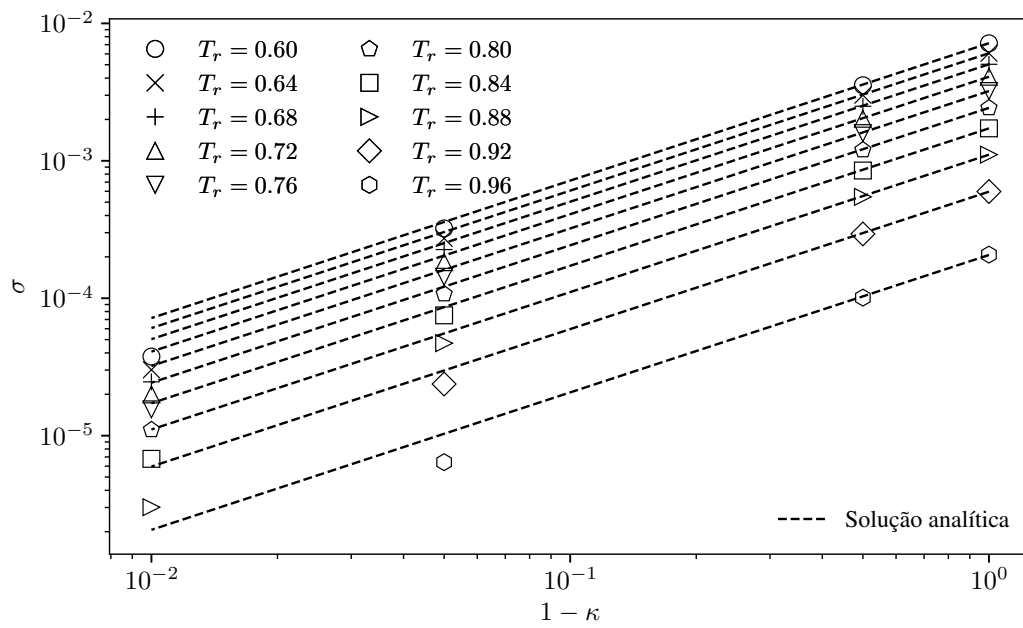


Fonte: Elaborado pelo autor

que o perfil linear não é mais obedecido, e obtemos reduções na tensão superficial maiores do que esperado. Para  $1 - \kappa = 0.05$ , os valores da tensão variaram entre 4.45% ( $T_r = 0.6$ ) e 3.08% ( $T_r = 0.96$ ) do valor de tensão superficial original, situação em se esperaria o resultado de 5%. Já para  $1 - \kappa = 0.01$ , os valores em relação à tensão superficial com  $\kappa$  variaram entre 0.5% e 0.2%, valores menores que a metade da redução a 1% esperada pela análise.

Dessa forma, quando comparado com os casos estáticos de interface plana, em que foi possível reduzir em até 100 vezes a tensão superficial, para o caso da gota estática, o método apresentou uma boa previsibilidade para reduções de até 50%, mesmo para valores de  $T_r = 0.60$ . Apesar desse resultado, esse comportamento é de certa forma esperado, uma vez que o método foi desenvolvido utilizando a análise para a interface plana inicialmente.

Figura 29 – Comparação da variação da tensão superficial,  $\sigma$ , com o parâmetro de controle,  $1 - \kappa$ , esperado pela solução analítica da interface plana (linhas tracejadas), e valores obtidos pela lei de Young-Laplace para o problema da gota estática (marcadores), submetidos a diferentes temperaturas.



Fonte: Elaborado pelo autor

## 5 RESULTADOS: REFINAMENTO DE MALHA

Ao longo deste capítulo, usamos o símbolo chapéu " $\hat{\cdot}$ " para se referir a quantidades físicas em unidades SI. Caso contrário, as quantidades são expressas em unidades de rede. Um dos pontos desse trabalho é mostrar como deve ser realizado o refinamento de malha empregando o regime viscoso, ou seja,  $\Delta \hat{t} \propto \Delta \hat{x}^2$ , onde  $\Delta \hat{t}$  e  $\Delta \hat{x}$  são o passo de tempo físico e a distância física entre as células da malha, respectivamente. Esse tópico é pouco discutido na literatura, e poucos trabalhos mostram a convergência das simulações em seus resultados. Além disso, iremos mostrar que o refinamento não é trivial, e deve, necessariamente, ser implementado por um método com capacidade de controlar tensão superficial, espessura de interface e a curva da saturação (LYCETT-BROWN; LUO, 2015).

### 5.1 Método de refinamento

O método proposto tem como objetivo estabelecer as condições necessárias para realizar estudos de refinamento de malhas para simulações de ebulição com transferência de calor. O foco principal são simulações de ebulição em piscina, em que o balanço entre as forças de tensão superficial e gravitacional possui grande influência na dinâmica resultante da simulação. Por essa razão, os valores de comprimento, velocidade e tempo característicos são baseados na proposta de Son, Dhir e Ramanujapu (1999), dados por:

$$\hat{\ell}_0 = \sqrt{\frac{\hat{\sigma}}{\hat{g}(\hat{\rho}_\ell - \hat{\rho}_v)}}, \quad \hat{u}_0 = \sqrt{\hat{g} \hat{\ell}_0}, \quad \hat{t}_0 = \hat{\ell}_0 / \hat{u}_0, \quad (5.1)$$

em que  $\hat{\ell}_0$  é o comprimento capilar, que representa a razão entre efeitos de tensão superficial e gravitacionais,  $\hat{u}_0$  e  $\hat{t}_0$  são, respectivamente, as velocidades e tempo característicos. Em unidades de redes, esses valores são definidos por:

$$\ell_0 = \hat{\ell}_0 / \Delta \hat{x}, \quad u_0 = \sqrt{g \ell_0}, \quad t_0 = \ell_0 / u_0, \quad (5.2)$$

sendo que a gravidade em unidades de rede é calculada através da seguinte expressão,  $g = \frac{\sigma}{\ell_0^2(\rho_\ell - \rho_v)}$ .

A viscosidade cinemática,  $\nu$ , é calculada através de uma interpolação linear entre as viscosidades de cada uma das fases de líquido e vapor:

$$\hat{\nu}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hat{\rho}(\mathbf{x}, t) - \hat{\rho}_v}{\hat{\rho}_\ell - \hat{\rho}_v} \hat{\nu}_\ell + \frac{\hat{\rho}_\ell - \hat{\rho}(\mathbf{x}, t)}{\hat{\rho}_\ell - \hat{\rho}_v} \hat{\nu}_v, \quad (5.3)$$

onde  $\hat{\nu}_\alpha = \hat{u}_0 \hat{\ell}_0 / \text{Re}_\alpha$ ,  $\alpha \in \{\ell, v\}$ . O símbolo  $\text{Re}_\alpha$  representa o respectivo número de Reynolds da fase  $\alpha$ . Sabendo que o passo de tempo físico  $\Delta \hat{t}$  está relacionado a  $\Delta \hat{x}$  por  $\Delta \hat{t} = \Delta \hat{x}^2 \nu / \hat{\nu}$

(KRÜGER et al., 2017), as seguintes relações podem ser calculadas:

$$\Delta \hat{t} = \Delta \hat{x}^2 \frac{\nu}{\hat{v}} = \Delta \hat{x}^2 \frac{u_0 \ell_0}{\hat{u}_0 \hat{\ell}_0}. \quad (5.4)$$

Portanto, para permanecer no escalonamento difusivo, ou seja,  $\Delta \hat{t} \propto \Delta \hat{x}^2$ , o produto em unidades de rede  $u_0 \ell_0$  não deve possuir dependência do espaçamento da malha,  $\Delta \hat{x}$ . Por outro lado, é possível calcular a relação:

$$u_0 \ell_0 = \sqrt{\frac{\hat{\ell}_0}{\rho_l - \rho_v} \frac{\sigma}{\Delta \hat{x}}}. \quad (5.5)$$

Como o comprimento capilar físico  $\hat{\ell}_0$  é calculado pelas propriedades do fluido, e as densidades das fases de vapor em unidades de rede são determinadas definida a temperatura de saturação, conclui-se que é necessário que a tensão superficial,  $\sigma$ , necessita variar linearmente com o parâmetro com o espaçamento entre as malhas, ou seja,  $\sigma = \mathcal{O}(\Delta \hat{x})$ , para satisfazer o escalonamento difusivo. Conforme observado por Czelusniak et al. (2020), a única maneira de obter esse comportamento é ajustando o parâmetro  $\kappa$  na Eq. (3.43) para cada  $\Delta \hat{x}$ , já que a tensão superficial, dada pela Eq. (3.45), é proporcional a  $1 - \kappa$ .

Para garantir que a alteração do valor da tensão superficial, em unidades de rede, resultem na mesma simulação em unidades físicas durante o refinamento de malha, é importante manter a similaridade entre as malhas. Por essa razão, as quantidades de interesse foram analisadas com intuito de manter as consistências hidrodinâmicas termodinâmica durante o refinamento. Com isso, temos o seguinte:

- **Consistência hidrodinâmica:** o número de Reynolds  $Re_\alpha$  de cada fase, bem como a tensão superficial, são mantidos constantes. A última condição implica que a equação de Laplace:

$$\Delta P_{\Delta \hat{x}} = \frac{\sigma}{r_{\Delta \hat{x}}}, \quad (5.6)$$

deve permanecer válida para qualquer valor de  $\Delta \hat{x}$ , sendo  $\Delta P_{\Delta \hat{x}}$  a diferença no campo de pressão entre o interior e exterior da bolha e  $r_{\Delta \hat{x}}$  o raio da bolha. O subscripto  $\Delta \hat{x}$  indicam que as quantidades são tomadas em uma malha com espaçamento físico  $\Delta \hat{x}$ . Como temos  $\sigma = \mathcal{O}(\Delta \hat{x})$  e  $R_{\Delta \hat{x}}$ , naturalmente, escala como  $\mathcal{O}(\Delta \hat{x}^{-1})$ , é necessário garantir que o campo de pressões escale de acordo com  $\Delta P_{\Delta \hat{x}} = \mathcal{O}(\Delta \hat{x}^2)$ .

- **Consistência termodinâmica:** A razão de densidade é mantida constante para uma temperatura de saturação imposta ( $T_{\text{sat}}$ ) em todas as malhas. A curva de coexistência é ajustada pelo parâmetro  $\varsigma$ , da Eq. (2.90), para manter as mesmas densidades de coexistência para a temperatura de saturação  $T_{\text{sat}}$  imposta. Esse procedimento é realizado utilizando o problema de interface plana, em que o primeiro passo é encontrar as densidades que satisfazem a equação de Maxwell. Uma vez com esses valores, realiza-se uma busca pela raiz  $\varsigma$

que resulte nas mesmas densidades de Maxwell, dada uma temperatura de saturação de interesse. Logo após, o ajuste da tensão superficial pelo parâmetro  $\kappa$  é realizado para cada malha como uma etapa final no cálculo dos parâmetros.

O fator de conversão para uma variável macroscópica qualquer  $\Theta = \Theta(\mathbf{x}, t)$  é a constante  $C_\Theta$ , de forma que seu valor em unidades físicas,  $\hat{\Theta}(\mathbf{x}, t)$ , pode ser obtido a partir do termo em unidades em rede  $\Theta(\mathbf{x}, t)$  como  $\hat{\Theta}(\mathbf{x}, t) = C_\Theta \Theta(\mathbf{x}, t)$  para qualquer  $(\mathbf{x}, t)$ . Os fatores de conversão  $C_\rho$ ,  $C_p$  e  $C_T$  correspondem aos valores críticos  $\rho_c$ ,  $p_c$  e  $T_c$  (respectivamente, densidade crítica, pressão e temperatura), e são determinados pela equação de estado em uso, que para as simulações deste capítulo se referem à equação de Peng-Robinson, descrita na Eq. (2.88). Para esta equação de estado, é possível mostrar que os valores da densidade, pressão e temperatura crítica são proporcionais aos parâmetros da equação, respectivamente, da seguinte forma:  $\rho_c = \rho_c(b)$ ,  $p_c \propto a/b^2$  e  $T_c \propto a/b$ . Com essas relações, para manter a variação do campo de pressão proporcional a  $\Delta\hat{x}^2$  com a alteração do parâmetro de malha  $\Delta\hat{x}$ , no método proposto, optou-se por manter o valor de  $b$  constante, e variar o valor do parâmetro  $a$  de acordo com:

$$a(\Delta x) = a_{\text{base}} \frac{\Delta x^2}{\Delta x_0^2}, \quad (5.7)$$

em que  $a_{\text{base}}$  é um valor de referência  $a_{\text{base}} = a(\Delta x_0)$  na malha mais grossa ( $\Delta x_0$ ) definida para cada teste numérico.

Na Tab. 9, é exibido a ordem do escalonamento necessário das variáveis macroscópicas de interesse para manter as consistências físicas entre as malhas.

Tabela 9 – Escalonamento dos campos ao variar o parâmetro de refinamento.

| Símbolo        | Descrição                           | Fator de Conversão                      | Escalonamento                |
|----------------|-------------------------------------|---|------------------------------|
|                | Comprimento                         | $C_\ell = \hat{\ell}_0/\ell_0$          | $\mathcal{O}(\Delta x^{-1})$ |
|                | Tempo                               | $C_t = C_\ell \sqrt{g\ell_0}/\hat{u}_0$ | $\mathcal{O}(\Delta x^{-2})$ |
| $\rho$         | Densidade                           | $C_\rho = \hat{\rho}_c/\rho_c$          | $\mathcal{O}(1)$             |
| $p$            | Pressão                             | $C_p = \hat{p}_c/p_c$                   | $\mathcal{O}(\Delta x^2)$    |
| $T$            | Temperatura                         | $C_T = \hat{T}_c/T_c$                   | $\mathcal{O}(\Delta x^2)$    |
| $k$            | Condutividade térmica               | $(C_\rho C_\ell^4) / (C_T C_t^3)$       | $\mathcal{O}(1)$             |
| $C_v$          | Calor específico a volume constante | $C_\ell^2 / (C_t^2, C_T)$               | $\mathcal{O}(1)$             |
| $\eta$         | Viscosidade                         | $C_\ell^2 / C_t$                        | $\mathcal{O}(1)$             |
| $g$            | Aceleração gravitacional            | $C_\ell / C_t^2$                        | $\mathcal{O}(\Delta x^3)$    |
| $\mathbf{F}^b$ | Forças de Corpo                     | $(C_\rho C_\ell) / C_t^2$               | $\mathcal{O}(\Delta x^3)$    |

Em resumo, as similaridades hidrodinâmicas e termodinâmicas implicam em variar três parâmetros para manter a consistência física:  $a \propto \Delta\hat{x}^2$ ,  $\sigma = \sigma(\Delta\hat{x})$  e  $\kappa = \kappa(\Delta\hat{x})$ . Embora a relação do parâmetro  $a$  com o refinamento da grade seja direta, a dependência dos parâmetros  $\sigma$  e  $\kappa$  em relação a  $\Delta x$  não é trivial e, por essa razão, eles devem ser calculados por procedimentos numéricos.

### 5.1.1 Exemplo de escalonamento dos parâmetros

Para elucidar o procedimento descrito, tomamos como exemplo a resolução de um problema genérico unidimensional utilizando uma malha grossa com  $L = 128$  nós, dados os parâmetros  $a = 6.12 \times 10^{-2}$  e  $T_r = 0.86T_c$ . Além disso, vamos assumir uma razão fixa de refinamento igual a 1.5 e vamos aplicá-la para outras três malhas mais finas. Com isso, temos  $L = 192, 288$  e  $432$ . Vale ressaltar que essas malhas foram utilizadas para o estudo do problema de Stefan na próxima seção.

O primeiro passo no procedimento de refinamento é ajustar o parâmetro da equação de Peng-Robinson,  $a$ , para cada uma das novas malhas. Este parâmetro é calculado por meio da Eq. (5.7), resultando em valores de  $a$  iguais a  $6.12 \times 10^{-2}$ ,  $2.72 \times 10^{-2}$ ,  $1.21 \times 10^{-2}$  e  $5.37 \times 10^{-3}$  para, respectivamente,  $L = 128, 192, 288$  e  $432$ . Esse parâmetro influencia a similaridade hidrodinâmica por meio da equação de Laplace e também atua na consistência termodinâmica (LYCETT-BROWN; LUO, 2015; CZELUSNIAK et al., 2020), especialmente nos valores de densidades da fase de vapor.

A consistência termodinâmica pode ser garantida resolvendo-se a equação da curva de coexistência planar, dada pela seguinte expressão (LI; LUO; LI, 2013; LI; LUO, 2013):

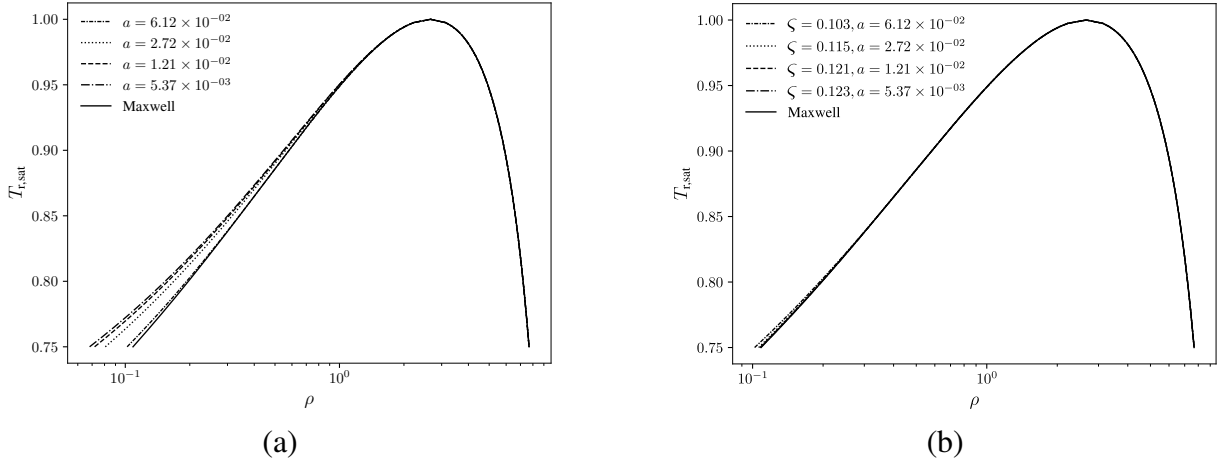
$$\int_{\rho_g}^{\rho_l} (p_{sat} - p_{EOS}) \frac{\dot{\psi}}{\psi^{1-16G\zeta}} d\rho = 0, \quad (5.8)$$

onde, para um determinado valor de  $a$ , o parâmetro  $\zeta$  (LI; LUO; LI, 2013) é ajustado para que essa equação resulte em densidades de equilíbrio iguais à da regra de Maxwell. Este é o segundo passo do procedimento de refinamento proposto.

Na Fig. 30a, são apresentadas as curvas de coexistência para malhas de  $L = 128$  a  $L = 432$  e seus respectivos valores de  $a$  para um parâmetro fixo  $\zeta = 0.103$ , que é um valor conhecido que garante uma melhor consistência termodinâmica (LI; LUO; LI, 2013; LI; LUO, 2013). Neste caso, é possível observar como as densidades de vapor da curva de saturação se afastam dos valores da regra de Maxwell, à medida que o parâmetro  $a$  de Peng-Robinson diminui. Para corrigir esse efeito, o parâmetro  $\zeta$  é ajustado para cada uma dessas malhas. O valor correto é encontrado empregando método para encontrar a raiz da Eq. (5.8) dado um chute inicial de  $-16G\zeta_0 = 2$  (LYCETT-BROWN; LUO, 2015), utilizando como limites de integração as densidades de vapor e líquido da regra de Maxwell. As curvas de coexistência obtidas dessa maneira são mostradas na Fig. 30b, onde se observa uma melhor concordância entre as curvas de saturação analíticas e os valores encontrados a partir da regra de Maxwell, garantindo assim a consistência termodinâmica para cada malha refinada.

O terceiro e último passo do procedimento de refinamento de malha consiste em garantir uma diminuição linear na tensão superficial,  $\sigma = \mathcal{O}(\Delta\hat{x})$ . Para o método de cálculo da tensão superficial proposto por Li e Luo (2013), definido pelas Eqs. (3.42) e (3.43), é possível mostrar que a tensão superficial para o problema de interface planar é dada por:

Figura 30 – Curvas de coexistência de interface plana para diferentes valores do parâmetro de Peng-Robinson  $a$ , com  $\zeta = 0.103$  fixo (a) e ajustando o parâmetro  $\zeta$  para garantir consistência termodinâmica (b).



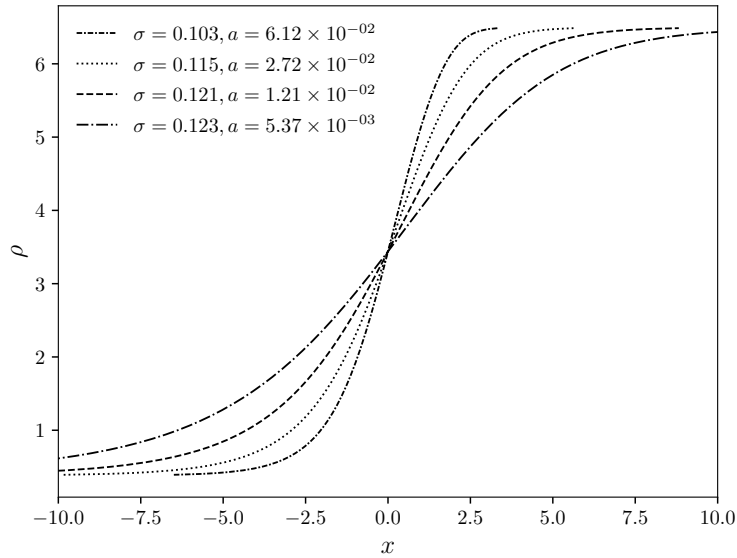
A partir da Eq. (3.45), é possível verificar que o valor da tensão superficial para o problema de interface plana depende do perfil de  $\psi$  ao longo da interface líquido-vapor e, conseqüentemente, do perfil de densidade. Na Fig. 31, são exibidos os perfis de densidade para as malhas estudadas de  $L = 128$  a  $L = 432$ , assim como os parâmetros  $a$  e  $\zeta$  utilizados. Como mencionado anteriormente, o parâmetro  $\zeta$  garante as mesmas densidades de vapor e líquido, enquanto o parâmetro  $a$  garante que a pressão escale de acordo com  $\Delta P_{\Delta \hat{x}} = \mathcal{O}(\Delta \hat{x}^2)$ . É possível observar que a variação desses parâmetros resulta em uma interface mais espessa em unidades de rede, o que implica que o valor da tensão superficial  $\sigma$  também se altera entre as malhas. Assim, o último passo do procedimento consiste em garantir uma redução linear da tensão superficial com  $\Delta \hat{x}$ , encontrando o valor do parâmetro  $\kappa$  de modo que:

$$\sigma_1(\kappa) = \sigma_0 \frac{\Delta x_1}{\Delta x_0}, \quad (5.9)$$

onde os subscritos 0 e 1 referem-se, respectivamente, a uma malha mais grosseira e a uma malha mais fina. O valor alvo da malha mais fina  $\sigma_1$  é calculado a partir da Eq. (5.9), e então o parâmetro  $\kappa$  é determinado a partir da Eq. (3.45) substituindo  $\sigma = \sigma_1$  e resolvendo a integral do lado direito para o problema de interface plana Li e Luo (2013), Czelusniak et al. (2020). Aplicando esse procedimento, encontra-se os valores de  $\kappa$  igual a 0,  $-5.17 \times 10^{-2}$ ,  $-7.44 \times 10^{-2}$  e  $-8.45 \times 10^{-2}$  para, respectivamente,  $L = 128, 192, 288$  e  $432$ .



Figura 31 – Perfil de densidade da interface plana para a EOS Peng-Robinson com parâmetro  $a$  igual a  $6.12 \times 10^{-2}$ ,  $2.72 \times 10^{-2}$ ,  $1.21 \times 10^{-2}$  e  $5.37 \times 10^{-3}$ .



## 5.2 Casos testes

Primeiramente, dois problemas mais simples são analisados para validar e investigar a aplicação do procedimento de refinamento de malha desenvolvido. Na Seção 5.2.1, é apresentada a vaporização bidimensional de uma gota em um meio de vapor superaquecido. Em seguida, na Seção 5.2.2, um problema de Stefan unidimensional, um caso simplificado de ebulição unidimensional, é resolvido para uma configuração semelhante ao apresentado em Safari, Rahimian e Krafczyk (2013), como descrito na Seção 3.8.5. Finalmente, na Seção 5.3, o problema de ebulição em piscina é avaliado. Na solução de cada problema, o procedimento explicado na Seção 5.1 é empregado para refinar a malha. Em todos casos, os resultados são redimensionados para a malha mais grossa a fim de realizar as comparações, exceto quando indicado de outra forma.

### 5.2.1 Vaporização de uma gota

Para estas simulações, fixamos os parâmetros de relaxação para  $\tau_\rho^{-1} = \tau_e^{-1} = \tau_\zeta^{-1} = \tau_j^{-1} = \tau_q^{-1} = 1.25$ .

Os resultados obtidos para quatro malhas diferentes são relatados a seguir. Na Fig. 32, é mostrado como o raio da gota  $r(t)$  muda com o tempo, enquanto os respectivos parâmetros em unidades de rede são dados na Tabela 10. Os seguintes parâmetros foram considerados constantes para todas as malhas:  $\nu_\ell = \nu = 0.1$ ,  $k_\ell = k_v = 2/3$ ,  $c_{v\ell} = c_{vv} = 5.0$  e  $\mathbf{g} = 0$ . Para esses casos, o número de Jakob é  $Ja = c_v (T_v - T_{\text{sat}}) / h_{lg} = 0.133$ . Para reduzir as oscilações de densidade iniciais da simulação, realizou-se a simulação apenas da parte hidrodinâmica de  $t = 0$  a  $t = 10000$ . Assim, o campo de temperatura é constante ao longo desse intervalo de tempo. Na Fig. 32, é possível observar as oscilações do raio da gota  $r(t)$  nos instantes iniciais, com

equilíbrio mecânico alcançado em  $t \approx 3.000$ .

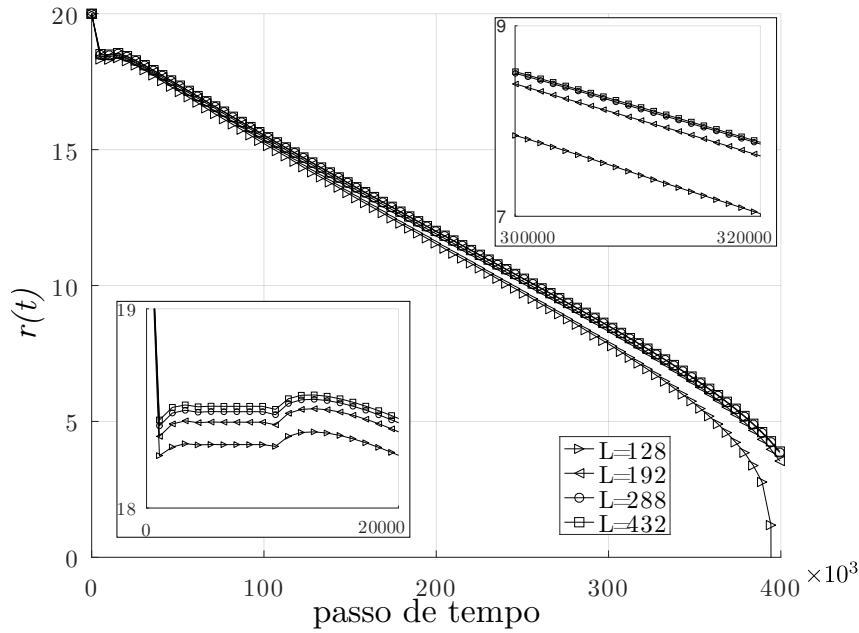


Figura 32 – Evolução temporal do raio da gota,  $r(t)$ , para quatro malhas distintas.

Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

Tabela 10 – Valores dos parâmetros, em unidades de rede, utilizados para o refinamento de malha do problema de vaporização.

| L   | número de passos $\times 10^6$ | $a$                   | $\zeta$ | $\kappa$               | $\Delta^*r(t)$        |
|-----|--------------------------------|-----------------------|---------|------------------------|-----------------------|
| 128 | 0.40                           | $6.12 \times 10^{-3}$ | 0.103   | 0                      | -                     |
| 192 | 0.90                           | $2.72 \times 10^{-3}$ | 0.115   | $-5.17 \times 10^{-2}$ | $2.83 \times 10^{-2}$ |
| 288 | 2.03                           | $1.21 \times 10^{-3}$ | 0.121   | $-7.44 \times 10^{-2}$ | $6.64 \times 10^{-3}$ |
| 432 | 4.56                           | $5.37 \times 10^{-4}$ | 0.123   | $-8.45 \times 10^{-2}$ | $1.35 \times 10^{-3}$ |

Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

A curva  $r(t)$  exibida na Fig. 32 mostra uma rápida convergência com o refinamento da malha. Esse comportamento é confirmado pelos dados apresentados na Tab. 10 para uma quantidade relativa  $\Delta^*r(t)$ , definida como:

$$\Delta^*r(t) = \frac{\sum_{t=0}^T |r(t) - r^r(t)|}{\sum_{t=0}^T |r^r(t)|}, \quad (5.10)$$

em que valor  $r(t)$  é avaliado em uma determinada malha e  $r^r(t)$  é avaliada na malha próxima malha com maior número de pontos. Assim, o valor da segunda linha da Tab. 10,  $\Delta^*r(t) = 2.83 \times 10^{-2}$ , corresponde à diferença relativa entre as curvas para  $L = 128$  e  $L = 192$ , enquanto o valor da terceira linha corresponde à diferença entre  $L = 192$  e  $L = 288$ , e o valor apresentado na última linha à diferença entre  $L = 288$  e  $L = 432$ , respectivamente. Pode-se observar que os

resultados apresentam um comportamento assintótico de convergência à medida que a diferença relativa diminui em uma razão aproximadamente constante. De fato:

$$\frac{\Delta^* r(t)_{128 \rightarrow 192}}{\Delta^* r(t)_{192 \rightarrow 288}} = \frac{2.83 \times 10^{-2}}{6.64 \times 10^{-3}} \approx 4.27, \quad \frac{\Delta^* r(t)_{192 \rightarrow 288}}{\Delta^* r(t)_{288 \rightarrow 432}} = \frac{6.64 \times 10^{-3}}{1.35 \times 10^{-3}} \approx 4.91,$$

o que resulta nas seguintes ordens de convergência de

$$\log(4.27)/\log(1.5) \approx 3.58, \quad \log(4.91)/\log(1.5) \approx 3.92,$$

respectivamente. Essa ordem de convergência está relacionada tanto ao refinamento espacial quanto temporal, já que o escalonamento difusivo está sendo imposto, onde  $\Delta t \propto \Delta x^2$ . Também é importante ressaltar que, para esta configuração, não existem nós de superfícies sólidas. Ou seja, não existe influência de interação fluido-sólido, apenas as interações fluido-fluido modeladas pelo modelo empregado.

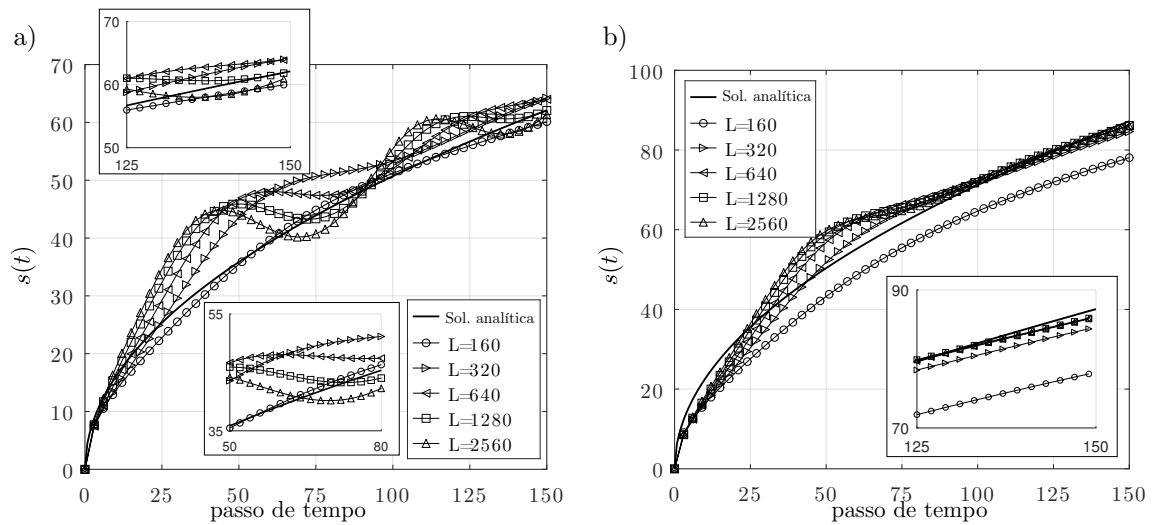
### 5.2.2 Ebulição unidimensional

Dois conjuntos de parâmetros foram testados: para o primeiro conjunto, os parâmetros utilizados são os mesmos para o problema de vaporização da gota, na Seção 5.2.1, exceto as condutividades térmicas, que são definidas forma que as difusividades térmicas correspondam a  $\alpha_\ell = \alpha_v = 0.3$ . A temperatura da parede é definida como  $T_w = 0.9T_c$ . Também foi utilizado um segundo conjunto de parâmetros, em que  $c_{v,\ell} = c_{v,v} = 10$ ,  $k_\ell = 15$  e  $k = 1$ . A escolha é realizada para manter as difusividades das fases relativamente próximas, com  $\alpha_\ell = 0.23$  e  $\alpha_v = 0.26$ , mas diminuindo o efeito do termo de compressão na Eq. (3.49). O número de Jakob é  $Ja = 0.038$  para o primeiro conjunto de parâmetros e  $Ja = 0.076$  para o segundo. Na fronteira esquerda do domínio, é empregado o modelo de ângulo de contato proposto por Benzi et al. (2006), Huang et al. (2009), descrita pela Eq. (3.15). A parede é modelada uma superfície hidrofóbica, atribuindo ao parâmetro de controle do modelo  $\rho_w$  a densidade de vapor  $\rho_v$ . Para estas simulações, os parâmetros de relaxação são fixados em  $\tau_\rho^{-1} = 1.0$ ,  $\tau_e^{-1} = \tau_\zeta^{-1} = 0.8$ ,  $\tau_j^{-1} = 1.0$  e  $\tau_q^{-1} = 1.1$ .

Os resultados da posição da interface no tempo,  $s(t)$ , considerando o primeiro conjunto de parâmetros são mostrados na Fig. 33a para o comprimento do domínio  $L$  variando de 160 a 2560 nós. A solução analítica, Eq. (3.58), também é apresentada. É importante ressaltar que esta solução analítica é usada para efeitos de comparação. Como a equação de energia, Eq. (3.49), incorpora efeitos de compressibilidade, as soluções numéricas obtidas pelo LBM não necessariamente convergem para essa solução. De fato, pode-se observar que, à medida que se aumento o número de nós, surgem oscilações na posição da interface,  $s(t)$ , em torno da solução de referência. Além disso, para este primeiro conjunto de parâmetros, existem alguns intervalos de tempo em que a velocidade da interface  $s'(t)$  é negativa.

A mudança relativa entre as curvas é calculada de maneira semelhante à Eq. (5.10) e seu valor é mostrado na primeira linha da Tab. 11. Pode-se observar que a taxa de convergência para este conjunto de parâmetros é lenta. Além disso, a ordem de convergência varia entre 0.89

Figura 33 – Posição da interface no tempo para problema de ebulição unidimensional para as diferentes malhas com: a) primeiro conjunto de parâmetros b) Segundo conjunto de parâmetros.



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

para as malhas mais grossas e 0.24 para as mais finas, o que indica que estes resultados não apresentam um comportamento de convergência assintótica, que é alcançado quando ordem de convergência é invariante entre as malhas (BORTOLI; ANDREIS; PEREIRA, 2015).

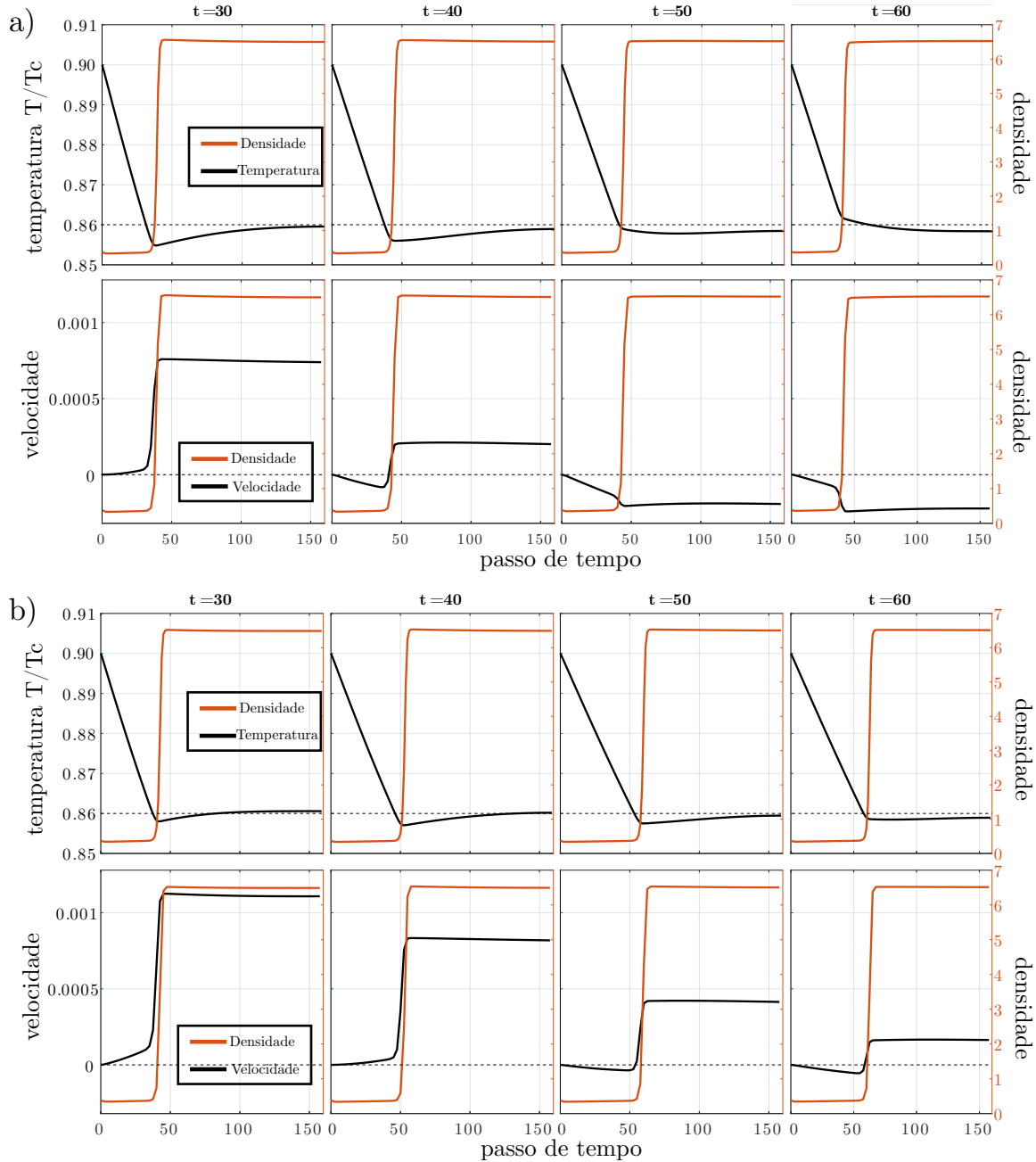
Dentre as hipóteses levantadas para esse comportamento, apurou-se que as oscilações da interface líquido-vapor são influenciadas pela compressibilidade do fluido. As evidências numéricas que suportam esta afirmação foram obtidas nas simulações com o segundo conjunto de parâmetros, para o qual os efeitos do termo de compressão, o último termo na Eq. (3.49), são reduzidos. A mudança relativa entre as curvas ao refinar a malha para este segundo conjunto de parâmetros é mostrada na segunda linha da Tab. 11, assim como os resultados correspondentes da posição da interface,  $s(t)$ , são exibidos na Fig. 33b. Neste caso, as oscilações são bem menos evidentes e uma convergência mais rápida é observada, com uma ordem de convergência que varia de 3.28 para as malhas mais grossas a 1.59 para as mais finas. Dessa forma, pode-se notar que as oscilações da posição da interface não são artefatos numéricos, mas uma consequência da física que constitui o modelo de simulação LBM utilizado neste trabalho.

Tabela 11 – Diferença relativa entre as curvas da posição da interface  $s(t)$  entre as malhas de  $L = 320$  à  $L = 2560$  nós.

|   | 320                   | 640                   | 1280                  | 2560                  |
|---|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| $\Delta_1^* s(t)$ (1º conjunto de parâmetros) | $8.86 \times 10^{-2}$ | $4.77 \times 10^{-2}$ | $4.57 \times 10^{-2}$ | $3.89 \times 10^{-2}$ |
| $\Delta_2^* s(t)$ (2º conjunto de parâmetros) | $1.09 \times 10^{-1}$ | $3.31 \times 10^{-2}$ | $1.47 \times 10^{-2}$ | $9.28 \times 10^{-3}$ |

Seguindo um procedimento similar ao de Welch e Wilson (2000), pode-se encontrar que a continuidade dos fluxos de massa e energia, no limite incompressível, implica a seguinte

Figura 34 – Valores de temperatura (preto, fileira superior), velocidade (preto, fileira inferior) e densidade (laranja) em diferentes instantes do tempo para o problema de ebulição unidimensional para diferentes malhas, utilizando: a) primeiro conjunto de parâmetros (Tab. 11), b) segundo conjunto de parâmetros (Tab. 11)



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

equação para a velocidade da interface,  $ds/dt$ :

$$h_{lv}\rho_v \frac{ds}{dt} = -k_v \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=s^-} + h_{lv}\rho_v u|_{x=s^-} + k_l \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=s^+}, \quad (5.11)$$

onde os sobrescritos “+ , -” indicam os limites à direita ou à esquerda, respectivamente, e  $u$  denota a velocidade do fluido (fases líquida ou vapor). Perceba que os dois últimos termos da

Eq. (5.11) são nulos para escoamento incompressíveis. De fato, zerando esses dois termos e integrando a equação resultante, conseguimos recuperar novamente a Eq. (3.58). (WELCH; WILSON, 2000). A Eq. (5.11) pode ser usada para obter algumas informações em nossas simulações LBM onde os efeitos compressíveis não são desprezíveis.

Os perfis de densidade, temperatura e velocidade do fluido, para o primeiro conjunto de parâmetros e uma série de instantes de tempo, são exibidos na Fig. 34a em instantes próximos ao instante em que a primeira oscilação da interface é observada. Diferente do que temos para o limite incompressível, a temperatura da interface oscila no tempo em torno da temperatura de saturação,  $T_{\text{sat}}$ . Observa-se, a partir do último termo na Eq. (3.49), que o processo de vaporização tende a reduzir a temperatura da interface, enquanto o processo de liquefação tem o efeito oposto. Pode-se notar que esta temperatura diferente de  $T_{\text{sat}}$  na interface produz gradientes não nulos tanto dos campos  $T$  e  $\rho$ . Consequentemente, também existem velocidades não nulas devido ao gradiente de pressão. Esses fatos fazem com que as soluções obtidas pela simulação sejam diferentes da solução analítica do problema de Stefan, Eq. (3.58). Por exemplo, em  $t = 50$ , a derivada  $\frac{\partial T}{\partial x}$  no lado direito (região do líquido) da interface é positiva, enquanto a velocidade do fluido no lado esquerdo (região de vapor) é negativa. Considerando a Eq. (5.11) e esses dois fatos, seria esperado que a velocidade da interface diminuísse, em comparação ao esperado pela solução analítica, ou até mesmo invertesse seu movimento, como observado em torno desse instante de tempo. Esta relação entre a oscilação da interface e esses gradientes não nulos, dependendo se  $T|_{x=s(t)}$  é maior ou menor que  $T_{\text{sat}}$ , foi observada ao longo de toda a simulação.

Os perfis de densidade, temperatura e velocidade para os mesmos instantes de tempo, mas utilizando o segundo conjunto de parâmetros, são mostrados na Fig. 34b. Como discutido no último caso, observou-se que  $T|_{x=s(t)}$  é menor do que  $T_{\text{sat}}$  para os primeiros instantes de tempo, mas razoavelmente acima do valor observado no primeiro caso. Dessa forma, os gradientes em  $T$  e  $\rho$  são menores, assim como a velocidade do vapor perto da interface, em termos absolutos. Com isso, a simulação apresenta um comportamento mais semelhante à solução analítica dada pela Eq. (3.58).

## 5.3 Ebulição em piscina

### 5.3.1 Modelos de molhabilidade de superfícies

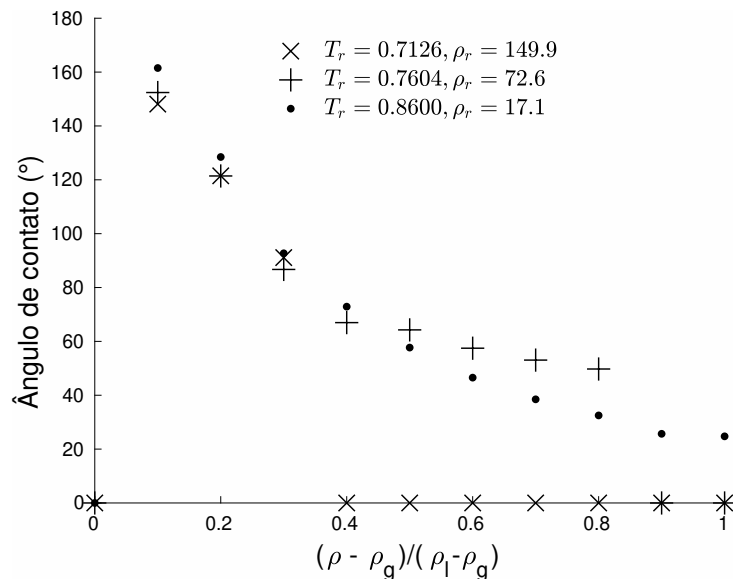
Para a empregar o método de refinamento no problema de ebulição em piscina, é necessário uma etapa anterior de validação dos modelos de interação fluido-sólido para controle do ângulo de contato da superfície. Três modelos notáveis, especificamente, de Benzi et al. (2006), de Li et al. (2014) e de Ding e Spelt (2007), foram selecionados para verificação do comportamento, primeiramente, em um problema de estabilização estático hidrodinâmico (Sec. 3.8.3), e em seguida, no problema de ebulição em piscina.

### 5.3.1.1 Validação dos modelos

Nesta etapa, além das validações dos modelos, buscou-se entender as capacidades dos três modelos de molhabilidade de superfície, propostos por Benzi et al. (2006), Li et al. (2014) e de Ding e Spelt (2007). Para isso, foi verificado o ângulo de contato obtido para três diferentes temperaturas reduzidas,  $T_r = 0.7126$ ,  $T_r = 0.7604$  e  $T_r = 0.86$ , no problema de uma gota sobre uma superfície, como descrito na Seção 3.8.3. Para estas simulações, utilizou-se os parâmetros de relaxação para  $\tau_\rho^{-1} = 1.0$ ,  $\tau_e^{-1} = \tau_\zeta^{-1} = 0.8$ ,  $\tau_j^{-1} = 1.0$  e  $\tau_q^{-1} = 1.0$ , com  $\nu_l = \nu_g = 0.1$ , e malhas de  $200 \times 100$ . A gota é inicializada com raio  $R = 30$ , com o centro da gota no centro do domínio e na posição  $y = 25$ . A simulação é executada até que as variações relativas no campo de densidade sejam menores que  $10^{-6}$  (CZELUSNIAK et al., 2020; KRÜGER et al., 2017).

Na Fig. 35, observamos os resultados obtidos para o modelo de Benzi et al. (2006). É importante ressaltar que o eixo das abscissas está normalizado em termos da densidade de vapor e líquido de cada uma das temperaturas de saturação. Nos resultados, é possível visualizar o aumento do ângulo de contato obtido, ou seja, superfícies cada vez mais hidrofóbicas quando o parâmetro de densidade do método se aproxima do valor da densidades de vapor. Da mesma maneira, temos superfícies cada mais hidrofílicas à medida que a densidade de parede se aproxima da densidade do líquido. Os pontos em que a condição de contorno provocou alguma instabilidade são representados com ângulo de contato igual a 0. Com isso, vemos que quanto menor a temperatura de saturação, e conseqüentemente, maior a razão de densidades, menor é a gama de ângulos de contato possíveis de serem simuladas. Para a temperatura de  $T_r = 0.86$ , é possível observar ângulos entre  $40^\circ$  e  $160^\circ$ , enquanto para  $T_r = 0.7126$ , a faixa fica entre  $90^\circ$  e  $160^\circ$ .

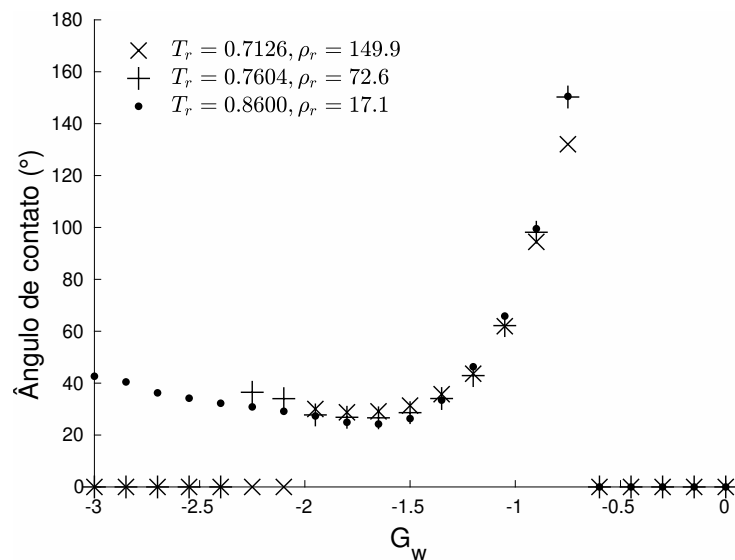
Figura 35 – Ângulos de contato obtidos para o modelo de Benzi et al. (2006) para as temperaturas reduzidas de  $T_r = 0.7126$ ,  $0.7604$ , e  $0.86$ .



Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados para o modelo de Li et al. (2014) são apresentados na Fig. 36. Nesse modelo, temos o parâmetro de controle  $G_w$  para controlar a força de interação fluido-sólido próximos aos nós da parede. Da mesma forma, as simulações que apresentaram instabilidades são representadas com ângulo de contato igual a 0. De maneira geral, vemos que o método é capaz de simular tanto superfícies hidrofóbicas, com ângulos máximos próximos à  $160^\circ$ , quanto superfícies hidrofílicas, com ângulos de contato em torno de  $30^\circ$ . Em termos de ângulos mínimos e máximos alcançados, é possível destacar que o modelo apresenta um melhor resultado. Isto porque o ângulo mínimo, em torno de  $30^\circ$ , é possível de ser simulado com as três temperaturas reduzidas estudadas. O mesmo para o ângulo máximo, que ficou entre  $130^\circ$  e  $150^\circ$  para as três temperaturas reduzidas. Esses resultados condizem com as tendências apresentadas no trabalho de Li et al. (2014). A dificuldade do modelo Benzi et al. (2006) para altas razões de densidade já é conhecido, sendo esse um dos pontos de motivação para a proposta do modelo em discussão.

Figura 36 – Ângulos de contato obtidos para o modelo de Li et al. (2014) para as temperaturas reduzidas de  $T_r = 0.7126$ ,  $0.7604$ , e  $0.86$ .



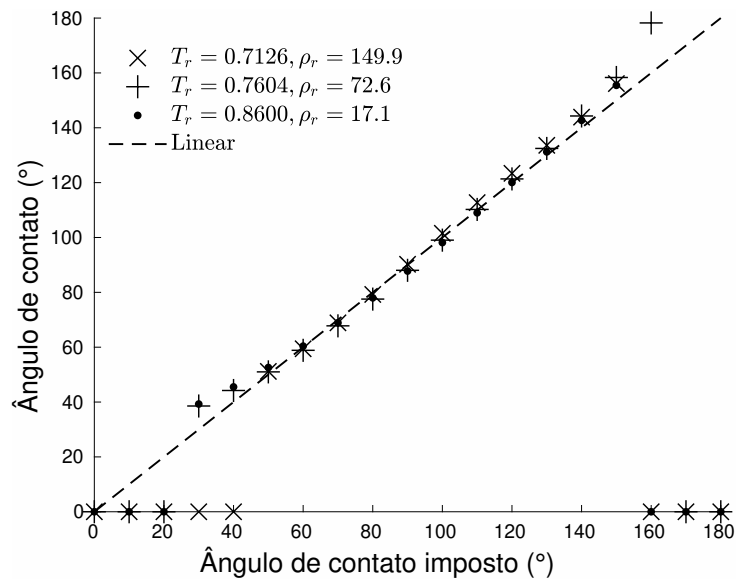
Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados para o modelo geométrico, proposto por Ding e Spelt (2007), são exibidos na Fig. 37. Nesse modelo, o ângulo de contato é imposto diretamente, e por isso, a relação linear mostra a linha de controle ideal. É possível perceber que nos extremos, isto é, nas superfícies mais hidrofílicas ou mais hidrofóbicas, é onde o comportamento obtido mais se distancia do esperado. O controle do ângulo de contato pode ser considerado satisfatório na faixa entre  $50^\circ$  e  $140^\circ$ . Assim como os outros métodos, à medida que se aumenta a razão de densidades, as simulações tendem a ser mais instáveis, e por essa razão, uma menor faixa de ângulo de contato são obtidas.

Na Fig. 38, o contorno do campo de densidades das simulações é exibido para os três modelos estudados, com exemplos de superfícies hidrofóbicas, hidrofílicas, e anfifílica, ou seja,



Figura 37 – Ângulos de contato obtidos para o modelo de Ding e Spelt (2007) para as temperaturas reduzidas de  $T_r = 0.7126$ ,  $0.7604$ , e  $0.86$ .



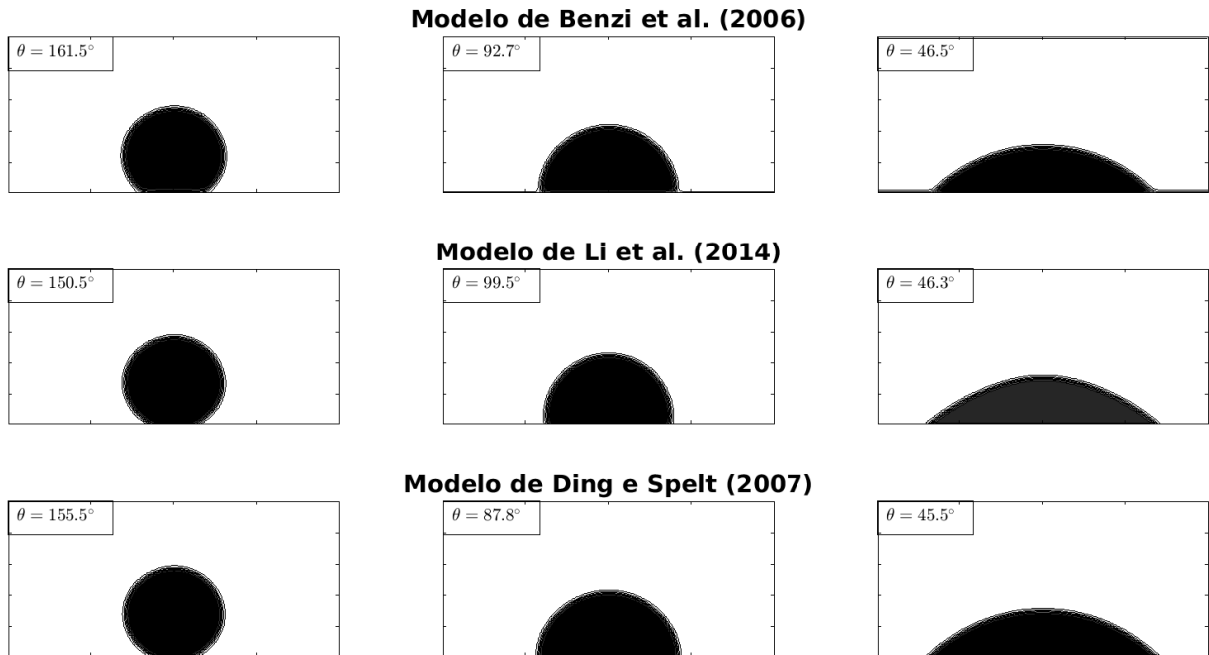
Fonte: Elaborado pelo autor.

que possuem propriedades de molhabilidade intermediárias, para a temperatura reduzida de  $T_r = 0.86$ . No exemplo de superfície do modelo de Benzi et al. (2006), é possível observar finas camadas de líquido na superfície inferior e superior. Isso ocorre pois esse método acaba favorecendo uma mudança de fase não-física, dependendo do valor da densidade virtual utilizada (LI; YU; LUO, 2019). De fato, este fenômeno também foi visualizado em menor escala no modelo de Li et al. (2014) em alguns casos, e o modelo geométrico de Ding e Spelt (2007) não apresentou essas camadas nos casos estudados.

### 5.3.1.2 Refinamento de malhas e modelos de molhabilidade

Nessa etapa, buscou-se entender o que ocorre com o comportamento dos modelos de molhabilidade uma vez que se refina a malha, conforme descrito na Seção 5.1. Para isso, tomamos uma malha inicial de  $160 \times 160$  nós, a qual foi refinada quatro vezes, utilizando malhas de  $240 \times 240$ ,  $360 \times 360$ ,  $540 \times 540$  e  $810 \times 810$  nós, com uma taxa de refinamento de 1.5. A variação relativa dos campos de densidade, após atingir o regime estático, é mostrada na Tab. 12 para os resultados obtidos com o modelo de Benzi et al. (2006). Esses resultados indicam um comportamento convergente desse modelo, sem a necessidade de ajustar seu parâmetro definidor  $\rho_w$ , com uma taxa de convergência de aproximadamente 0.9. Por outro lado, as simulações realizadas para o modelo modificado de Li et al. (2014) mostram que o parâmetro  $G_w$  precisa ser ajustado para manter o ângulo de contato constante ao aplicar o procedimento de refinamento proposto. Isso pode ser observado na Fig. 39, onde a interface líquido/vapor estática é mostrada para três malhas diferentes e  $G_w = -0.8$  (esquerda), e  $\rho_w = 1.7$  (direita). Até onde sabemos, não existe um método analítico ou numérico simples para determinar esse parâmetro para

Figura 38 – Superfícies hidrofílicas (primeira coluna), neutra (segunda coluna) e hidrofóbica (terceira coluna) para temperatura reduzida  $T_r = 0.86$  para os modelos de molhabilidade de Benzi et al. (2006), Li et al. (2014) e Ding e Spelt (2007).



Fonte: Elaborado pelo autor.

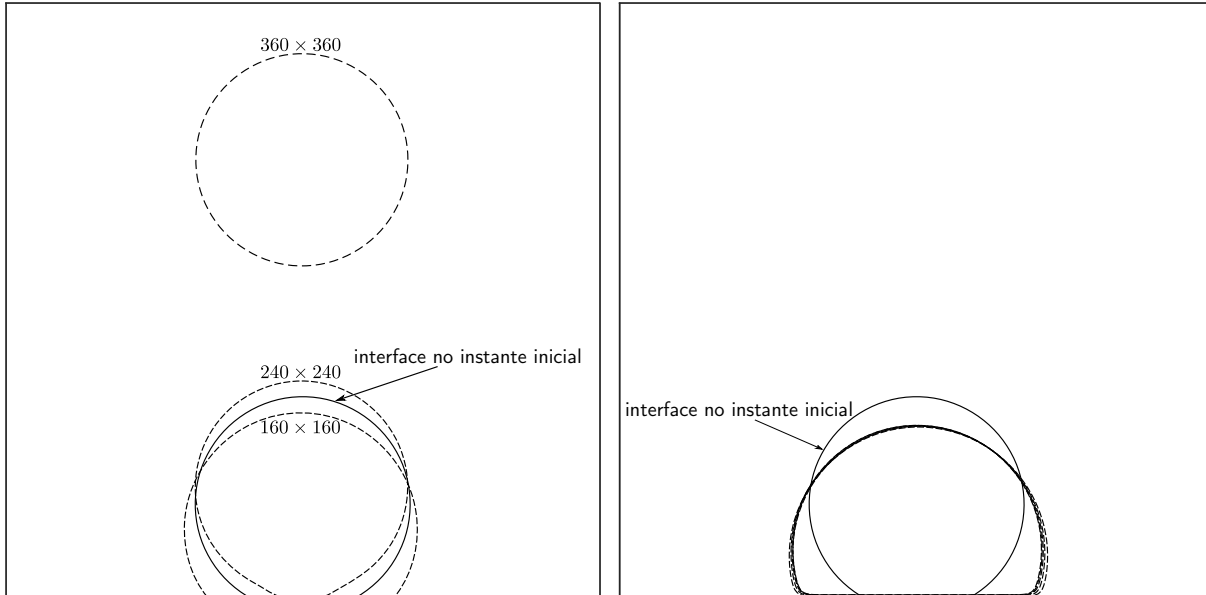
uma determinada malha. Para exemplificar, fixando o ângulo de contato em  $125.9^\circ$ , os valores correspondentes de  $G_w$  foram explorados através de uma busca linear para diferentes malhas. Os valores obtidos estão mostrados na Tab. 13. É possível observar que o comportamento de  $G_w$  em termos da malha é não trivial. No entanto, esse tipo de busca linear é onerosa, pois para determinar cada um desses valores é necessário executar uma série de testes de líquido-sólido. Nesse ponto, também, os primeiros testes de ebulição já haviam sido realizados, e não foi possível observar nucleação com o modelo geométrico de Ding e Spelt (2007). Em princípio, a razão dessa observação é de que os gradientes do campo de densidade acabam sendo menores, de forma que a densidade dos nós na simulação não entrem na região metaestável da curva de coexistência, como ocorre com os outros modelos (LI; YU; WEN, 2020). Por essa razão, os testes de refinamento não foram realizados para esse modelo, já que não seria possível estudar a ebulição com seu uso.

Dados os resultados apresentados, e por simplificação, os estudos do método de refinamento de malha para o problema de ebulição em piscina foram realizados apenas com o modelo de Benzi et al. (2006).

### 5.3.2 Ebulição em piscina

As investigações procederam com valor de temperatura  $T_{\text{sat}} = 0.86T_c$ , valor comumente encontrado na literatura. Com isso, as paredes superior e inferior assumem esse mesmo valor,

Figura 39 – Interfaces líquido-vapor estáticas resultantes para diferentes malhas. À esquerda, resultados obtidos com o modelo de Li et al. (2014) com  $G_w = -0.8$ . À direita, resultados utilizando o modelo de Benzi et al. (2006) com  $\rho_w = 1.7$ .



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

Tabela 12 – Variação relativa dos perfis de densidade para o modelo de ângulo de contato de Benzi et al. (2006).

|                                | 240                   | 360                   | 540                  | 810                  |
|--------------------------------|-----------------------|-----------------------|----------------------|----------------------|
| $\Delta^* \rho (\rho_w = 4.0)$ | $10.4 \times 10^{-2}$ | $8.7 \times 10^{-2}$  | $6.3 \times 10^{-2}$ | $4.4 \times 10^{-2}$ |
| $\Delta^* \rho (\rho_w = 2.3)$ | $12.9 \times 10^{-2}$ | $10.1 \times 10^{-2}$ | $7.1 \times 10^{-2}$ | $4.9 \times 10^{-2}$ |
| $\Delta^* \rho (\rho_w = 1.7)$ | $12.4 \times 10^{-2}$ | $9.1 \times 10^{-2}$  | $6.0 \times 10^{-2}$ | $4.1 \times 10^{-2}$ |

Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

exceto para a região do aquecedor de comprimento  $L_0$ , situado na metade do domínio, onde a temperatura, denotada por  $T_h$ , assume dois possíveis valores  $T_h = 1.0T_c, 1.2T_c$ . Essas condições resultam nos números de Jakob, respectivamente,  $Ja = 0.133$  e  $Ja = 0.153$ . O número de Reynolds para essas simulações é 39.3 para a fase líquida e 2.3 para a fase vapor. Para calcular esses números, é necessário realizar o teste da gota estática para aferição numérica dos valores da tensão superficial.

Tabela 13 – Valores de  $G_w$  utilizados para manter o mesmo ângulo de contato em diferentes malhas.

| $N$   | 160    | 240    | 360    | 540    |
|-------|--------|--------|--------|--------|
| $G_w$ | -0.800 | -0.865 | -0.910 | -0.940 |

Em relação ao ângulo de contato ao longo das superfícies, a parede superior foi definida como hidrofóbica ao impor o valor do parâmetro de densidade virtual igual ao da densidade do vapor saturado,  $\rho_w = \rho_v = 0.38$ . Na superfície inferior, para os nós da parede que não fazem parte do aquecedor, a superfície foi modelada como hidrofílica, utilizando o valor do parâmetro de controle igual ao da densidade do líquido saturado  $\rho_w = \rho_l = 6.50$ . Nos nós de parede pertencentes ao aquecedor, foram testados dois tipos de superfície: uma hidrofóbica, onde  $\rho_{wh} = 0.38$ , e uma superfície com valor de densidade intermediário, com  $\rho_w \equiv \rho_{wh} = 3.44$ . Com isso, ao total, foram simuladas quatro configurações distintas.

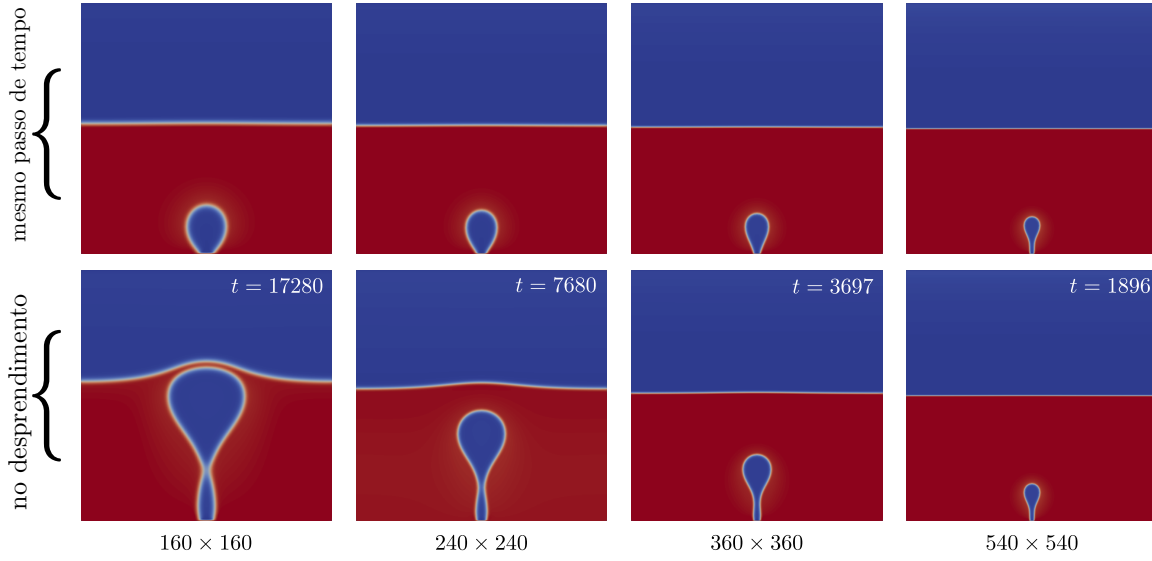
Para os resultados apresentados a seguir, o conjunto menos refinado foi definido como uma malha de  $160 \times 160$  nós, com os parâmetros  $a = 6.12 \times 10^{-3}$ ,  $\sigma = 0.103$ ,  $\kappa = 0$ ,  $c_v = 5$ ,  $g = 2.5 \times 10^{-5}$ ,  $\nu_\ell = \nu_g = 0.1$ ,  $k_\ell = 1.95$  e  $k_v = 0.114$ . Lembrando que alguns desses parâmetros mudam ao refinar a malha de acordo com o procedimento de refinamento proposto e descrito na Seção 5.1.

### 5.3.3 Comparação de comportamento da simulação com e sem procedimento de refinamento

Em um primeiro momento, é interessante mostrar o comportamento da simulação quando se altera o número de nós com e sem ajuste dos parâmetros,  $a$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa$  e  $g$ , conforme descrito. O primeiro caso é mostrado na Fig. 40, para os valores de  $\rho_{wh} = 0.38$  e  $T_h = 1.2T_c$ . Nesta imagem, os campos de densidade são apresentados para quatro malhas diferentes, sendo a da esquerda a mais grosseira e a da direita a mais fina. Na linha superior da figura, o tempo físico é tomado (considerando  $\Delta t \propto \Delta x^2$ ) em um instante de tempo em que a primeira bolha está se desenvolvendo; e na segunda linha de resultados, o tempo físico é definido para o instante imediatamente anterior à partida da bolha em cada simulação. Os valores de tempo mostrados nessa última linha correspondem aos valores de tempo relativos à malha mais grosseira ( $160 \times 160$ ) considerando o regime de refinamento viscoso  $\Delta t \propto \Delta x^2$ . É possível notar que o comportamento físico não é consistente ao refinar a malha, uma vez que a forma, o tamanho e o tempo de partida da bolha não têm relação entre as malhas.

Realizando estas simulações novamente, mas desta vez ajustando os parâmetros conforme descrito na Seção 5.1, os resultados são mais coerentes entre as malhas. Na Fig. 41, para a condição em que o aquecedor é hidrofóbico ( $\rho_{wh} = 0.38$ ) e está à  $T_h = 1.2T_c$ , é possível visualizar o campo de densidade nas diferentes malhas para instantes correspondentes no tempo (todos os valores de tempo são reescalados para a malha mais grosseira). Na linha superior, o campo é exibido quando a primeira bolha está se desenvolvendo e sua fronteira está longe da interface inicial. Na segunda linha, temos os campos em um instante de tempo imediatamente anterior ao desprendimento da primeira bolha. Desses resultados, podemos destacar duas observações: a primeira é que para os perfis de densidade na malha mais grosseira nos tempos  $t = 12800$  (linha superior) e  $t = 23360$  (linha inferior), existe um passo de tempo em cada simulação refinada que é semelhante ao perfil de densidade da malha mais grosseira. A segunda é que existe um *delay* entre as

Figura 40 – Campo de densidades obtidos para o problema de ebulição apenas alterando números de nós da malha, sem ajuste de parâmetros de refinamento.



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

simulações, que diminui à medida que  $\Delta t$  tende a 0. De fato, denotando por  $\delta$  o valor desse *delay* em um passo de tempo arbitrário, para o evento da primeira linha (as bolhas em crescimento), tem-se  $\delta = 12800 - 9280 = 3520$  entre as duas primeiras malhas,  $\delta = 9280 - 7680 = 1600$  entre as configurações  $360 \times 360$  e  $240 \times 240$ , e  $\delta = 7680 - 7360 = 320$  entre o último par de malhas mais finas. Um comportamento semelhante pode ser calculado para o instante em que a primeira bolha está prestes a partir. Neste caso,  $\delta$  assume os valores 4800, 1920 e 960 da malha mais grosseira para a mais fina. Essas observações qualitativas são avaliadas numericamente nas próximas seções.

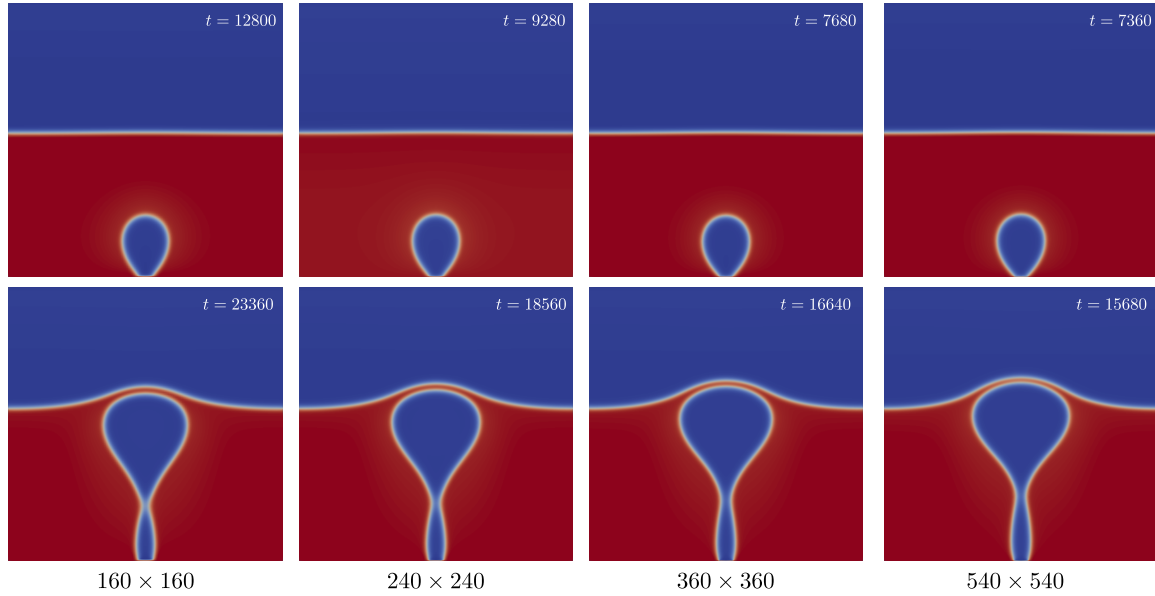
### 5.3.3.1 Diferenças de tempo e espaço entre malhas

Para analisar quantitativamente a convergência dos campos de interesse, utilizamos a seguinte métrica para um campo escalar qualquer  $\Theta = \Theta(\mathbf{x}, t)$  entre duas malhas:

$$d^N \Theta(t) = \frac{\sum_{i \in \mathcal{S}} |\mathcal{I}(\Theta^N)(x_i, t) - \Theta^{N^*}(x_i, t)|}{\sum_{i \in \mathcal{S}} |\Theta^{N^*}(x_i, t)|}, \quad (5.12)$$

para uma malha com  $N$  pontos, em que  $N^*$  representa a primeira malha simulada com mais pontos em relação à malha com  $N \times N$  pontos. Para exemplificar, para a malha com  $N = 160$ , temos  $N^* = 240$ . O símbolo  $\mathcal{S}$  se refere ao conjunto aos nós da malha refinada  $N^* \times N^*$ ,  $\Theta^{N^*}$  denota o campo discreto obtido pela simulação com a malha fina,  $\mathcal{I}(\theta^N)$  diz respeito à função discreta obtida interpolando linearmente o campo discreto  $\theta^N$  na malha fina. Com isso, a diferença global relativa de espaço-tempo é calculada realizando a soma da métrica Eq. (5.12)

Figura 41 – Campo de densidades obtidos para o problema de ebulição, utilizando procedimento de refinamento proposto.



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

nos instantes de tempo:

$$D^N \Theta = \sum_{k \in \mathcal{T}} d^N \Theta(t_k) = \frac{\sum_{i,k \in \mathcal{S}, \mathcal{T}} |\mathcal{I}(\Theta^N)(x_i, t_k) - \Theta^{N*}(x_i, t_k)|}{\sum_{i,k \in \mathcal{S}, \mathcal{T}} |\Theta^{N*}(x_i, t_k)|}, \quad (5.13)$$

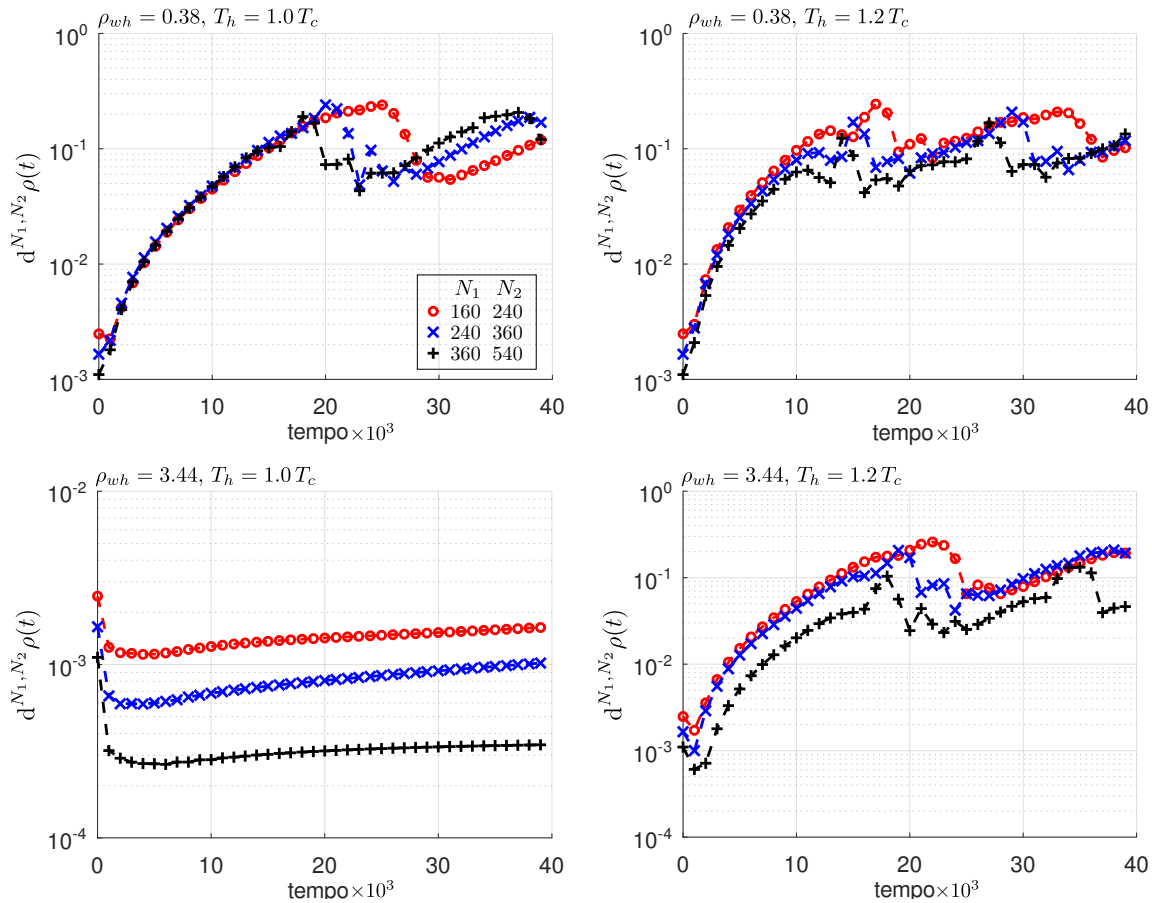
em que o  $\mathcal{T}$  se refere ao conjunto dos passos no tempo simulados na malha refinada.

As simulações são executadas por um número de passos suficientes para que a primeira bolha tenha partido e a segunda bolha tenha sido formada, para três das quatro configurações testadas. Na malha mais grossa, de  $160 \times 160$ , essa condição representa a execução por 40000 passos de tempo. Para o caso com a superfície neutra, com o parâmetro com valor de densidade intermediária  $\rho_{wh} = 3.44$  e temperatura do aquecedor  $T_h = 1.0T_c$ , não ocorreu nucleação de bolhas. As diferenças espaciais relativas para os campos de densidade e temperatura, calculadas de acordo com a Eq. (5.12), são mostradas na Fig. 42 e 43, respectivamente. Como esperado, a diferença relativa espacial aumenta com o tempo, e o refinamento das malhas, seguindo os procedimentos de variação dos parâmetros conforme discutido na Seção 5.1, tem o efeito de reduzir os valores dessas diferenças no tempo. Esse comportamento é ainda mais claro no caso com  $\rho_{wh} = 3.44$  e temperatura do aquecedor  $T_h = 1.0T_c$ , em que não ocorre a nucleação de bolhas.

A ordem geral de convergência é obtida calculando-se o erro global dado pela Eq. (5.13). Os erros globais resultantes para cada configuração e as respectivas ordens de convergência são mostrados na Fig. 44, na coluna esquerda. Vale ressaltar que a ordem de convergência depende dos parâmetros da simulação e do campo considerado. Por exemplo, fixando-se o parâmetro de ângulo de contato  $\rho_{wh} = 3.44$ , observa-se uma taxa de convergência de ordem 1 para o campo de

temperatura, independentemente da temperatura do aquecedor, enquanto que para o mesmo valor de  $\rho_{wh}$ , a taxa de convergência para o campo de densidade é de 1.2 para  $T_h = 1.2T_c$  e 1.8 para a temperatura do aquecedor  $T_h = 1.0T_c$ . O caso com parâmetros  $\rho_{wh} = 0.38$  e  $T_h = 1.0T_c$  é mais complexo. Como pode ser observado, as diferenças relativas entre as malhas para o campo de densidade não apresentaram quase nenhuma mudança para este caso, diminuindo com uma taxa de  $\approx 0.06$ . No entanto, abaixo, mostramos que essa baixa ordem de convergência é devido à dessincronização entre as simulações.

Figura 42 – Diferenças relativas no espaço para cada instante, calculadas de acordo com a Eq. (5.12) para o campo de densidade ao longo de três pares de refinamentos  $(N, N^*) \in (160, 240), (240, 360), (360, 540)$ .  $\rho_{wh}$  e  $T_h$  denotam o parâmetro de ângulo de contato e a temperatura definida nas lattices do aquecedor, respectivamente.

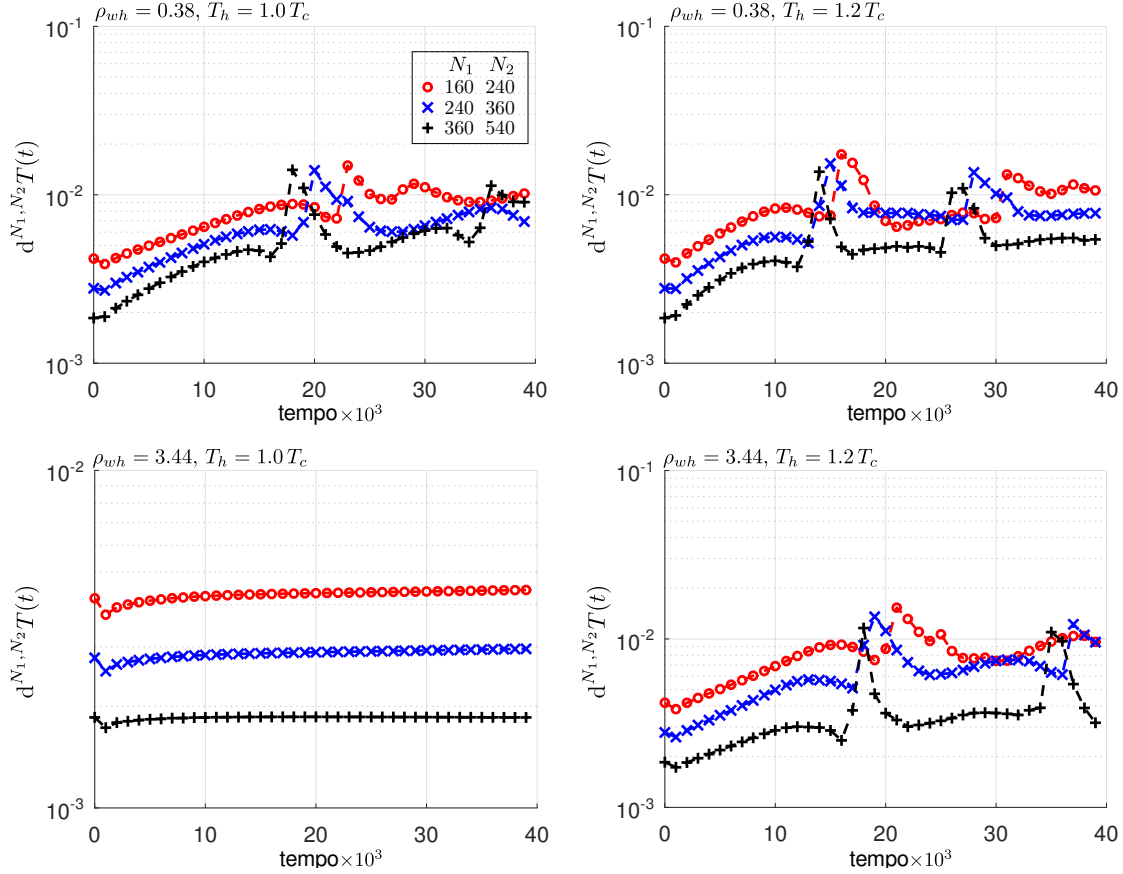


Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

#### 5.3.4 Deslocamento no tempo das simulações

Durante as investigações das simulações entre as malhas, notou-se um comportamento de deslocamento temporal entre os eventos. Isto é, ao realizar a simulação em uma malha mais refinada, esperava-se que a formação da bolha ocorresse no mesmo tempo físico de uma malha mais grosseira. No entanto, esse fato ocorre antes do esperado nas malhas mais refinadas.

Figura 43 – Diferenças relativas no espaço para cada instante de tempo, calculadas de acordo com a Eq. (5.12) para o campo de temperatura ao longo de três pares de refinamentos  $(N, N^*) \in (160, 240), (240, 360), (360, 540)$ .  $\rho_{wh}$  e  $T_h$  denotam o parâmetro de ângulo de contato e a temperatura definida nas lattices do aquecedor, respectivamente.



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

Para investigar esse comportamento, uma abordagem alternativa para avaliar as diferenças relativas entre duas simulações com diferentes malhas consiste em utilizar dois parâmetros de deslocamentos temporais  $\delta$  e  $\delta^*$ . Para isso, são utilizadas duas malhas, e a diferença relativa é calculada da seguinte forma:

$$D^{N;\delta,\delta^*}_{\Theta} = \frac{\sum_{i,k \in \mathcal{S}, \mathcal{T}} |\mathcal{I}(\Theta^N)(x_i, t_k + \frac{\delta}{\Delta t} t_k) - \Theta^{N^*}(x_i, t_k + \frac{\delta^*}{\Delta t} t_k)|}{\sum_{i,k \in \mathcal{S}, \mathcal{T}} |\Theta^{N^*}(x_i, t_k + \frac{\delta^*}{\Delta t} t_k)|}, \quad (5.14)$$

onde  $\delta$  é o deslocamento temporal realizado para sincronizar, em um determinado passo de tempo  $t = t_{\text{ref}}$ , a malha  $N$  com a malha mais fina  $N^*$ , que, nesse estudo, corresponde a  $540 \times 540$  nós. Para uma determinada malha com  $N \times N$ , os valores do parâmetro  $\delta$  são calculados resolvendo um problema de minimização:

$$\delta = \arg \min_{-m \leq \delta \leq m} \sum_{i \in \mathcal{S}} |\mathcal{I}(\Theta^N)(x_i, t_{\text{ref}} + \delta) - \Theta^{N^{**}}(x_i, t_{\text{ref}})|, \quad (5.15)$$

onde  $m$  define o tamanho do intervalo de busca, e  $\Theta^{N^{**}}$  refere-se ao campo  $\Theta$  na malha mais fina simulada. Para as quatro configurações testadas, o tempo de referência foi definido como



$t_{\text{ref}} = 5120$  e o tamanho do intervalo de busca foi definido como  $m = 4800$ , obtendo-se sempre  $|\delta| < m$ . Os valores de  $\delta$  obtidos para cada caso e malha são apresentados na Tab. 14. Observa-se que, como esperado, os valores de  $\delta$  diminuem à medida que a malha é refinada, o que indica uma convergência local no tempo. O caso  $\rho_{wh} = 3.44$  e  $T_h = 1.0T_c$  não apresentou nucleação e para  $t = t_{\text{ref}}$ , o sistema já se encontra em um regime estacionário, por essa razão, os deslocamentos temporais encontrados são nulos.

Tabela 14 – Valores do deslocamento temporal  $\delta$  calculado com  $t_{\text{ref}} = 5120$  entre as malhas pela equação Eq. (5.15) necessário para sincronizar as simulações da malha  $N \times N$  com a malha mais refinada de  $540 \times 540$ .

|           | $\rho_{wh} = 0.38$ |                 | $\rho_{wh} = 3.44$ |                 |
|-----------|--------------------|-----------------|--------------------|-----------------|
|           | $T_h/T_c = 1.0$    | $T_h/T_c = 1.2$ | $T_h/T_c = 1.0$    | $T_h/T_c = 1.2$ |
| $N = 160$ | 6720               | 3840            | 0                  | 4480            |
| $N = 240$ | 2880               | 1600            | 0                  | 1600            |
| $N = 360$ | 960                | 640             | 0                  | 320             |

Os resultados das diferenças relativas globais com estes deslocamentos de tempo estão apresentados no lado direito da Fig. 44. É possível notar que as diferenças globais entre as malhas tendem a reduzir quando calculadas com o deslocamento temporal, sendo a única exceção o caso em que não ocorre nucleação. Em relação ao campo de temperatura, a ordem de convergência foi em torno de 1 para todos os casos testados. Para o campo de densidade, todos os casos em que ocorre nucleação apresentaram uma ordem de convergência em torno da unidade, enquanto que para o caso em que não há nucleação, a ordem de convergência foi aproximadamente 1.8.

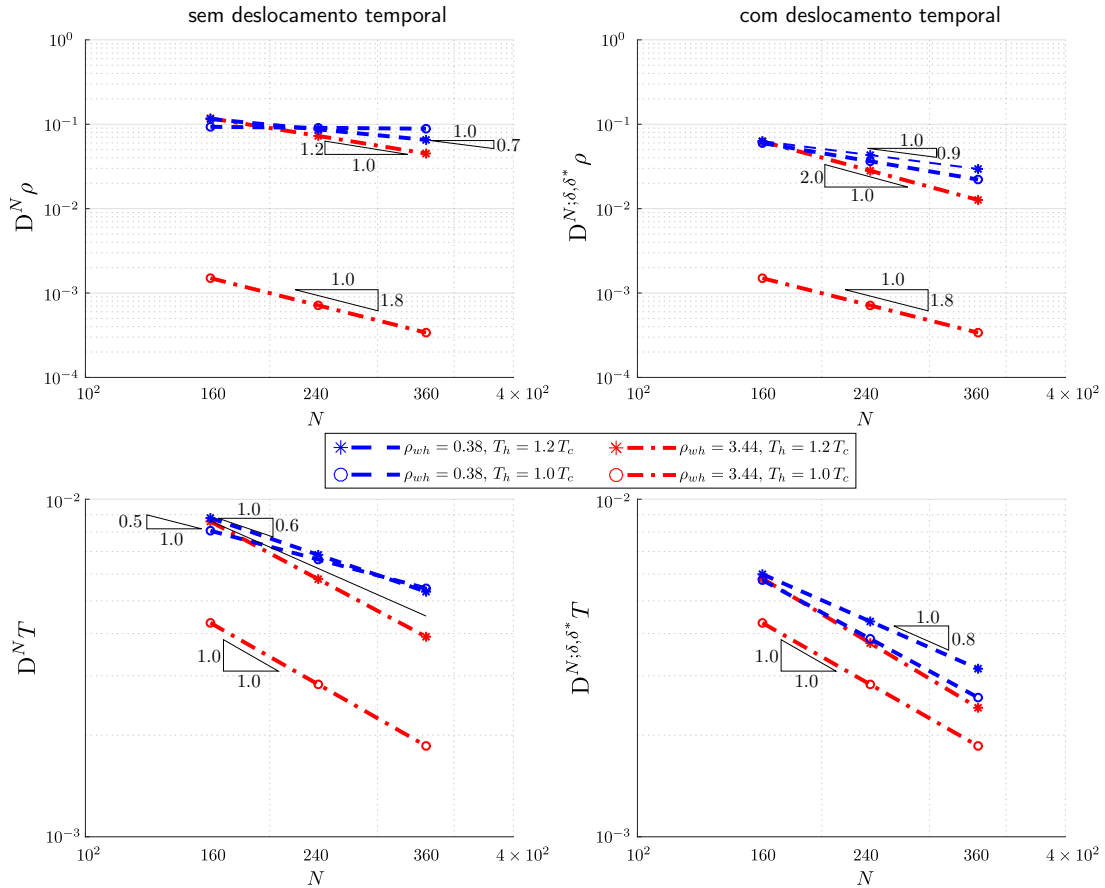
A Fig. 44 apresenta evidências de convergência em tempo e espaço para o problema de ebulição em piscina. Isto porque esses valores resumem as variações ao longo do tempo e espaço na norma  $L^1$ , por isso, quando mostramos que esses valores convergem para zero, isso evidencia uma convergência de quantidades que dependem da evolução temporal do campo de densidade, como por exemplo, a geometria das bolhas em um determinado tempo, tempo de desprendimento e ângulo de contato.

Uma grandeza de interesse que depende tanto do campo de densidades quanto do campo de temperatura é o fluxo de calor médio que entra no domínio computacional, dado por:

$$Q(t) = \frac{1}{L} \int_0^L \left( k \frac{\partial T}{\partial y}(x, y, t) \right)_{y=0} dx . \quad (5.16)$$

Esta grandeza é mostrada na Fig. 45 para temperatura do aquecedor  $T_h = 1.2T_c$  e dois valores do parâmetro do ângulo de contato aplicado aos nós do aquecedor: a) uma superfície hidrofóbica com parâmetro  $\rho_{wh} = 0.38$ , e b) uma superfície neutra com  $\rho_{wh} = 3.44$ , valor de densidade entre líquido e vapor. Para estes casos, alteramos a razão de refinamento da malha para 2.0, e foram simuladas malhas desde  $160 \times 160$  nós até  $2560 \times 2560$  nós, resultando em um conjunto de 5 malhas distintas. Para o caso da superfície neutra, com  $\rho_{wh} = 3.44$ , quando

Figura 44 – Diferenças relativas globais para a ebulição em piscina de acordo com a Eq. (5.13) (lado esquerdo) e com as Eqs. (5.14)-(5.15) (lado direito).



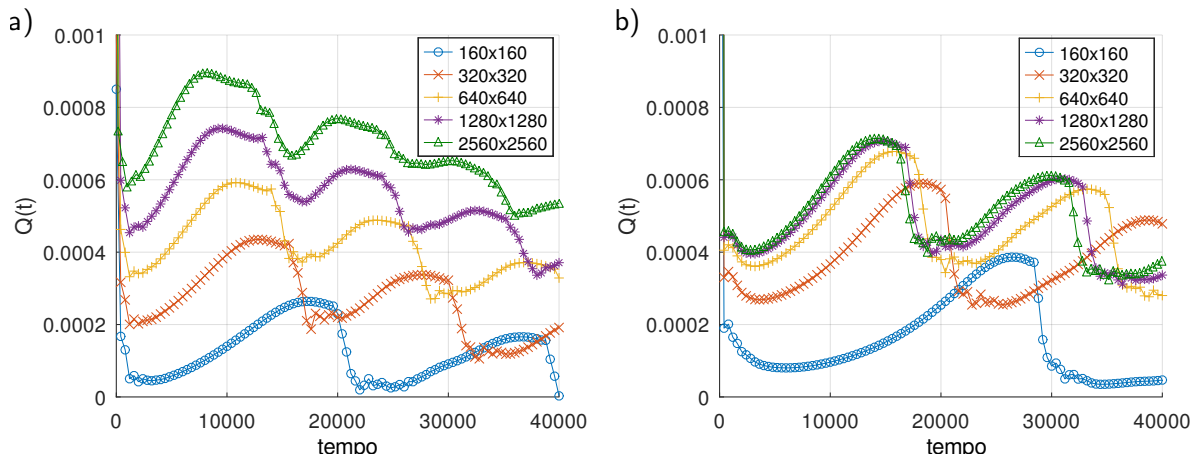
Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

calculada as diferenças relativas das curvas de calor no tempo, foi observada uma ordem de convergência em torno de 1. Já para a superfície hidrofóbica, com  $\rho_{wh} = 0.38$ , a ordem de convergência em torno de 0.5. Estes resultados mostram que esta razão de convergência é muito sensível às configurações do ângulo de contato. Além disso, a partir dessas curvas, pode-se observar o atraso que ocorre entre as simulações e como elas tendem a se sincronizar à medida que se refina a malha computacional. Para a razão de refinamento de 1.5, o mesmo comportamento foi observado para ambos os casos, e optamos por mostrar os resultados mais refinados.

Com o refinamento da malha, também podemos observar que o número de bolhas nucleadas aumenta com o tempo para malhas mais finas, resultando em três partidas de bolhas para a malha mais fina quando o parâmetro do ângulo de contato do aquecedor é  $\rho_{wh} = 0.38$  (Fig. 45a). Neste caso, o número de bolhas nucleadas aumentou de duas para três, enquanto para a superfície hidrofóbica,  $\rho_{wh} = 3.44$ , o número de bolhas nucleadas aumentou de uma para duas (Fig. 45b). Esse fato, que está relacionado ao atraso no tempo para diferentes malhas mencionado, mostra a importância de se alcançar soluções numericamente convergentes para descrever corretamente a dinâmica do processo de ebulição. Além disso, observa-se que o

aumento da frequência de partida das bolhas está associado a um maior fluxo de calor total, o que é um comportamento físico bem conhecido.

Figura 45 – Fluxos de calor calculados para quatro malhas diferentes considerando  $T_h = 1.2$ . a)  $\rho_{wh} = 0.38$  e b)  $\rho_{wh} = 3.44$ .



Fonte: Elaborado pelo autor, adaptado de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

## 6 RESULTADOS: CONVERSÃO UNIDADES FÍSICAS E DE REDE

No Capítulo 5, foi apresentado o método de refinamento necessário para se manter o mesmo problema físico quando se altera o número de nós da malha. Esse procedimento foi utilizando argumentos hidro e termodinâmicos. No entanto, os resultados de refinamento apresentados foram realizados sob a hipótese de que há um conjunto de conversão  $C_\Theta$  para a variável  $\Theta$  nas unidades físicas e unidades em rede, e sob essa hipótese, os campos foram convertidos entre unidades de rede de uma malha mais fina para uma mais grossa, sem necessariamente passar pelas unidades físicas de fato. Neste capítulo, focaremos as discussões nessa etapa.

### 6.1 Conversão entre unidades de rede e físicas

Quando comparado aos modelos monofásicos, a conversão entre unidades de rede e unidades físicas é mais complexa, devido às propriedades dos fluidos com a inserção da equação de estado através da redefinição da variável do pseudopotencial  $\psi$ , e da tensão superficial do fluido (WANG et al., 2022). Na literatura, a prática mais comumente encontrada é utilizar números adimensionais pertinentes. No caso do problema de ebulição em piscina, esses números são o número de Nusselt, número de Prandtl, número de Jakob e o tamanho relativo do aquecedor, dados, respectivamente, por:

$$\text{Nu} = \frac{hL_h}{k}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha}, \quad \text{Ja} = \frac{c_p(T_h - T_s)}{h_{lv}}, \quad L_h^* = \frac{L_h}{l_0}, \quad (6.1)$$

em que  $L_h$  é o tamanho físico do aquecedor. O comprimento característico geralmente é dado em relação ao comprimento capilar:

$$l_c \equiv l_0 = \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_l - \rho_v)}}. \quad (6.2)$$

Com o valor do comprimento característico, a velocidade característica  $u_c = \sqrt{gl_c}$ , e o tempo característico  $t_c = l_c/u_0$  podem ser definidos. Esses valores são, então, utilizados para realizar a adimensionalização de variáveis de tempo e espaço para comparação entre simulações em unidades físicas e em unidades de rede. Note que esses foram os números utilizados para desenvolver a técnica de refinamento, exibida na Seção 5.1. Porém, como também apontado no trabalho de Wang et al. (2022), juntamente com esses adimensionais, também se utiliza o princípio de estados correspondentes, ou seja, os valores de temperatura  $T_r = T/T_c$  e pressões reduzidas  $p_r = p/p_c$ , também devem ser equivalentes nos dois sistemas de unidades. No entanto, os números adimensionais apresentam uma relação apenas com diferenças na temperatura, como no caso do número de Jakob, e os valores de temperatura e pressão críticas, assim como os outros parâmetros da equação de estado, não aparecem nesse conjunto de números. Essa situação pode levar a inconsistências na conversão entre unidades de rede e unidades físicas.

### 6.1.1 Exemplo de inconsistência

Para elucidar sobre o tema, vamos expor aqui uma inconsistência que surge no problema de ebulição em piscina. Tomemos o fluido a ser simulado como água, com temperatura de saturação a  $T_s = 0.86T_c = 556.55\text{K}$ , e que a temperatura do aquecedor seja de 10K acima do valor da temperatura de saturação. Para realizarmos a conversão, utilizaremos as propriedades físicas recuperadas através da equação de Peng-Robinson, com as propriedades  $a_w = 1848.3$  [ $\text{kg}^{-1}\text{m}^5\text{s}^{-2}$ ],  $b_w = 1.05 \times 10^{-3}$  [ $\text{m}^3/\text{kg}$ ],  $R_w = 461.52$  [ $\text{J}/\text{kg}$ ]. Para essa temperatura de saturação, a equação de estado resulta nas densidades de vapor e líquido,  $\rho_v = 34.3$  [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ],  $\rho_l = 587.8$  [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ], e o valor da entalpia de vaporização é obtido  $h_{lv} = 1.5619 \times 10^9$  [ $\text{J}/\text{kg}$ ]. A tensão superficial para a temperatura de saturação referida é dada por 0.01803 [ $\text{N}/\text{m}$ ], obtida pela biblioteca de código aberto *CoolProp* (BELL et al., 2014).

Com os dados físicos, podemos calcular o comprimento capilar:

$$l_c = l_0 = \sqrt{\frac{0.01803}{9.81(587.8 - 34.3)}} = 1.822 \times 10^{-3} \quad [\text{m}]. \quad (6.3)$$

Supondo uma simulação com  $\Delta x = 1 \times 10^{-6}$ , o comprimento capilar em unidades de rede pode ser facilmente encontrado:

$$l_0^* = l_0/\Delta x = 1822.29. \quad [\text{lu}] \quad (6.4)$$

Para prosseguir com a conversão, vamos considerar os parâmetros  $a = 3/49$ ,  $b = 2/21$ ,  $R = 1$ , comumente encontrados na literatura (WANG et al., 2022). Para indicar uma quantidade em unidades de rede, nesta seção, iremos adotar o sobrescrito \*. Nessas condições, é possível encontrar o valor da tensão superficial  $\sigma^* = 8.807 \times 10^{-2}$  através de simulações de gota estática com os valores citados para a equação de estado. Com isso, podemos calcular o valor da gravidade necessário para a simulação:

$$g^* = \frac{\sigma^*}{(l_c^*)^2(\rho_l^* - \rho_v^*)} = \frac{0.08807}{(1822)^2(6.5 - 0.38)} = 4.33 \times 10^{-9}, \quad (6.5)$$

de forma que o tempo característico pode ser calculado:

$$t_c^* = \frac{l_c^*}{\sqrt{g^* l_c^*}} = \frac{1822}{\sqrt{4.33 \times 10^{-9} \times 1822}} = 648471. \quad (6.6)$$

Realizando o mesmo cálculo do tempo característico em unidades físicas, temos o seguinte resultado:

$$t_c = \frac{l_c}{\sqrt{g l_c}} = \frac{1.822 \times 10^{-3}}{\sqrt{9.81 \times 1.822 \times 10^{-3}}} = 1.36 \times 10^{-2} \quad [\text{s}], \quad (6.7)$$

e com isso, o fator de conversão do tempo pode ser encontrado:

$$C_t = t_c/t_c^* = 2.101 \times 10^{-8} \quad [\text{s}/\text{ts}]. \quad (6.8)$$

Seguindo com os cálculos, iremos agora definir o valor necessário a ser utilizado do calor específico  $c_p^*$  na simulação, para manter o mesmo número de Jakob físico. Assim, primeiramente, calculamos seu valor utilizando as propriedades em unidades físicas:

$$\text{Ja} = \frac{c_p(T_h - T_s)}{h_{lv}} = \frac{5.353 \times 10^3 \times 10}{1.5619 \times 10^9} = 3.427 \times 10^{-5}, \quad (6.9)$$

de forma que o calor específico a pressão constante, em unidades de rede, pode ser calculado por:

$$c_p^* = \frac{\text{Ja} h_{lv}^*}{\Delta T T_c^*/T_c} = \frac{3.427 \times 10^{-5} \times 0.5720}{10 \times 0.03646/647.1} = 3.479 \times 10^{-2}. \quad (6.10)$$

No entanto, analisando as unidades físicas do calor específico,  $\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1} = \text{m}^2\text{s}^{-2}\text{K}^{-1}$ , é possível concluir que a conversão entre os sistemas depende do fator de conversão do espaço  $C_l = \Delta x$ , do tempo  $C_t$  e da temperatura  $C_T = T_c/T_c^*$  da seguinte maneira:

$$c_p = c_p^* C_l^2 / (C_t^2 C_T). \quad (6.11)$$

Assim, se realizarmos a conversão para unidades físicas do calor específico em unidades de rede obtido pelo número Jakob, temos o seguinte resultado:

$$c_p^* C_l^2 / (C_t^2 C_T) = 3.479 \times 10^{-2} * (1 \times 10^{-6})^2 ((2.101 \times 10^{-8})^2 \times 647.1/0.03646) = 4.438 \times 10^{-2} \quad [\text{J/kg.K}]. \quad (6.12)$$

Note que o valor encontrado a partir dos adimensionais e convertido novamente em unidades físicas possui uma divergência muito grande com o calor específico dado por  $c_p = 5353 \quad [\text{J/kg.K}]$ . Essa grande diferença foi uma das inconsistências encontradas durante as investigações do método potencial, a qual indicava que esse tipo de conversão não estava completamente correta.

Essa inconsistência ocorre, conforme comentado anteriormente, devido ao uso da equivalência de estados para a parâmetro de conversão da temperatura  $C_T = T_c/T_c^*$ , juntamente a equivalência dos números adimensionais, sem considerar o correto acoplamento entre essas abordagens. Para clarificar, vamos forçar a igualdade do calor específico em unidades de rede através da conversão pela análise dimensional, Eq. (6.11), e pela equivalência do número de Jakob nos sistemas de unidade físicas e de rede, Eq. (6.10):

$$c_p^* = \underbrace{c_p \frac{C_t^2 C_T}{C_l^2}}_{f(\Delta x, \Delta t, T_c^*(a^*, b^*, R^*))} = \underbrace{\frac{\text{Ja} h_{lv}^*}{\Delta T T_c^*/T_c}}_{f(a^*, b^*, R^*)}. \quad (6.13)$$

No termo pela conversão através da unidade dimensional, é possível observar uma dependência com o espaçamento da malha, do tempo e a temperatura crítica, que por sua vez, é definida quando definimos os parâmetros da equação de estado,  $a^*$ ,  $b^*$  e  $R^*$ , no caso de Peng-Robinson. Já no termo calculado através do adimensional, os termos que temos certo controle

são a entalpia de vaporização  $h_{lg}^*$  e a temperatura crítica  $T_c^*$  em unidades de rede, os quais são totalmente definidos com os parâmetros da equação de estado  $a^*$ ,  $b^*$  e  $R^*$ . Perceba que, para que essa igualdade seja válida, é necessário portanto, que tenhamos um acoplamento dos parâmetros da equação de estado com o espaçamento adotado. Em outras palavras, os parâmetros da equação de estado são funções  $a^* = a^*(\Delta x, \Delta t)$ ,  $b^* = b^*(\Delta x, \Delta t)$ ,  $R^* = R^*(\Delta x, \Delta t)$ , de forma que quando os definimos, já temos também um espaçamento de malha definido. Recentemente, Wang et al. (2022) solucionaram essa questão da conversão de forma sistemática. Nas próximas seções, iremos apresentar o método proposto por eles e alguns resultados de desdobramentos em cima dessa proposta.

### 6.1.2 Proposta de conversão de Wang et al. (2022)

A proposta de Wang et al. (2022) afirma que para a maioria dos problemas de transferência de calor e dinâmica de fluidos, temos quatro dimensões fundamentais  $M$ ,  $L$ ,  $T$  e  $\Theta$ , que correspondem às grandezas massa  $m$ , comprimento  $l$ , tempo  $t$  e temperatura  $T$ , respectivamente. Se as relações de conversão entre as unidades de rede e as unidades físicas para todas as grandezas básicas forem conhecidas, as relações de conversão das unidades para todas as grandezas físicas são facilmente encontradas pelas seguintes relações:

$$\begin{aligned} m &= C_m \cdot m^*, & l &= C_l \cdot l^* \\ t &= C_t \cdot t^*, & T &= C_T \cdot T^*. \end{aligned} \quad (6.14)$$

As relações apresentadas na Eq. (6.14) podem ser generalizadas para um campo qualquer  $\Theta$  com dimensões  $[\Theta] = M^{e_1} L^{e_2} T^{e_3} \Theta^{e_4}$  por:

$$\Theta = C_\Theta \cdot \Theta^*, \quad (6.15)$$

em que  $C_\Theta = C_m^{e_1} C_l^{e_2} C_t^{e_3} C_T^{e_4}$ .

O que foi observado por Wang et al. (2022) é que esse conjunto de conversão das quantidades fundamentais pode ser deduzido através da equação de estado não-ideal introduzido no método do pseudopotencial. Tomando a equação de Peng-Robinson como exemplo, os parâmetros físicos  $a$  e  $b$  são totalmente definidos através das propriedades físicas de um determinado fluido, especificamente, da temperatura crítica ( $T_c$ ), pressão crítica ( $p_c$ ) e constante específica do gás ( $R$ ). Enquanto que no caso das simulações, as variáveis  $a^*$ ,  $b^*$  e  $R^*$  são geralmente tratadas como parâmetros livres. Isso indica que, uma vez definido esses parâmetros, existe uma correspondência entre os sistemas de unidades físicas e unidades de rede estabelecida. Da mesma forma, a tensão superficial no sistema de unidades físicas é uma propriedade do fluido, que é conhecida dada uma temperatura de saturação. No modelo pseudopotencial, a tensão superficial, definida a equação de estado e temperatura de saturação, pode ser controlada de maneira independente através de modelos como o de Li e Luo (2013), Lycett-Brown e Luo (2015), Kharmiani, Niazmand e Passandideh-Fard (2019) e Czelusniak et al. (2020). Com isso,

como esses quatro parâmetros,  $a$ ,  $b$ ,  $R$  e  $\sigma$ , possuem quatro dimensões independentes, eles podem ser utilizados para fazer a conversão entre o conjunto de unidades físicas e de rede:

$$\begin{aligned} C_a &= \frac{a}{a^*}, & C_b &= \frac{b}{b^*}, \\ C_R &= \frac{R}{R^*}, & C_\sigma &= \frac{\sigma}{\sigma^*}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

As dimensões dessas variáveis são dadas por:

$$\begin{aligned} [a] &= \text{M}^{-1}\text{L}^5\text{T}^{-2}, & [b] &= \text{M}^{-1}\text{L}^3, \\ [R] &= \text{L}^2\text{T}^{-2}\Theta^{-1}, & [\sigma] &= \text{MT}^{-2}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

de forma que, utilizando as relações de um campo generalizado da Eq. (6.15), pode-se encontrar os seguintes fatores de conversão:

$$\begin{aligned} C_a &= C_m^{-1}C_l^5C_t^{-2}, & C_b &= C_m^{-1}C_l^3, \\ C_R &= C_l^2C_t^{-2}C_T^{-1}, & C_\sigma &= C_mC_t^{-2}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Com as relações Eq. (6.18), os fatores de conversão das unidades fundamentais, apresentados na Eq. (6.14), podem ser escritos em função dos fatores de conversão de  $a, b, R$  e  $\sigma$ :

$$\begin{aligned} C_m &= C_a^{-3}C_b^5C_\sigma^3, & C_l &= C_a^{-1}C_b^2C_\sigma, \\ C_t &= C_a^{-3/2}C_b^{5/2}C_\sigma, & C_T &= C_aC_b^{-1}C_R^{-1}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Com isso, qualquer variável  $\Theta$  pode ser convertida, definida sua dimensão, utilizando a Eq. (6.15). Note que os fatores de conversão mostrados nessa seção, assim como no trabalho original, são baseados na equação de Peng-Robinson. Para outras equações de estado, é possível estabelecer as relações necessárias para definir o conjunto de fatores de conversão utilizando os parâmetros relacionados à pressão, temperatura, densidade crítica e tensão superficial.

## 6.2 Conversão de unidades de Wang et al. (2022) e método de refinamento de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022)

Descrito o método de conversão de unidades do trabalho de Wang et al. (2022), iremos demonstrar como é possível derivar o método de refinamento utilizado no trabalho de Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

O primeiro ponto a ser destacado é de que o método de refinamento foi desenvolvido sob a hipótese de que havia um conjunto de relações, como da Eq. (6.15), necessária para a conversão entre as unidades físicas e de rede. Ou seja, desde que existisse esse conjunto, é possível mostrar como os parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $\sigma$  deveriam ser alterados com o número de nós para que os parâmetros físicos se mantivessem os mesmos entre as malhas. Dessa forma, o mais importante para o método de refinamento é que os escalonamentos das propriedades, como apresentado na Tab. 9,



estejam corretos, e não necessariamente os fatores de conversão em si. Tanto que, por essa razão, foi possível utilizar apenas um conjunto inicial de parâmetros de uma simulação estável para demonstrar como esses parâmetros seriam alterados, em unidades de rede, para manter a unidade física. Assim sendo, apesar do trabalho de Wang et al. (2022) apresentar uma relação diferente entre as unidades físicas e de rede, isso não necessariamente invalida o método de refinamento apresentado no Capítulo 5.

Para corroborar esse ponto, iremos mostrar como os escalonamentos utilizados na Tab. 9, e conseqüentemente, o método de refinamento apresentado respeitam as relações de conversão entre unidade física e de rede do trabalho de Wang et al. (2022). O primeiro passo para isso é utilizar o fator de conversão espacial  $C_l$  da Eq. (6.19). Tomemos uma grandeza física  $L$  e duas malhas, uma mais grosseira e uma mais refinada. A conversão entre unidades físicas e de rede para as duas malhas será dada por:

$$L = C_{l_1} l_1^* = C_{l_2} l_2^*, \quad (6.20)$$

em que os subíndices 1 e 2 se referem, respectivamente, à malha grosseira e refinada. Note que, como a grandeza física é fixa, temos:

$$l_2^*/l_1^* \propto \mathcal{O}(\Delta x^{-1}), \quad C_{l_2}/C_{l_1} \propto \mathcal{O}(\Delta x). \quad (6.21)$$

Utilizando a relação de Eq. (6.19) para  $C_l$  entre as duas malhas, é possível chegar à seguinte razão:

$$\frac{C_{l_2}}{C_{l_1}} = \left( \frac{a_2^*}{a_1^*} \right) \left( \frac{b_2^*}{b_1^*} \right)^{-2} \left( \frac{\sigma_2^*}{\sigma_1^*} \right)^{-1} \quad (6.22)$$

No método de refinamento proposto, descrito na Seção 5.1, os parâmetros  $a$ ,  $b$  e  $\sigma$  foram alterados entre as malhas de forma que  $a \propto \mathcal{O}(\Delta x^2)$ ,  $b \propto \mathcal{O}(1)$  e  $\sigma \propto \mathcal{O}(\Delta x)$ . Empregando essas relações na Eq. (6.22), recuperamos o resultado  $C_{l_2}/C_{l_1} \propto \mathcal{O}(\Delta x)$ . Ou seja, os escalonamentos das propriedades entre as malhas, conforme proposta no trabalho presente, quando testadas no método de conversão de Wang et al. (2022), respeitam o escalonamento necessário para manutenção do comprimento físico, como dado na Eq. (6.20).

Da mesma forma, tomando um tempo físico  $t_0$  qualquer, e seguindo os mesmos procedimentos para o comprimento, pode-se encontrar a seguinte relação para o fator de conversão do tempo entre a malha grossa e malha fina:

$$\frac{C_{t_2}}{C_{t_1}} = \left( \frac{a_2^*}{a_1^*} \right)^{3/2} \left( \frac{b_2^*}{b_1^*} \right)^{-5/2} \left( \frac{\sigma_2^*}{\sigma_1^*} \right)^{-1}. \quad (6.23)$$

Com os escalonamentos  $a \propto \mathcal{O}(\Delta x^2)$ ,  $b \propto \mathcal{O}(1)$  e  $\sigma \propto \mathcal{O}(\Delta x)$ , chega-se à conclusão de que  $C_{t_2}/C_{t_1} \propto \mathcal{O}(\Delta x^2)$ . Perceba que, similar às relações da Eq. (6.21), também temos que  $C_{t_2}/C_{t_1} \propto \mathcal{O}(\Delta t)$ , o que, portanto, implica em que  $\Delta t \propto \Delta x^2$ . Ou seja, verifica-se que os escalonamentos utilizados no procedimento de refinamento de malha, quando analisado sob

a perspectiva do método de conversão de Wang et al. (2022), de fato seguem o regime de escalonamento viscoso, como se havia postulado.

O fator de conversão da densidade é encontrado a partir da combinação entre os fatores fundamentais dados na Eq. (6.19),  $C_\rho = C_m/C_l^3$ . Assim, as duas outras razões restantes entre malha grossa e fina a serem analisadas, seguindo procedimentos análogos aos anteriores, são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{C_{\rho_2}}{C_{\rho_1}} &= \frac{b_2^*}{b_1^*} \\ \frac{C_{T_2}}{C_{T_1}} &= \left(\frac{a_2^*}{a_1^*}\right)^{-1} \left(\frac{b_2^*}{b_1^*}\right) \left(\frac{R_2^*}{R_1^*}\right) \end{aligned} \quad (6.24)$$

Para os escalonamentos  $a \propto \mathcal{O}(\Delta x^2)$ ,  $b \propto \mathcal{O}(1)$ ,  $\sigma \propto \mathcal{O}(\Delta x)$  e  $R \propto \mathcal{O}(1)$ , chega-se à conclusão de que  $C_{\rho_2}/C_{\rho_1} \propto \mathcal{O}(1)$  e  $C_{T_2}/C_{T_1} \propto \mathcal{O}(\Delta x^{-2})$ , o que implica que a relação das temperaturas entre as malhas grossa e fina,  $T_2/T_1 \propto \mathcal{O}(\Delta x^2)$ . Esses escalonamentos também estão de acordo com o que foi utilizado no método de refinamento e exibido na Tab. 9. Com isso, mostra-se a concordância dos escalonamentos das dimensões fundamentais segundo as conversões de unidades físicas e de rede de Wang et al. (2022) e àquelas empregadas no método do refinamento proposto. Em outras palavras, o objetivo do método de refinamento proposto de manter as propriedades físicas entre as malhas é corroborado pela conversão explícita entre unidades físicas e de rede dada por Wang et al. (2022). Apesar disso, o refinamento foi inicialmente concebido com a conversão pelos adimensionais, um método inconsistente como mostrado anteriormente. No entanto, como foram feitas apenas as conversões entre unidades de rede entre as malhas, foi necessário apenas utilizar o escalonamento, que já era obtido diretamente pela relação entre os pontos das malhas grosseiras e finas. Efetivamente, a conversão para unidades físicas já havia sido evitada devido às inconsistências encontradas, e por essa razão, os resultados foram sempre transpostos em unidades de rede para a malha mais grossa.

### 6.3 Métodos de refinamento

Dadas as conversões da Eq. (6.19), em última análise, nota-se que o conjunto de parâmetros físicos  $(a, b, R, \sigma)$  são fixos, uma vez definido o fluido de interesse, e portanto, os fatores de conversão são dependentes dos ajustes dos parâmetros em unidades de rede,  $(a^*, b^*, R^*, \sigma^*)$ . Assim sendo, as conversões propostas por Wang et al. (2022) podem ser utilizadas para derivação de outros métodos de refinamento de malhas possíveis, ou seja, outros escalonamentos de parâmetros que possibilitem a manutenção das mesmas unidades físicas.

Para demonstrar essa possibilidade, tomemos a razão entre os fatores de conversão entre duas malhas,  $C_{l_2}/C_{l_1}$ , mostrado na Eq. (6.22). Como exemplo, se considerarmos os valores de  $a^*$ ,  $b^*$  e  $R^*$  como valores fixos nas unidades de rede, segue-se da relação que a tensão superficial  $\sigma^*$  necessariamente deve escalar com  $\sigma \propto \mathcal{O}(\Delta x^{-1})$ . Dessa mesma forma, é possível derivar outros possíveis escalonamentos. Na Tab. 15, são exibidos seis possíveis formas de se escalar os

parâmetros entre as malhas, assumindo o parâmetro de constante específica do gás fixa. Perceba que o modelo exibido na quinta linha, com  $n = 1$ , descreve o método de refinamento que foi utilizado no Capítulo 5 e publicado em Jaramillo, Mapelli e Cabezas-Gómez (2022).

Alguns pontos interessantes a serem ressaltados sobre os escalonamentos descritos na Tab. 15 dizem respeito à espessura da interface líquido-vapor e razão do escalonamento do tempo e espaço. Em relação à espessura, é conhecido que a interface, em unidades de rede, é proporcional ao inverso da raiz do valor do parâmetro  $a^*$  da equação de estado, ou seja,  $e^* \propto 1/\sqrt{a^*}$  (LYCETT-BROWN; LUO, 2015). Dessa forma, para que a espessura física se mantenha constante, é necessário que o número de nós no interior da interface aumente à medida que se refine a malha. Em termos matemáticos, seria necessário que  $a \propto \mathcal{O}(\Delta x^2)$  para que o número de nós aumente proporcionalmente no refinamento. Dos seis refinamentos apresentados, apenas refinamentos 5, com  $n = 1$ , e 6, com  $n = 2$ , respeitam esse critério. De tal forma, embora os escalonamentos apresentados mantenham as propriedades de tamanho físico do domínio constante, a espessura de interface não é mantida para todos os refinamentos. Isso ocorre justamente porque o fator de conversão do espaço é encontrado através do mapeamento dos parâmetros da equação de estado e tensão superficial apenas. Ou seja, a espessura da interface tem influência direta no mapeamento, e portanto, para problemas em que se é importante manter uma relação  $e/L$  fixa, é necessário utilizar um escalonamento que respeite essa relação.

Da mesma forma, a escala difusiva são pertinentes na influência de erros de compressibilidade, discretização e também na estabilidade numérica (KRÜGER et al., 2017). Para manter essa proporção, apenas os escalonamentos 4, 5 e 6, com, respectivamente,  $n = 3$ ,  $n = 1$  e  $n = 3/11$  respeitam a proporção difusiva entre  $\Delta x$  e  $\Delta t$ .

Tabela 15 – Escalonamentos possíveis do conjunto de parâmetros necessários para conversão entre unidades físicas e de rede, com constante específica do gás fixa, em unidades de rede.

|   | $a^*$                           | $b^*$                              | $R^*$            | $\sigma^*$                   |
|---|---------------------------------|------------------------------------|------------------|------------------------------|
| 1 | $\mathcal{O}(1)$                | $\mathcal{O}(1)$                   | $\mathcal{O}(1)$ | $\mathcal{O}(\Delta x^{-1})$ |
| 2 | $\mathcal{O}(1)$                | $\mathcal{O}(\Delta x^{-1/2})$     | $\mathcal{O}(1)$ | $\mathcal{O}(1)$             |
| 3 | $\mathcal{O}(\Delta x)$         | $\mathcal{O}(1)$                   | $\mathcal{O}(1)$ | $\mathcal{O}(1)$             |
| 4 | $\mathcal{O}(1)$                | $\mathcal{O}(\Delta x^{-(n+1)/2})$ | $\mathcal{O}(1)$ | $\mathcal{O}(\Delta x^n)$    |
| 5 | $\mathcal{O}(\Delta x^{(n+1)})$ | $\mathcal{O}(1)$                   | $\mathcal{O}(1)$ | $\mathcal{O}(\Delta x^n)$    |
| 6 | $\mathcal{O}(\Delta x^n)$       | $\mathcal{O}(\Delta x^{-(n-1)/2})$ | $\mathcal{O}(1)$ | $\mathcal{O}(1)$             |

Fonte: Elaborado pelo autor.

## 6.4 Comprimento característico para conversão de unidades

No trabalho de Wang et al. (2022), a conversão entre unidades físicas e unidades de rede utilizando o comprimento capilar foi demonstrada ser inconsistente. A nova proposta, exibida na Eq. (6.19), é apresentada no mesmo formato como no trabalho de Wang et al. (2022).

Uma outra forma de se interpretar a diferença da proposta de Wang et al. (2022) com a conversão anterior é explicitar o comprimento característico que ela utiliza, e confrontar com o comprimento capilar, que é o comprimento característico utilizado para conversão quando se utiliza adimensionais. Para isso, tomemos novamente o fator de conversão espacial  $C_l$ :

$$C_l = C_a^{-1} C_b^2 C_\sigma. \quad (6.25)$$

Como explicado anteriormente, o fator de conversão espacial é uma combinação dos fatores relacionados aos parâmetros da equação de estado, nesse caso, os parâmetros específicos da equação de Peng-Robinson. Estes, por sua vez, são dados por relações entre os parâmetros físicos e os parâmetros em unidades de rede. Para transformar a Eq. (6.25) em uma relação entre comprimentos explícita, podemos utilizar a definição dos parâmetros da equação de Peng-Robinson:

$$a = 0.45724R^2T_c^2/p_c, \quad b = 0.0778RT_c/p_c. \quad (6.26)$$

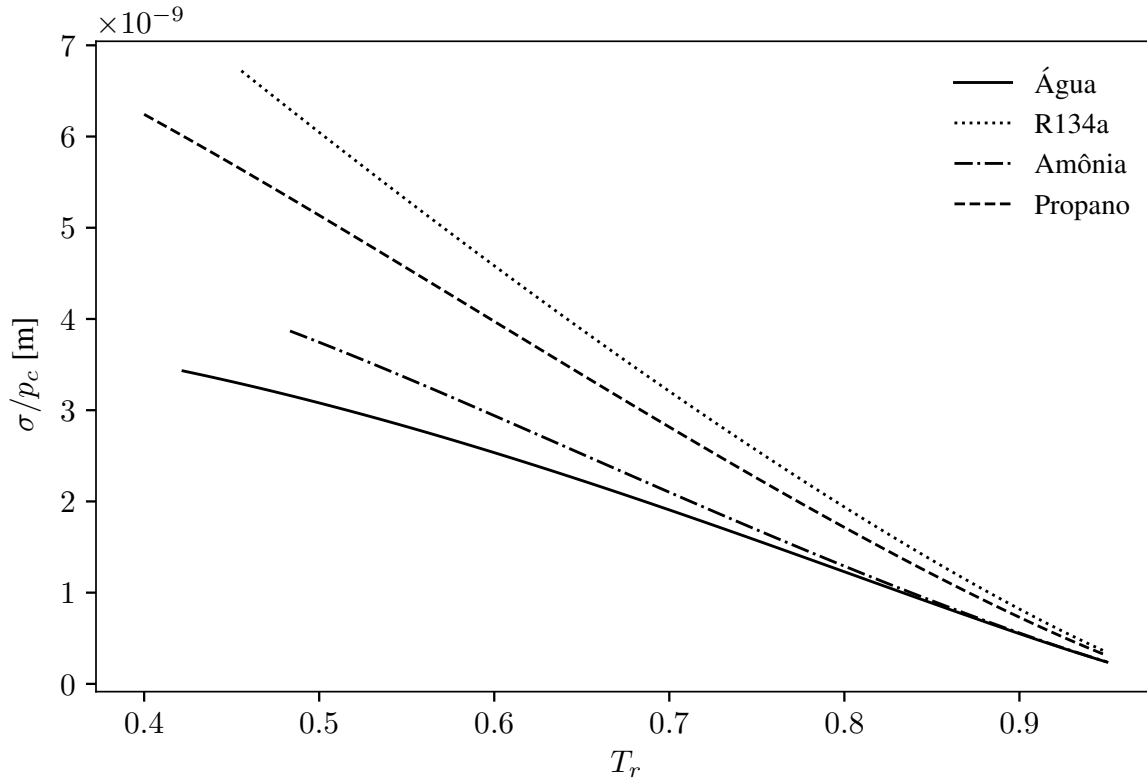
Substituindo as relações da Eq. (6.26) na Eq. (6.25), é possível mostrar que o fator de conversão espacial proposto por Wang et al. (2022) pode ser reescrito como:

$$C_l = \frac{l_c}{l_c^*} = \frac{\sigma/p_c}{\sigma^*/p_c^*}. \quad (6.27)$$

Dessa forma, nota-se o fator de conversão é uma relação de comprimentos característicos, dados pela razão entre a tensão superficial e a pressão crítica, ao contrário da razão dos comprimento capilares nos dois sistemas, como utilizado no método convencional. Os valor desse comprimento característico, em geral, é algumas ordens de grandezas menor que o comprimento capilar para uma mesma substância. Para se ter uma dimensão, para água a 20°C, o comprimento capilar é em torno de 2.73 mm, ao passo que a razão entre tensão superficial e pressão crítica é em torno de  $3.30 \times 10^{-6}$  mm.

Na Fig. 46, é possível visualizar a razão entre a tensão superficial e pressão crítica para diferentes condições de temperaturas reduzidas para um conjunto de fluidos disponíveis na biblioteca *CoolProp*. O fluido R134a, chamado de 1,1,1,2 Tetrafluoroetano pela nomenclatura da União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC), é um fluido muito utilizado em sistemas de refrigeração doméstica e comercial. Seus valores são representativos de outros fluidos refrigerantes disponíveis na biblioteca, como por exemplo, os fluidos R124, R125, R404a. Nessa figura, é possível observar que o comprimento característico para as substâncias possuem valores, no geral, dentro da faixa de  $1 \times 10^{-9}$  m e  $1 \times 10^{-8}$  m. Para se ter uma dimensão desse valor, a espessura média de um fio de cabelo é em torno de  $7 \times 10^{-5}$  m, entre 7000 e 70000 vezes maior que a faixa dos comprimentos exibidos na Fig. 46.

Figura 46 – Comprimento característico, utilizado na conversão de unidades físicas e de rede, em diferentes temperaturas reduzidas para água, fluido R134a, amônia e propano.



Fonte: Elaborado pelo autor.

## 6.5 Limitações do método pseudopotencial

Como exibido anteriormente, o comprimento característico utilizado no mapeamento coerente entre unidades físicas e de rede, dado pela razão entre tensão superficial e pressão crítica, é extremamente pequeno. Por outro lado, os parâmetros comumente empregados para as simulações de Boltzmann, com  $a = 3/49$ ,  $b = 2/21$  e  $R = 1$ , resulta em um valor de pressão crítica de  $p_c = 8.93 \times 10^{-2}$ . Para uma temperatura de  $T_r = 0.83$ , como também utilizado no trabalho de Wang et al. (2022), a tensão superficial medida numericamente é em torno de 0.11. Desas forma, o fator de conversão fica em torno de  $C_l = 7.66 \times 10^{-10}$ . Da mesma forma, o fator de conversão temporal encontrado é de  $C_t = 4.5 \times 10^{-13}$ . Assim sendo, uma simulação bidimensional com tamanho físico de um comprimento capilar,  $l_0 \times l_0$ , seria representada por uma malha de  $2573135 \times 2573135$  nós. Se simularmos até tempo  $t = 0.06s$ , um tempo de um ciclo observado em um dos experimentos realizado por outros alunos do laboratório, considerando a possibilidade de manter uma eficiência computacional de 1 Mlups por núcleo, e assumindo o uso de 3072 núcleos, maior número disponibilizado na fila de jobs especiais de alta escalabilidade do cluster Santos Dumont, o tempo estimado para a simulação é da ordem de 8.84 milhões de anos, um resultado totalmente inviável.

Portanto, fica nítido que é necessário encontrar um fator de conversão mais viável, e

consequentemente, um ajuste dos parâmetros da equação de estado e/ou da tensão superficial. Pela relação exibida na Eq. (6.27), vemos que, dado um fluido, para reduzirmos o valor de  $C_l$ , e portanto  $\Delta x$ , é necessário reduzir o valor da tensão superficial e/ou aumentar o valor da pressão crítica, em unidades de rede. A tensão superficial pode ser melhor controlada utilizando algum método de ajuste independente, sendo um dos mais empregados o método de Li e Luo (2013), método este utilizado no trabalho presente e também na referência principal deste estudo, feita por Wang et al. (2022). Em relação à pressão crítica, é possível explicitar seu valor em função dos parâmetros da equação de estado de Peng-Robinson, utilizando as definições da Eq. (6.26):

$$p_c = 0.013237 \frac{a}{b^2}. \quad (6.28)$$

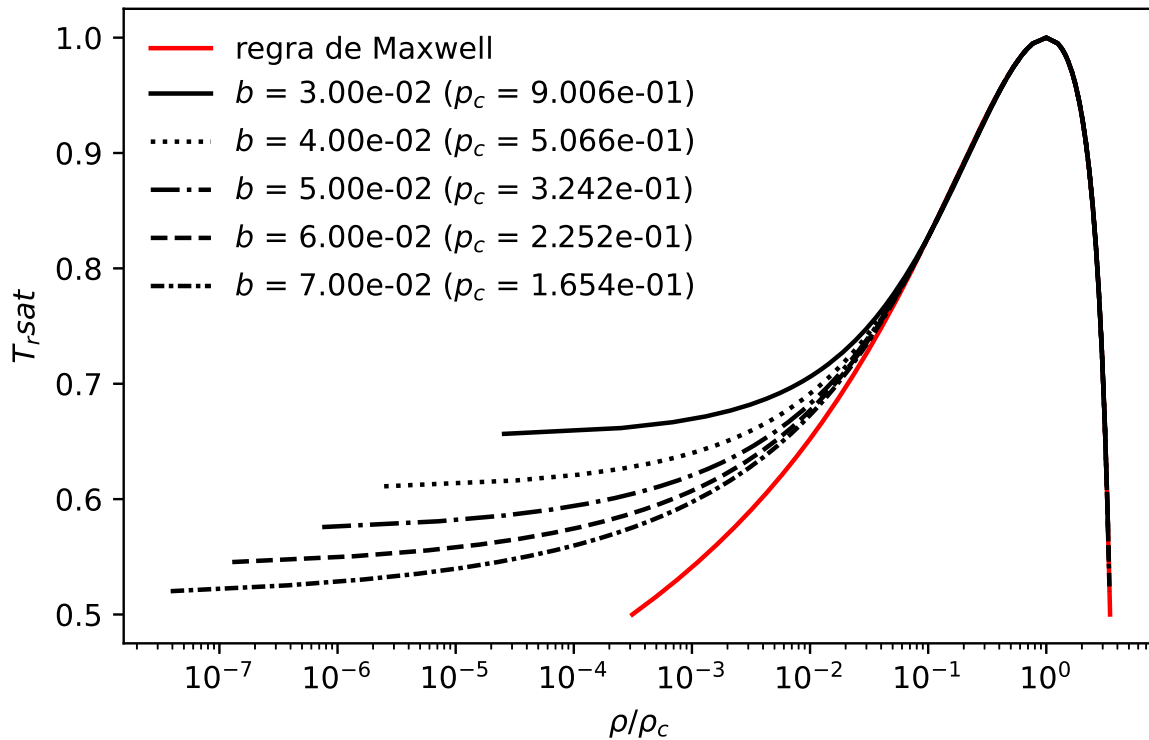
Com base na expressão da Eq. (6.28), nota-se que o aumento do valor da pressão crítica pode ser alcançado incrementando o valor do parâmetro  $a$ , com impacto linear, e reduzindo o valor do parâmetro  $b$ , com impacto quadrático. Com isso, temos diretrizes bem definidas para a variação dos parâmetros da equação de estado e tensão superficial, com objetivo de maximizar o fator de conversão  $C_l$ . Nos próximos passos, serão explorados quais são os limites possíveis de simulações estáveis seguindo essas diretrizes.

### 6.5.1 Parâmetros da equação de estado

Iniciemos a exploração utilizando os parâmetros da equação de estado. Como ponto de partida, foram tomados os valores de referência,  $a^* = 3/49$ ,  $b^* = 2/21$  para uma temperatura reduzida de  $T_r = 0.83$ , baseados no trabalho de Wang et al. (2022). Para identificar a estabilidade da simulação, foram realizadas simulações do problema de interface plana, por 100000 passos de tempo. O primeiro parâmetro explorado foi o valor de  $b^*$ , que foi simulado entre os valores de 0.01 até 0.1 em incrementos de 0.01. O parâmetro de ajusta da curva de coexistência,  $\zeta$ , também foi alterado conforme as variações dos parâmetros da equação de estado para manter a razão de densidades.

Na Fig. 47, as curvas de coexistência teóricas do método pseudopotencial, assim como a curva utilizando a regra de Maxwell, são exibidas para os valores de  $b$  entre  $3 \times 10^{-2}$  e  $7 \times 10^{-2}$ , mantendo-se o valor de  $a^* = 3/49$ . O valor de  $b$  tem relação inversa com a densidade nas condições críticas de temperatura e pressão, e por essa razão, as curvas são normalizadas por esse valor no eixo das abcissas. Nesses resultados, é interessante observar que para a região em torno da temperatura reduzida  $T_r = 0.83$ , as curvas teóricas condizem bem com a curva prevista pela regra de Maxwell. No entanto, especialmente na região de vapor, há grandes divergências entre a curva teórica do método e a regra de Maxwell para temperaturas reduzidas  $T_r < 0.7$ . Em relação às simulações de interface plana, o valor  $b = 3 \times 10^{-2}$  foi o menor valor estável observado. Nesse caso, as densidades de vapor e líquido foram inicializadas com, respectivamente,  $\rho_v = 0.87$  e  $\rho_l = 21.82$ , e após a simulação, estabilizaram em  $\rho_v = 0.89$  e  $\rho_l = 21.82$ . Em comparação ao valor de referência, que possui uma pressão crítica, em unidades de rede, de  $p_c = 8.93 \times 10^{-2}$ , o valor observado, com  $p_c = 9.006 \times 10^{-1}$ , alcançando um aumento em torno de 10 vezes.

Figura 47 – Comparação das curvas teóricas do método pseudopotencial com equação de estado de Peng-Robinson para valores do parâmetro  $b$  entre 0.03 e 0.08. Em vermelho, a curva esperada para a equação de estado utilizando a regra de Maxwell.

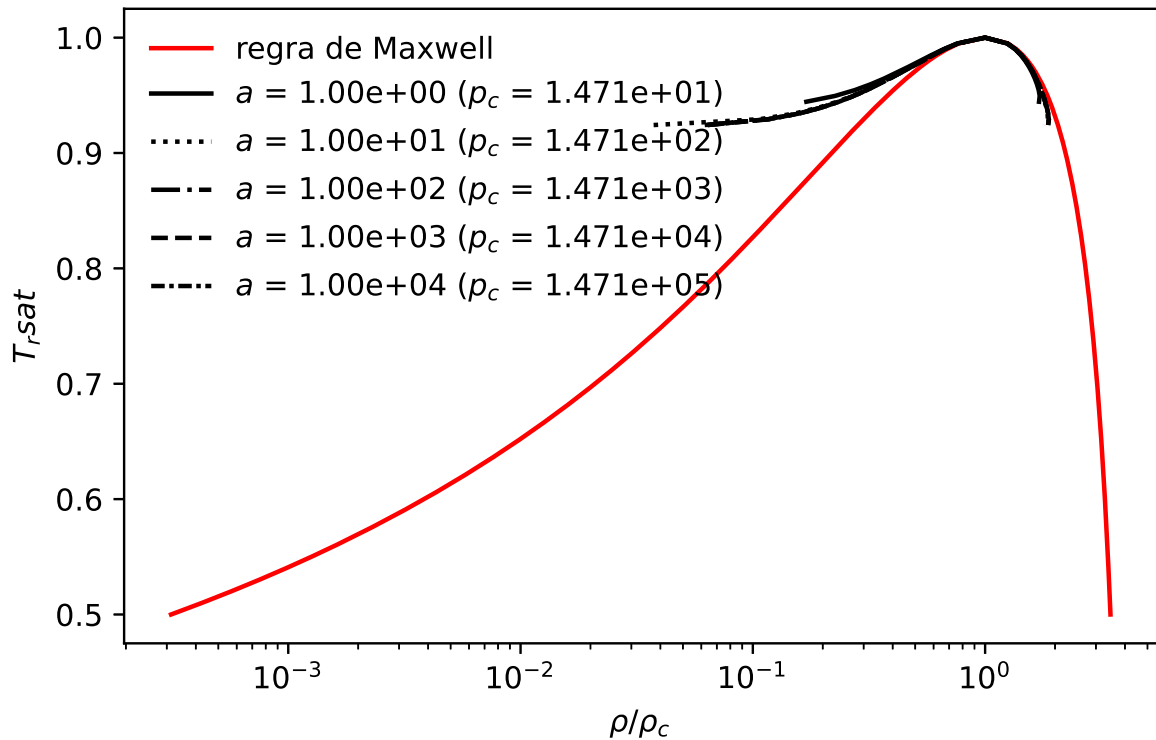


Fonte: Elaborado pelo autor.

Em relação ao parâmetro  $a^*$  da equação de estado de Peng-Robinson, em um primeiro instante, procurou-se verificar o comportamento da curva de coexistência do método para valores que englobassem os parâmetros físicos utilizados para água, de  $a = 1848.1$ . Na Fig. 48, são exibidos as curvas teóricas do método pseudopotencial, aumentando-se exponencialmente o valor do parâmetro  $a^*$  de 1 até  $10^4$ . Aqui, é importante ressaltar que para manter o potencial positivo, é necessário utilizar o parâmetro  $G = 1$ . Pelos resultados, nota-se que a razão de densidades cresce muito mais rapidamente do que o esperado pela regra de Maxwell, especialmente, pelo rápido decréscimo das densidades do vapor. Isso acaba limitando as simulações a temperaturas reduzidas bem próximas à temperatura crítica. De fato, para  $T_r = 0.83$ , a simulação acaba se tornando instável. Esse comportamento, de certa forma, traz uma explicação para o fato da maioria dos trabalhos que utilizam o método do pseudopotencial empregarem valores de parâmetros da equação de estado diferentes daqueles encontrados para fluidos físicos.

Tomando como referência os valores do trabalho de Wang et al. (2022), foi feita uma segunda matriz de testes, já empregando o parâmetro  $b^* = 0.03$  dos resultados anteriores, variando o parâmetro  $a^*$  entre 0.05 e 0.1 nas simulações de interface plana. Na Fig. 49, são apresentadas as curvas de coexistência teóricas do método, entre os valores de 0.05 e 0.08. Da mesma forma que antes, é notório como o método possui dificuldades para replicar os valores das densidades de vapor da regra de Maxwell para temperaturas reduzidas abaixo de 0.75. No

Figura 48 – Comparação das curvas teóricas do método pseudopotencial com equação de estado de Peng-Robinson para valores do parâmetro  $a$  acima de 1. Em vermelho, a curva esperada para a equação de estado utilizando a regra de Maxwell.



Fonte: Elaborado pelo autor.

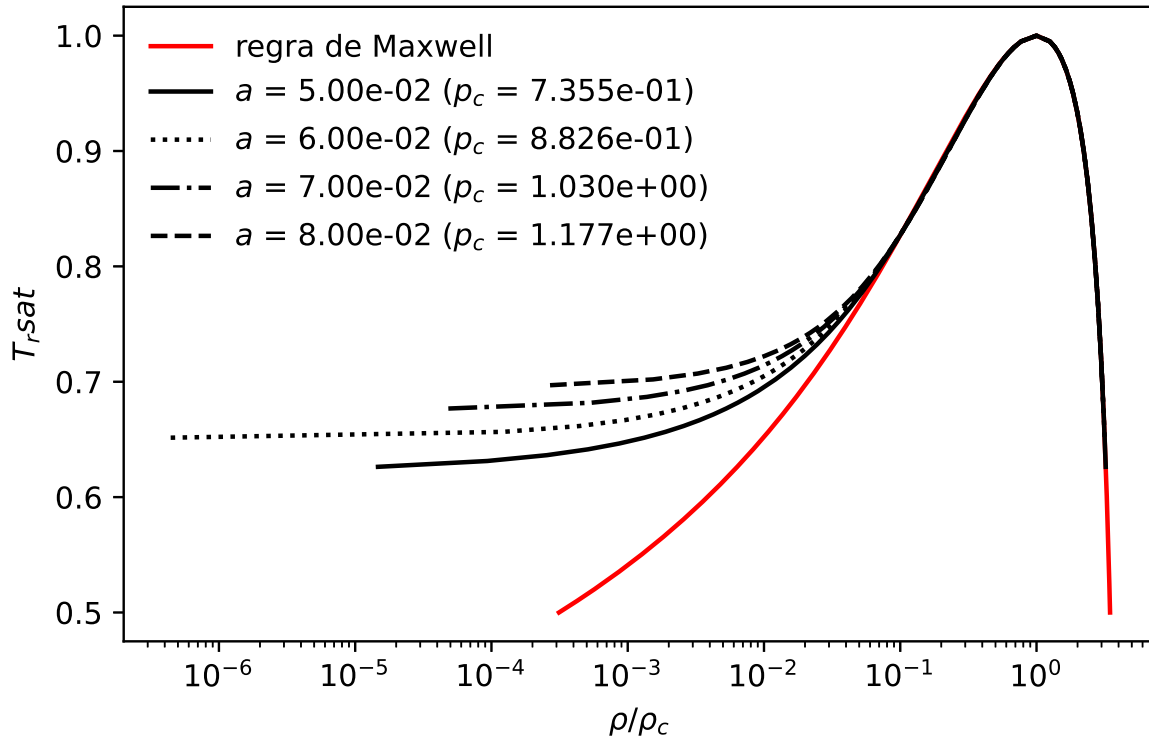
entanto, na temperatura reduzida de interesse  $T_r = 0.83$ , o método empregado ainda apresenta boa concordância com a curva de coexistência obtida pela regra de Maxwell. Nessas condições, o maior valor do parâmetro que resultou em uma simulação estável foi  $a^* = 0.08$ . As densidades de vapor e líquido foram inicializadas com, respectivamente,  $\rho_v = 0.87$  e  $\rho_l = 21.82$ , e após a simulação, estabilizaram em  $\rho_v = 0.92$  e  $\rho_l = 21.82$ . Com esses parâmetros, a pressão crítica observada, em unidades de rede, é de  $p_c = 1.177$ , um valor 13 vezes maior que a pressão crítica  $p_c = 8.93 \times 10^{-2}$ , obtida com os valores dos parâmetros de referência.

### 6.5.2 Redução da tensão superficial

Nessa segunda etapa, foi investigado qual seria a menor tensão superficial possível, a fim de reduzir ainda mais o comprimento característico  $l_c^* = \sigma^*/p_c^*$  em unidades de rede. Para isso, utilizou-se o método proposto por Li e Luo (2013) para controle da tensão superficial, através do parâmetro  $\kappa$ , conforme descrito na Eq. (3.45). Nesse caso, foram realizados testes de uma gota estática imersa em um meio de vapor, utilizando a equação de estado de Peng-Robinson, com os parâmetros  $a = 0.08$ ,  $b = 0.03$ ,  $R = 1$  com a temperatura reduzida de referência  $T_r = 0.83$ . Uma malha de  $200 \times 200$  foi empregada com uma gota localizada no centro da simulação com raio  $R = 40$ , em unidades de rede. A simulação foi configurada com número de passos de tempo limite de 50000, mas em todos os casos acabou interrompida pois a diferença relativa no campo



Figura 49 – Comparação das curvas teóricas do método pseudopotencial com equação de estado de Peng-Robinson para valores do parâmetro  $a$  entre 0.01 e 0.04. Em vermelho, a curva esperada para a equação de estado utilizando a regra de Maxwell.



Fonte: Elaborado pelo autor.

de densidades atingiu o critério menor ou igual a  $10^{-7}$ .

Os resultados obtidos são exibidos na Fig. 29. No eixo das abcissas, a tensão superficial é normalizada com o valor da tensão quando o parâmetro de controle  $\kappa = 0$ , de  $\sigma = 1.05$ . Pelos resultados dos testes, o menor valor encontrado de tensão superficial é  $\sigma = 1.73 \times 10^{-3}$ , o que resulta em uma redução de, aproximadamente, 603 vezes seu valor. É importante ressaltar que para esse caso, o controle da tensão superficial já não condiz com o decaimento linear esperado com  $1 - \kappa$ , sendo o resultado observado 2 vezes menor do que o esperado analiticamente.

A comparação dos comprimentos característicos, em unidades de rede, são exibidos na Tab. 16. Os valores encontrados para os parâmetros da equação de Peng-Robinson reduziram o comprimento característico de 5.86 para  $6.42 \times 10^{-3}$ , um valor aproximadamente 913 vezes menor. Quando refeito os cálculos para uma simulação de um comprimento capilar de água a  $T_r = 0.83$ , os fatores de conversão de espaço e tempo são, respectivamente,  $6.99 \times 10^{-7}$  e  $8.62 \times 10^{-10}$ . Considerando uma malha física de um comprimento capilar,  $l_0 \times l_0$ , seria necessário utilizar  $2819 \times 2819$  nós, e o tempo estimado seria reduzido de 8.84 milhões de anos para 50 horas, considerando a mesma velocidade computacional de 3072 milhões de atualizações de nós por segundo (LUPs).

Dessa forma, é notável o grande impacto que os parâmetros da equação de estado

possuem quando se pretende realizar uma simulação com significado físico real, alterando o tempo estimado de uma escala inviável para um tempo possível de ser simulado. No entanto, ainda é importante destacar alguns pontos. Os parâmetros para maximização de  $\Delta x$  foram encontrados através simulações mais simples, de interface plana e gota estática, de maneira que existe a possibilidade que, quando empregados em uma simulação dinâmica com transferência de calor, possam estar fora do limite de estabilidade de método. Portanto, entende-se que essas estimativas estejam subestimadas quanto ao tempo esperado. Além disso, para efeito de comparação, foram consideradas malhas bidimensionais de apenas um comprimento capilar. Dependendo do regime de nucleação, é interessante que a simulação seja maior que o comprimento de onda mais relevante da instabilidade de Taylor, em torno de 10 comprimentos capilares (WELCH; WILSON, 2000; GONG; CHENG, 2017). Também existem estudos experimentais que relatam que o fluxo de calor crítico de uma superfície é independente do tamanho do aquecedor, desde que esse seja maior que 30 vezes o comprimento capilar (LIENHARD; DHIR; RIHERD, 1973). Por ter efeito quadrático no número de nós e no número de passos no tempo, um aumento de 10 vezes na malha multiplica o tempo final por  $10^4$ , o que aumentaria o tempo estimado de 50 horas para algo próximo 57 anos, no caso bidimensional. Lembrando que isso para um tempo físico de 0.06 segundos, um tempo medido para um ciclo de bolha de um experimento de ebulição com HFE7100.

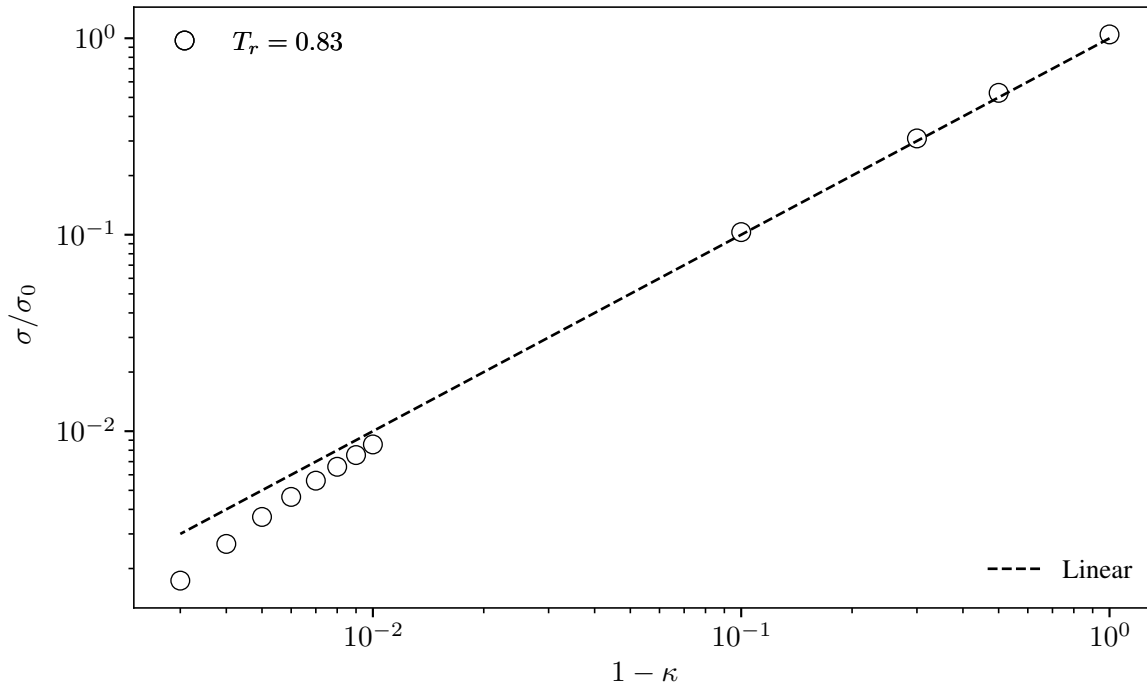
Por fim, ainda é necessário salientar que mesmo realizando a simulação com os parâmetros encontrados nesse estudo exploratório, o resultado encontrado não estaria necessariamente convergido. Ou seja, seria necessário ainda realizar a simulação em diferentes malhas para verificar se o resultado já está convergido. No entanto, vale lembrar que a maximização do fator de conversão é equivalente a maximizar o valor de  $\Delta x$ . Ou seja, os parâmetros encontrados representam os maiores  $\Delta x$  estáveis. Portanto, a verificação de dependência do número de pontos provavelmente será possível apenas com malhas mais finas do que as relatadas anteriormente, e os tempos de cálculo seriam superiores aos relatados.

Tabela 16 – Comparação entre os valores utilizados para equação de estado de Peng-Robinson como referência (WANG et al., 2022) e os encontrados para minimizar o comprimento característico,  $l_c^*$ , em unidades de rede.

|          | Valores de referência (WANG et al., 2022) | Valores minimizados    |
|----------|---|------------------------|
| $a$      | 3/49                                      | 0.08                   |
| $b$      | 2/21                                      | 0.03                   |
| $R$      | 1   | 1                      |
| $\sigma$ | 0.1203                                    | $1.7 \times 10^{-3}$   |
| $C_l$    | $7.66 \times 10^{-10}$                    | $6.99 \times 10^{-7}$  |
| $C_t$    | $4.64 \times 10^{-13}$                    | $8.62 \times 10^{-10}$ |
| $l_c^*$  | 5.86                                      | $6.42 \times 10^{-3}$  |

Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 50 – Resultados do teste de gota estática realizando redução da tensão superficial através do parâmetro  $\kappa$ , proposto método de Li e Luo (2013). A tensão superficial de referência  $\sigma_0 = 1.05$  é o valor observado para equação de estado de Peng-Robinson com parâmetros  $a = 0.08$ ,  $b = 0.03$ ,  $R = 1$ .



Fonte: Elaborado pelo autor.

## 6.6 Considerações finais

Neste capítulo, apresentamos os problemas de conversão entre unidades de rede e unidades físicas que surgem quando utilizamos o método do pseudopotencial impondo uma equação de estado. Muitos trabalhos utilizam o comprimento capilar para fazer a conversão da dimensão espacial, no entanto, o trabalho Wang et al. (2022) demonstra o surgimento de inconsistências quando essa abordagem é empregada junto ao princípio de equivalência de estado. Com isso, Wang et al. (2022) propuseram um mapeamento entre os dois sistemas de unidades, inicialmente, para a equação de Peng-Robinson, mas que também pode ser estendido para outras equações de estado.

Utilizando esse trabalho como base, mostramos que o esquema de refinamento proposto no Capítulo 5, embora desenvolvido utilizando o comprimento capilar como fator de conversão, respeita as relações apresentadas por Wang et al. (2022). Em resumo, o método de refinamento foi proposto dado que existem fatores de conversão entre as unidades físicas e de rede, sem necessariamente explicitá-los. Assim, a ideia era manter o problema físico quando se alterava a malha, o que foi realizado apenas com os escalonamentos obtidos diretamente da relação entre o número de pontos entre as malhas, sem necessariamente realizar a conversão para unidades físicas. Além disso, mostramos que outros métodos de refinamento também seriam possíveis a

partir das relações mostradas no trabalho de Wang et al. (2022).

Por fim, novamente partindo do mapeamento proposto por Wang et al. (2022), mostramos que o fator de conversão dimensional é dado pela razão entre um comprimento característico nas unidades físicas e de rede. Esse, por sua vez, é definido pela razão entre a tensão superficial e pressão crítica do fluido. Mostrou-se que esse valor para diferentes substâncias em diferentes temperaturas situa-se entre  $10^{-8}$  e  $10^{-9}$  m, muito menor que o comprimento capilar, geralmente na ordem de milímetros. Para exemplificar como isso pode ser limitante, tomamos um exemplo de uma simulação bidimensional de água a  $T_r = 0.83$  com valores típicos utilizados na literatura, para uma malha com dimensão física de um comprimento capilar e 0.06 segundos, tempo baseado em um valor experimental entre desprendimentos de duas bolhas. O resultado obtido mostrou-se totalmente inviável, na ordem de milhões de anos. Realizando uma análise explanatória dos parâmetros da equação de estado de Peng-Robinson e da tensão superficial, foi possível encontrar parâmetros que reduziriam a simulação para em torno de 50 horas.

A pesquisa retornou análise e resultados positivos, mas é importante ressaltar que o estudo é apenas um indicativo para possibilidades de pesquisas no método do pseudopotencial. Conforme mencionado, uma malha com apenas um comprimento capilar nas duas dimensões pode ser insuficiente para uma grande parte de estudos de nucleação. Além disso, os parâmetros encontrados são os limites de simulações mais simples, como interface plana e gota estática, e podem não estar dentro desse limite de estabilidade para simulações dinâmicas com nucleação e transferência de calor. O estudo também foi focado na equação de estado de Peng-Robinson. Sendo assim, é notável que, para tornar o método mais próximo de realizar uma simulação com valores de estudos experimentais, é necessário estender os estudos para melhor compreender as instabilidades do método, por exemplo, quando se utiliza os valores físicos de um fluido em uma equação de estado. Além disso, um controle de tensão superficial que seja confiável para alterar os valores em diferentes ordens de grandeza, na ordem de 4 décadas ou mais, também auxiliaria a reduzir os tempos computacionais. Por fim, uma outra possibilidade seria explorar resultados com outras equações de estado, como por exemplo, Carnahan-Starling e Redlich-Kwong.



## 7 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

O trabalho presente pode ser dividido em três grandes etapas. Inicialmente, foram realizados estudos teóricos e numéricos para se avaliar a capacidade do método do pseudopotencial em escoamentos de duas fases de um componente. A primeira investigação consistiu em estudar os diferentes esquemas para incorporar a força intermolecular proposta por Shan e Chen (1993) no método de Boltzmann em rede. Para isso, utilizou-se o problema da interface plana, cuja solução analítica pode ser encontrada a partir das equações macroscópicas levando em conta os erros de terceira ordem devido à força. O estudo apresentado, embora aplicado para cinco diferentes esquemas, (SHAN; CHEN, 1993; HE; SHAN; DOOLEN, 1998; LADD; VERBERG, 2001; GUO; ZHENG; SHI, 2002; KUPERSHTOKH; MEDVEDEV; KARPOV, 2009), também pode ser empregado para outras abordagens, respeitadas as hipóteses do estudo. Dentre as conclusões, notou-se que apenas os esquemas de Kupershtokh, Medvedev e Karpov (2009), de He, Shan e Doolen (1998) e de Guo, Zheng e Shi (2002) apresentam uma curva de saturação independente do fator de relaxação, sendo estes dois últimos idênticos para o problema estático estudado. O esquema de Kupershtokh, Medvedev e Karpov apresenta uma melhor estabilidade, com maior razão de densidade possível de ser simulada, e melhor consistência termodinâmica. No entanto, essas vantagens carregam em si uma maior complexidade nas equações resultantes apresentadas, de forma que a inclusão de parâmetros para melhor controle de tensão superficial e da própria curva se torne uma tarefa mais difícil. Por essa razão, muitos trabalhos na literatura seguem com o esquema de Guo et al. para maiores extensões. Dentre estas, as propostas dos trabalhos de Li, Luo e Li (2013) e Li e Luo (2013) foram testadas para controle da curva de saturação e tensão superficial. De maneira resumida, o parâmetro de controle da curva de saturação apresenta resultados satisfatórios, mas com erros consideráveis para temperaturas reduzidas abaixo de 0.5. Para o controle da tensão superficial, com a equação de estado de Carnahan-Starling, foi possível obter reduções na tensão superficial em até 100 vezes, com variações de até 6.3% na densidade de vapor.

A segunda etapa consistiu em empregar as ferramentas numéricas estudadas na primeira etapa para problemas com transferência de calor. O principal fato que inspirou os estudos foi a observação de diferentes formatos e tempos de desprendimentos de bolhas quando se altera apenas o número de pontos de uma simulação de um aquecedor a alta temperatura constante imerso em um meio líquido. Com isso, um procedimento de refinamento de malha foi proposto para obter resultados de simulação independentes da malha. O procedimento foi baseado na conservação das similaridades hidrodinâmicas e termodinâmicas entre diferentes malhas, ajustando adequadamente os parâmetros de controle da curva de saturação, tensão superficial e da equação de estado. Foi demonstrado que a obtenção de resultados numericamente convergidos de ebulição em piscina depende tanto da escolha do modelo de ângulo de contato

quanto de seus parâmetros de ajuste. Por essa razão, utilizou-se o modelo proposto por Benzi et al. (2006), por apresentar resultados consistentes sem a necessidade de ajuste do parâmetro de ângulo de contato com a malha. Foi observado um atraso temporal na obtenção de resultados de ebulição em piscina convergidos numericamente para diferentes malhas. Isso pode afetar quantidades de interesse em engenharia, como a frequência de desprendimento de bolhas, fluxo de calor médio espacial e as curvas de ebulição. Os resultados dos problemas de ebulição em piscina e Stefan sugerem que a ordem de convergência é afetada pela presença de nucleação e pela compressibilidade do fluido. Isso demonstra que a incorporação de fenômenos físicos mais complexos nas simulações afeta a taxa de convergência. Os resultados obtidos sugerem a importância de realizar o refinamento da malha para avaliar corretamente problemas de ebulição em piscina com o método do pseudopotencial.

Na terceira etapa, dando seguimento ao problema de manter a mesma simulação física entre as malhas, exploramos como fazer a conversão coerente entre as unidades de rede e físicas. Utilizando a proposta de conversão de Wang et al. (2022), foi possível mostrar que o método de refinamento proposto respeita as ordens obtidas pelas relações de conversão. Outros possíveis métodos de refinamento também foram explicitados a partir dessas mesmas relações. Além disso, foi possível mostrar que o fator de conversão, e por consequência o espaçamento das malhas, é equivalente a razão de um comprimento característico entre unidades físicas e de rede. Esse comprimento característico é dado pela razão entre tensão superficial e pressão crítica. Foi mostrado que para vários fluidos de interesse, esse comprimento possui valor entre  $10^{-8}$  e  $10^{-9}$  m. Dessa forma, para que o espaçamento seja razoável, é necessário que o comprimento em unidades de rede seja também muito reduzido. Caso contrário, o espaçamento espacial e temporal da simulação assumem valores extremamente pequenos. Um caso teórico de água a  $T_r = 0.83$ , com mesmos parâmetros do trabalho de Wang et al. (2022), necessitaria na casa de milhões de anos de simulação. Um estudo exploratório foi realizado com objetivo de minimizar o comprimento característico, e conseqüentemente, aumentar simultaneamente o valor dos espaçamentos temporais e espaciais. Dentro do limite estável, foi possível encontrar parâmetros que, em tese, resultaria em um tempo estimado de 50 horas. Apesar do resultado positivo, essas estimativas foram encontradas utilizando o limite da estabilidade em simulações mais simples, de interface plana e gota estática, e podem não se concretizar em uma simulação de ebulição em piscina. Porém, os resultados mostram possíveis limitações que o método do pseudopotencial deve superar para, então, ser melhor empregado como ferramenta quantitativa em simulações de ebulição em piscina.

As conclusões podem ser resumidas nos seguintes pontos:

- Foram estudados diferentes esquemas para modelar a força intermolecular no método dos pseudopotenciais. Para tanto foi introduzido um parâmetro, denominado  $\Gamma$ , que permite avaliar o desempenho de um determinado esquema em relação à consistência termodinâmica do modelo de força e à capacidade de modelar os termos de tensão superficial

corretamente;

- Foi desenvolvido um procedimento de refinamento de malha com o método dos pseudopotenciais para simulação do processo de ebulição nucleada de uma bolha simples. Mostram-se os critérios que devem ser adotados para obter soluções numéricas convergidas no tempo e espacialmente;
- Foi desenvolvido um estudo das mínimas escalas que devem ser consideradas com o método dos pseudopotenciais para obter soluções físicas do processo de ebulição líquido-vapor de uma única bolha. O estudo mostrou que as escalas podem ser bem pequenas impossibilitando em diversos casos a simulação do processo de ebulição devido ao elevado tempo de computação exigido.

## 7.1 Sugestões para trabalhos futuros

Dentre as possibilidades de trabalhos futuros, pode-se destacar alguns estudos que podem complementar o trabalho presente:

- Em relação às simulações de ebulição em piscina com o método do pseudopotencial, o efeito das condições de contorno poderia ser melhor estudado, especialmente quanto ao método de controle do ângulo de contato na superfície. No trabalho presente, para os estudos do método de refinamento, seguiu-se apenas com o modelo de ângulo de contato de Benzi et al. (2006), e observou-se um atraso no tempo em relação ao tempo de desprendimento da bolha, mesmo mantendo o mesmo problema físico. Uma possibilidade seria verificar quais seriam as condições dos outros modelos de ângulo de contato para se manter o mesmo problema, em unidades físicas, e verificar se o mesmo comportamento é observado. Isso poderia ajudar a entender melhor qual seria o modelo mais adequado, e também identificar origens de instabilidades, por exemplo;
- Uma extensão direta também seria replicar o estudo com modelos tridimensionais, como por exemplo, o proposto Fei et al. (2019). O método de refinamento proposto não possui dependência da dimensão da problema, e por isso, pode ser facilmente aplicado. Replicá-lo para o problema da ebulição em piscina pode trazer alguma novidade ou melhor entendimento desse tipo de problema. O mecanismo de desprendimento da bolha, em um problema tridimensional, é mais próximo do que ocorre realmente em problema físico, pois o estrangulamento logo antes do desprendimento possui uma dimensão finita, ao contrário do problema bidimensional. Por isso, esse tipo de estudo teria mais potencial para ser comparado diretamente a algum experimento, por exemplo;
- Em relação à conversão entre unidades físicas e unidades de rede para o método do pseudopotencial, pode-se complementar os estudos apresentados, que foram baseados na proposta de Wang et al. (2022). Alguns aprofundamentos que poderiam ser realizados são



a verificação do comportamento dos espaçamentos temporais e espaciais obtidos quando empregados outras equações de estado, além da equação de Peng-Robinson. Também, os limites encontrados com base em simulações estáticas poderiam ser verificados em simulações dinâmicas, como em uma simulação de ebulição em piscina. Esses dados dariam melhor ideia de quão superestimados os resultados do trabalho presente seriam. Além disso, as instabilidades geradas pelos diferentes tipos de condição de contorno também podem ser estudadas mais a fundo, com objetivo de reduzir e propor novas extensões para o método do pseudopotencial. Como demonstrado, para tornar o método do pseudopotencial mais viável para simulações de fluidos reais, é necessário um robusto controle de tensão superficial e de replicabilidade de diferentes propriedades críticas dos fluidos.

## REFERÊNCIAS

ALEXIADES, V.; SOLOMON, A. D.; LUNARDINI, V. J. **Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes**. [S.l.]: Taylor & Francis Group, 1993.

ALLEN, E. E. Analytical approximation. **Mathematical Tables and other Aids to Computation**, v. 8, n. 48, p. 240–241, 1954.

ASINARI, P.; OHWADA, T.; CHIAVAZZO, E.; Di Rienzo, A. F. Link-wise artificial compressibility method. **Journal of Computational Physics**, 2012. ISSN 10902716.

BAUER, M.; EIBL, S.; GODENSCHWAGER, C.; KOHL, N.; KURON, M.; RETTINGER, C.; SCHORNBAUM, F.; SCHWARZMEIER, C.; THÖNNES, D.; KÖSTLER, H.; RÜDE, U. walberla: A block-structured high-performance framework for multiphysics simulations. **Computers & Mathematics with Applications**, v. 81, p. 478–501, jan. 2021. ISSN 08981221.

BELL, I. H.; WRONSKI, J.; QUOILIN, S.; LEMORT, V. Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library coolprop. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 53, n. 6, p. 2498–2508, 2014.

BENZI, R.; BIFERALE, L.; SBRAGAGLIA, M.; SUCCI, S.; TOSCHI, F. Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: the contact angle. **Physical Review E, APS**, v. 74, n. 2, p. 21509, 2006.

BENZI, R.; SUCCI, S.; VERGASSOLA, M. The lattice Boltzmann equation: theory and applications. **Physics Reports**, Elsevier BV, v. 222, n. 3, p. 145–197, 1992. ISSN 0370-1573.

BERENSON, P. J. Film-Boiling Heat Transfer From a Horizontal Surface. **Journal of Heat Transfer**, v. 83, n. 3, p. 351–356, 08 1961. ISSN 0022-1481.

BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. **Physical Review**, v. 94, n. 3, p. 511–525, 1954.

BOGHOSIAN, B. M.; YEPEZ, J.; COVENEY, P. V.; WAGER, A. Entropic lattice Boltzmann methods. **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 457, n. 2007, p. 717–766, 2001. ISSN 13645021.

\_\_\_\_\_. Entropic lattice boltzmann methods. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, The Royal Society, v. 457, n. 2007, p. 717–766, 2001.

BORTOLI, A. L. D.; ANDREIS, G. S.; PEREIRA, F. N. In: **Modeling and Simulation of Reactive Flows**. [S.l.]: Elsevier, 2015. p. 123–169.

CAI, F.; LIU, Z.; ZHENG, N.; REN, Y.; PANG, Y. Lattice Boltzmann simulation of the effects of cavity structures and heater thermal conductivity on nucleate boiling heat transfer. **Applied Mathematics and Mechanics**, v. 44, n. 6, p. 981–996, Jun 2023. ISSN 1573-2754.

CAIAZZO, A. Analysis of lattice Boltzmann initialization routines. **Journal of Statistical Physics**, v. 121, n. 1-2, p. 37–48, 2005.

CAIAZZO, A.; JUNK, M.; RHEINLÄNDER, M. Comparison of analysis techniques for the lattice Boltzmann method. **Computers and Mathematics with Applications**, 2009. ISSN 08981221.

CAO, H.; ZUO, Q.; AN, Q.; ZHANG, Z.; LIU, H.; ZHANG, D. Lattice Boltzmann method for simulation of solid–liquid conjugate boiling heat transfer surface with mixed wettability structures. **Physics of Fluids**, v. 34, n. 5, p. 053305, 05 2022.

CAREY, V. P. **Liquid-vapor phase-change phenomena**. [S.l.]: Taylor & Francis, 2008.

CARNAHAN, N. F.; STARLING, K. E. Equation of state for nonattracting rigid spheres. **The Journal of Chemical Physics**, 1969. ISSN 00219606.

CASTRO, M. S. d. **Fenômeno de transição espacial do escoamento óleo pesado-água no padrão estratificado**. Tese (Doutorado) — Universidade de Sao Paulo, Agencia USP de Gestao da Informacao Academica (AGUIA). Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.11606/T.18.2013.tde-18092013-164235>>.

CeMEAI. **Configuração do SDumont**. 2023. Disponível em: <<https://euler.cemeai.icmc.usp.br/documentacao/sistema>>. Acesso em: 24 junho 2023.

CENGEL, Y. C. Y. A. **Heat transfer: a practical approach**. 2. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 2002. ISBN 0072826207,9780072826203.

CHAKRABORTY, S.; CHATTERJEE, D. An enthalpy-based hybrid lattice-Boltzmann method for modelling solid–liquid phase transition in the presence of convective transport. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 592, p. 155–175, 2007.

CHANG, X.; HUANG, H.; CHENG, Y.-P.; LU, X.-Y. Lattice Boltzmann study of pool boiling heat transfer enhancement on structured surfaces. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 139, p. 588–599, 2019. ISSN 0017-9310.

CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. **The Mathematical Theory of Non-uniform Gases**. [S.l.]: Cambridge University Press, 1952.

CHEN, J.; AHMAD, S.; DENG, W.; CAI, J.; ZHAO, J. Micro/nanoscale surface on enhancing the microchannel flow boiling performance: A lattice Boltzmann simulation. **Applied Thermal Engineering**, v. 205, p. 118036, 2022. ISSN 1359-4311.

CHENG, P.; ZHANG, C.; GONG, S. Lattice Boltzmann Simulations of Macro/Microscale Effects on Saturated Pool Boiling Curves for Heated Horizontal Surfaces. **Journal of Heat Transfer**, v. 139, n. 11, 2017. ISSN 15288943.

CHIKATAMARLA, S.; KARLIN, I. et al. Entropic lattice boltzmann method for multiphase flows. **Physical review letters**, APS, v. 114, n. 17, p. 174502, 2015.

CZELUSNIAK, L. E.; CABEZAS-GÓMEZ, L.; WAGNER, A. J. Effect of gravity on phase transition for liquid–gas simulations. **Physics of Fluids**, v. 35, n. 4, p. 043324, 04 2023. ISSN 1070-6631.

CZELUSNIAK, L. E.; MAPELLI, V. P.; GUZELLA, M. S.; CABEZAS-GÓMEZ, L.; WAGNER, A. J. Force approach for the pseudopotential lattice Boltzmann method. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 102, n. 3, p. 33307, 2020. ISSN 0031-899X.

CZELUSNIAK, L. E.; MAPELLI, V. P.; WAGNER, A. J.; CABEZAS-GÓMEZ, L. Shaping the equation of state to improve numerical accuracy and stability of the pseudopotential lattice Boltzmann method. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 105, p. 015303, Jan 2022.

DELLAR, P. J. Bulk and shear viscosities in lattice Boltzmann equations. **Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics**, 2001. ISSN 1063651X.

\_\_\_\_\_. Nonhydrodynamic modes and a priori construction of shallow water lattice Boltzmann equations. **Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics**, 2002. ISSN 1063651X.

D'HUMIÈRES, D. Generalized lattice-Boltzmann equation. **Progress in Astronautics and Aeronautics**, v. 159, p. 450–458, 1992.

Digital Science. **Dimensions**. 2021. Disponível em: <<https://app.dimensions.ai/discover/publication>>. Acesso em: 26 fev. 2021.

DING, H.; SPELT, P. D. M. Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 75, p. 046708, Apr 2007.

DONG, L.; GONG, S.; CHENG, P. Direct numerical simulations of film boiling heat transfer by a phase-change lattice Boltzmann method. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 91, p. 109–116, 2018. ISSN 07351933.

DUBOIS, F. Equivalent partial differential equations of a lattice Boltzmann scheme. **Computers and Mathematics with Applications**, Pergamon, v. 55, n. 7, p. 1441–1449, abr. 2008. ISSN 08981221.

FANG, W.-Z.; CHEN, L.; KANG, Q.; TAO, W.-Q. Lattice Boltzmann modeling of pool boiling with large liquid-gas density ratio. **International Journal of Thermal Sciences**, v. 114, p. 172–183, 04 2017.

FEI, L.; DU, J.; LUO, K. H.; SUCCI, S.; LAURICELLA, M.; MONTESSORI, A.; WANG, Q. Modeling realistic multiphase flows using a non-orthogonal multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method. **Physics of Fluids**, v. 31, n. 4, 2019. ISSN 10897666.

FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. **Physical Review Letters**, v. 56, n. 14, p. 1505–1508, 1986.

FRITZ, W. Berechnung des maximalvolumens von dampfblasen. **Physikalische Zeitschrift**, v. 36, p. 379–384, 1935.

GINZBURG, I. Consistent lattice Boltzmann schemes for the Brinkman model of porous flow and infinite Chapman-Enskog expansion. **Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics**, 2008. ISSN 15393755.

GINZBURG, I.; VERHAEGHE, F.; D'HUMIERES, D. Two-relaxation-time lattice Boltzmann scheme: About parametrization, velocity, pressure and mixed boundary conditions. **Communications in computational physics**, v. 3, n. 2, p. 427–478, 2008.

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 BV, v. 55, n. 17-18, p. 4923–4927, 2012. ISSN 0017-9310.

\_\_\_\_\_. Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice Boltzmann model for phase transitions and multiphase flows. **Computers and Fluids**, Elsevier, v. 53, p. 93–104, 2012.

\_\_\_\_\_. Lattice Boltzmann simulation of periodic bubble nucleation, growth and departure from a heated surface in pool boiling. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier Ltd, v. 64, p. 122–132, 2013. ISSN 00179310.

\_\_\_\_\_. 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. ISSN 00179310.

\_\_\_\_\_. Numerical simulation of pool boiling heat transfer on smooth surfaces with mixed wettability by lattice Boltzmann method. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier BV, v. 80, p. 206–216, 2015. ISSN 0017-9310.

\_\_\_\_\_. Two-dimensional mesoscale simulations of saturated pool boiling from rough surfaces. Part II: Bubble interactions above multi-cavities. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 100, p. 938–948, 2016.

\_\_\_\_\_. Direct numerical simulations of pool boiling curves including heater’s thermal responses and the effect of vapor phase’s thermal conductivity. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 87, p. 61–71, 2017.

GONG, S.; CHENG, P.; QUAN, X. Two-dimensional mesoscale simulations of saturated pool boiling from rough surfaces. Part I: Bubble nucleation in a single cavity at low superheats. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 100, p. 927–937, 2016.

GONG, W.; YAN, Y. Y.; CHEN, S.; WRIGHT, E. A modified phase change pseudopotential lattice Boltzmann model. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 125, p. 323–329, 2018. ISSN 00179310.

GRAD, H. On the kinetic theory of rarefied gases. **Communications on Pure and Applied Mathematics**, v. 2, n. 4, p. 331–407, dez. 1949. ISSN 00103640.

GUNSTENSEN, A. K.; ROTHMAN, D. H.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. **Physical Review A**, American Physical Society (APS), v. 43, n. 8, p. 4320–4327, 1991. ISSN 1094-1622.

GUO, S.; FENG, Y.; SAGAUT, P. On the use of conservative formulation of energy equation in hybrid compressible lattice Boltzmann method. **Computers and Fluids**, 2021. ISSN 00457930.

GUO, Z.; ZHENG, C.; SHI, B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method. **Physical Review E**, APS, v. 65, n. 4, p. 46308, 2002. ISSN 1063651X.

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.; LUO, L. S. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. **Journal of Statistical Physics**, 1997. ISSN 00224715.

HE, X.; LUO, L.-s. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. **Physical Review E**, v. 56, n. 6, p. 6811–6817, dez. 1997. ISSN 1063-651X.

HE, X.; SHAN, X.; DOOLEN, G. D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases. **Physical Review E**, APS, v. 57, n. 1, p. R13, 1998.

HECHT, M.; HARTING, J. Implementation of on-site velocity boundary conditions for D3Q19 lattice Boltzmann simulations. **Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, 2010.

HOLDYCH, D. J.; NOBLE, D. R.; GEORGIADIS, J. G.; BUCKIUS, R. O. Truncation error analysis of lattice Boltzmann methods. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 193, n. 2, p. 595–619, 2004.

HSU, Y. Y. On the Size Range of Active Nucleation Cavities on a Heating Surface. **Journal of Heat Transfer**, v. 84, n. 3, p. 207–213, 08 1962.

HUANG, H.; KRAFCZYK, M.; LU, X. Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models. **Physical Review E**, APS, v. 84, n. 4, p. 46710, 2011. ISSN 15393755.

HUANG, H.; LI, Z.; LIU, S.; LU, X.-y. Shan-and-Chen-type multiphase lattice Boltzmann study of viscous coupling effects for two-phase flow in porous media. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, Wiley, v. 61, n. 3, p. 341–354, 2009. ISSN 1097-0363.

HUANG, H.; SUKOP, M.; LU, X. **Multiphase lattice Boltzmann methods: Theory and application**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2015.

HUANG, J.; WU, H.; YONG, W.-A. On Initial Conditions for the Lattice Boltzmann Method. **Communications in Computational Physics**, v. 18, n. 2, p. 450–468, 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. 53304, 2019. ISSN 24700053.

HUANG, R.; WU, H.; ADAMS, N. A. Lattice Boltzmann model with self-tuning equation of state for multiphase flows. **Physical Review E**, APS, v. 99, n. 2, p. 23303, 2019. ISSN 24700053.

INAMURO, T.; YOSHINO, M.; OGINO, F. Accuracy of the lattice Boltzmann method for small Knudsen number with finite Reynolds number. **Physics of Fluids**, 1997. ISSN 10706631.

JANUSZEWSKI, M.; KOSTUR, M. Sailfish: A flexible multi-GPU implementation of the lattice Boltzmann method. **Computer Physics Communications**, Elsevier BV, v. 185, n. 9, p. 2350–2368, 2014. ISSN 0010-4655.

JARAMILLO, A.; Mapelli, V. P.; CABEZAS-GÓMEZ, L. Pseudopotential Lattice Boltzmann Method for boiling heat transfer: A mesh refinement procedure. **Applied Thermal Engineering**, Elsevier Ltd, v. 213, n. May, p. 118705, 2022. ISSN 13594311.

JUNK, M.; KLAR, A.; LUO, L. S. Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation. **Journal of Computational Physics**, 2005. ISSN 10902716.

KANDLIKAR, S. G. A Theoretical Model to Predict Pool Boiling CHF Incorporating Effects of Contact Angle and Orientation . **Journal of Heat Transfer**, v. 123, n. 6, p. 1071–1079, 04 2001. ISSN 0022-1481.

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. ISSN 00224715.

KRAUSE, M. J.; KUMMERLÄNDER, A.; AVIS, S. J.; KUSUMAATMAJA, H.; DAPELO, D.; KLEMENS, F.; GAEDTKE, M.; HAFEN, N.; MINK, A.; TRUNK, R.; MARQUARDT, J. E.; MAIER, M.-L.; HAUSSMANN, M.; SIMONIS, S. Openlb—Open source lattice Boltzmann code. **Computers & Mathematics with Applications**, Elsevier Ltd, v. 81, p. 258–288, jan. 2021. ISSN 08981221.

KREMER, G. M. **Uma Introdução à Equação de Boltzmann**. São Paulo: Edusp, 2005.

KRÜGER, T.; KUSUMAATMAJA, H.; KUZMIN, A.; SHARDT, O.; SILVA, G.; VIGGEN, E. M. **The Lattice Boltzmann Method**. [S.l.]: Springer, 2017.

KRÜGER, T.; KUSUMAATMAJA, H.; KUZMIN, A.; SHARDT, O.; SILVA, G.; VIGGEN, E. M. **The Lattice Boltzmann Method**. Cham: Springer International Publishing, 2017. (Graduate Texts in Physics). ISBN 978-3-319-44647-9.

KUPERSHTOKH, A. L.; MEDVEDEV, D. A.; KARPOV, D. I. On equations of state in a lattice Boltzmann method. **Computers and Mathematics with Applications Mathematics with Applications**, Elsevier, v. 58, n. 5, p. 965–974, 2009. ISSN 08981221.

LADD, A. J. C.; VERBERG, R. Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions. **Journal of Statistical Physics**, v. 104, n. September, p. 1191–1251, 2001.

LALLEMAND, P.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability. **Physical Review E**, APS, v. 61, n. 6, p. 6546, 2000.

ŁANIEWSKI-WOŁŁK; ROKICKI, J. Adjoint Lattice Boltzmann for topology optimization on multi-GPU architecture. **Computers & Mathematics with Applications**, Elsevier Ltd, v. 71, n. 3, p. 833–848, 2016. ISSN 08981221.

LATT, J. **Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations**. 2007. Tese (Doutorado) — University of Geneva, 2007.

LATT, J.; MALASPINAS, O.; KONTAXAKIS, D.; PARMIGIANI, A.; LAGRAVA, D.; BROGI, F.; BELGACEM, M. B.; THORIMBERT, Y.; LECLAIRE, S.; LI, S.; MARSON, F.; LEMUS, J.; KOTSALOS, C.; CONRADIN, R.; COREIXAS, C.; PETKANTCHIN, R.; RAYNAUD, F.; BENY, J.; CHOPARD, B.; AL., E. Palabos: Parallel Lattice Boltzmann Solver. **Computers & Mathematics with Applications**, Elsevier BV, v. 81, p. 334–350, 2021. ISSN 0898-1221.

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**, v. 206, n. 1, p. 16–47, 2005. ISSN 10902716.

LI, Q.; KANG, Q. J.; FRANCOIS, M. M.; HE, Y. L.; LUO, K. H. Lattice Boltzmann modeling of boiling heat transfer: The boiling curve and the effects of wettability. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier BV, v. 85, p. 787–796, 2015. ISSN 0017-9310.

LI, Q.; LUO, K. H. Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of multiphase flows. **Physical Review E**, APS, v. 88, n. 5, p. 53307, 2013. ISSN 15393755.

LI, Q.; LUO, K. H.; HE, Y. L.; GAO, Y. J.; TAO, W. Q. Coupling lattice Boltzmann model for simulation of thermal flows on standard lattices. **Physical Review E**, APS, v. 85, n. 1, p. 16710, 2012.

LI, Q.; LUO, K. H.; KANG, Q. J.; CHEN, Q. Contact angles in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of wetting. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 90, n. 5, p. 1–9, 2014. ISSN 1550-2376.

LI, Q.; LUO, K. H.; LI, X. J. Forcing scheme in pseudopotential lattice Boltzmann model for multiphase flows. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 86, n. 1, p. 16709, 2012. ISSN 1550-2376.

\_\_\_\_\_. Lattice Boltzmann modeling of multiphase flows at large density ratio with an improved pseudopotential model. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 87, n. 5, p. 53301, 2013. ISSN 1550-2376.

LI, Q.; YU, Y.; LUO, K. H. Implementation of contact angles in pseudopotential lattice boltzmann simulations with curved boundaries. **Phys. Rev. E**, American Physical Society, v. 100, p. 053313, Nov 2019.

LI, Q.; YU, Y.; WEN, Z. X. How does boiling occur in lattice Boltzmann simulations? **Physics of Fluids**, v. 32, n. 9, p. 093306, set. 2020. ISSN 1070-6631.

LI, Q.; ZHOU, P.; YAN, H. J. Improved thermal lattice Boltzmann model for simulation of liquid-vapor phase change. **Physical Review E**, APS, v. 96, n. 6, p. 63303, 2017.

LI, W.; LI, Q.; YU, Y.; LUO, K. H. Nucleate boiling enhancement by structured surfaces with distributed wettability-modified regions: A lattice boltzmann study. **Applied Thermal Engineering**, v. 194, p. 117130, 2021. ISSN 1359-4311.

LI, W. X.; LI, Q.; YU, Y.; WEN, Z. X. Enhancement of nucleate boiling by combining the effects of surface structure and mixed wettability : A lattice Boltzmann study. **Applied Thermal Engineering**, Pergamon, v. 180, n. July, p. 1–22, nov. 2020. ISSN 13594311.

LIENHARD, J. H.; DHIR, V. K.; RIHERD, D. M. Peak Pool Boiling Heat-Flux Measurements on Finite Horizontal Flat Plates. **Journal of Heat Transfer**, v. 95, n. 4, p. 477–482, 11 1973. ISSN 0022-1481.

LOU, Q.; GUO, Z.; SHI, B. Evaluation of outflow boundary conditions for two-phase lattice boltzmann equation. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 87, n. 6, jun. 2013.

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. 23305, 2015. ISSN 15502376.



\_\_\_\_\_. Cascaded lattice Boltzmann method with improved forcing scheme for large-density-ratio multiphase flow at high Reynolds and Weber numbers. **Physical Review E**, v. 94, n. 5, p. 1–20, 2016. ISSN 24700053.

MA, X.; CHENG, P. 3d simulations of pool boiling above smooth horizontal heated surfaces by a phase-change lattice Boltzmann method. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 131, p. 1095–1108, 2019.

MAHMOUD, M.; KARAYIANNIS, T. Pool boiling review: Part i – fundamentals of boiling and relation to surface design. **Thermal Science and Engineering Progress**, v. 25, p. 101024, 2021. ISSN 2451-9049.

MATTILA, K. K.; SIEBERT, D. N.; HEGELE, L. A.; PHILIPPI, P. C. High-order lattice-Boltzmann equations and stencils for multiphase models. **International Journal of Modern Physics C**, v. 24, n. 12, p. 1–4, 2013. ISSN 01291831.

MAZZEO, M. D.; COVENEY, P. V. Hemelb: A high performance parallel lattice-Boltzmann code for large scale fluid flow in complex geometries. **Computer Physics Communications**, 2008. ISSN 00104655.

MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata. **Physical Review Letters**, American Physical Society (APS), v. 61, n. 20, p. 2332–2335, 1988. ISSN 0031-9007.

MEI, R.; LUO, L.-S.; SHYY, W. An accurate curved boundary treatment in the lattice boltzmann method. **Journal of Computational Physics**, v. 155, n. 2, p. 307–330, 1999. ISSN 0021-9991.

MU, Y.-T. T.; CHEN, L.; HE, Y.-L. L.; KANG, Q.-J. J.; TAO, W.-Q. Q. Nucleate boiling performance evaluation of cavities at mesoscale level. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 106, p. 708–719, 2017. ISSN 00179310.

NUKIYAMA, S. The maximum and minimum values of the heat  $q$  transmitted from metal to boiling water under atmospheric pressure. **Journal of the Society of Mechanical Engineers**, v. 37, n. 206, p. 367–374, 1934.

OBRECHT, C.; KUZNIK, F.; TOURANCHEAU, B.; ROUX, J.-J. A new approach to the lattice Boltzmann method for graphics processing units. **Computers and Mathematics with Applications**, Elsevier BV, v. 61, n. 12, p. 3628–3638, 2011. ISSN 0898-1221.

OLIVEIRA, F. M. C. **GPU implementation of a fluid dynamics interactive simulator based on the Lattice Boltzmann method**. 2015. Dissertação (Mestrado) — Universidade de Campinas, Campinas, 2015.

PENG, C.; AYALA, L. F.; WANG, Z.; AYALA, O. M. Attainment of rigorous thermodynamic consistency and surface tension in single-component pseudopotential lattice Boltzmann models via a customized equation of state. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 101, n. 6, p. 63309, 2020. ISSN 24700053.

PHILIPPI, P. C.; HEGELE, L. A.; Dos Santos, L. O.; SURMAS, R. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. **Physical Review E**, v. 73, n. 5, p. 1–12, 2006. ISSN 15393755.

QIAN, Y. H.; D'HUMIÈRES, D.; LALLEMAND, P. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. **EPL**, 1992. ISSN 12864854.

ROTHMAN, D. H.; KELLER, J. M. Immiscible cellular-automaton fluids. **Journal of Statistical Physics**, Springer, v. 52, n. 3, p. 1119–1127, 1988.

SAFARI, H.; RAHIMIAN, M. H.; KRAFCZYK, M. Extended lattice Boltzmann method for numerical simulation of thermal phase change in two-phase fluid flow. **Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics**, v. 88, n. 1, p. 1–12, 2013.

SAYYARI, M. J.; ESFAHANI, J. A. 2d lattice Boltzmann investigation of saturated pool boiling using a tunable surface tension model: Prandtl number effects on film boiling. **Meccanica**, Springer, v. 53, n. 13, p. 3301–3320, 2018.

SBRAGAGLIA, M.; BENZI, R.; BIFERALE, L.; SUCCI, S.; SUGIYAMA, K.; TOSCHI, F. Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential. **Physical Review E**, APS, v. 75, n. 2, p. 26702, 2007. ISSN 15393755.

SHAN, X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models. **Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics**, v. 73, n. 4, p. 6–9, 2006. ISSN 15393755.

\_\_\_\_\_. Pressure tensor calculation in a class of nonideal gas lattice Boltzmann models. **Physical Review E**, APS, v. 77, n. 6, p. 66702, 2008. ISSN 15393755.

SHAN, X.; CHEN, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 47, n. 3, p. 1815–1819, 1993. ISSN 1095-3787.

\_\_\_\_\_. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. **Physical Review E**, APS, v. 49, n. 4, p. 2941, 1994.

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.

SHAN, X.; YUAN, X.-F.; CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier-Stokes equation. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 550, p. 413–441, 2006.

SIEBERT, D. N.; PHILIPPI, P. C.; MATTILA, K. K. Consistent lattice Boltzmann equations for phase transitions. **Physical Review E**, v. 90, n. 5, p. 1–15, 2014. ISSN 15502376.

SINAPAD. **Configuração do SDumont**. 2023. Disponível em: <<https://sdumont.lncc.br/machine.php?pg=machine#>>. Acesso em: 24 junho 2023.

SON, G.; DHIR, V. K.; RAMANUJAPU, N. Dynamics and Heat Transfer Associated With a Single Bubble During Nucleate Boiling on a Horizontal Surface. **Journal of Heat Transfer**, v. 121, n. 3, p. 623–631, 1999.

SONE, Y. **Kinetic Theory and Fluid Dynamics**. [S.l.: s.n.], 2002. ISBN 978-1-4612-0061-1.

SUN, T.; GUI, N.; YANG, X.; TU, J.; JIANG, S. Numerical study of patterns and influencing factors on flow boiling in vertical tubes by thermal lbm simulation. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 86, p. 32–41, 2017. ISSN 0735-1933.

SWIFT, M. R.; ORLANDINI, E.; OSBORN, W. R.; YEOMANS, J. M. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. **Physical Review E**, APS, v. 54, n. 5, p. 5041, 1996. ISSN 1063651X.

TÖLKE, J.; KRAFCZYK, M. TeraFLOP computing on a desktop PC with GPUs for 3D CFD. **International Journal of Computational Fluid Dynamics**, v. 22, n. 7, p. 443–456, 2008.

UNIVERSIDADE DE GENEVRA. **Palabos User Guide**: Release 1.0 r1. Genebra, 2020. Disponível em: <[https://palabos.unige.ch/files/9515/6509/3036/Palabos\\_UserGuide.pdf](https://palabos.unige.ch/files/9515/6509/3036/Palabos_UserGuide.pdf)>.

VIGGEN, E. M. **The lattice Boltzmann method: Fundamentals and acoustics**. 2014. Tese (Doutorado), Trondheim, 2014.

WAGNER, A. J. Thermodynamic consistency of liquid-gas lattice Boltzmann simulations. **Physical Review E**, American Physical Society (APS), v. 74, n. 5, p. 1–12, 2006. ISSN 1550-2376.

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.

WANG, S.-C.; TONG, Z.-X.; HE, Y.-L.; LIU, X. Unit conversion in pseudopotential lattice Boltzmann method for liquid–vapor phase change simulations. **Physics of Fluids**, v. 34, n. 10, 10 2022. ISSN 1070-6631. 103305.

WELCH, W. J.; WILSON, J. A Volume of Fluid Based Method for Fluid Flows with Phase Change. **Journal of Computational Physics**, v. 160, n. 2, p. 662–682, 2000.

WOLF-GLADROW, D. A. 5 . Lattice Boltzmann Models 5 . 1 From lattice-gas cellular automata to lattice. In: **Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models, An Introduction**. [S.l.: s.n.], 2000. ISBN 978-3-540-66973-9.

XIAN, W.; TAKAYUKI, A. Multi-GPU performance of incompressible flow computation by lattice Boltzmann method on GPU cluster. **Parallel Computing**, Elsevier BV, v. 37, n. 9, p. 521–535, 2011. ISSN 0167-8191.

YU, Y.; LI, Q.; QIU, Y.; HUANG, R. Z. Bubble dynamics and dry spot formation during boiling on a hierarchical structured surface: A lattice Boltzmann study. **Physics of Fluids**, v. 33, n. 8, p. 083306, 08 2021. ISSN 1070-6631.

YU, Y.; LI, Q.; WEN, Z. X.; HUANG, R. Z. Investigation on boundary schemes in lattice Boltzmann simulations of boiling heat transfer involving curved surfaces. **Physics of Fluids**, American Institute of Physics Inc., v. 32, n. 6, jun. 2020. ISSN 10897666.

YU, Y.; WEN, Z.; LI, Q.; ZHOU, P.; YAN, H. Boiling heat transfer on hydrophilic-hydrophobic mixed surfaces: A 3d lattice boltzmann study. **Applied Thermal Engineering**, v. 142, p. 846–854, 2018. ISSN 1359-4311.

YU, Z.; FAN, L. S. An interaction potential based lattice Boltzmann method with adaptive mesh refinement (AMR) for two-phase flow simulation. **Journal of Computational Physics**, Elsevier Inc., v. 228, n. 17, p. 6456–6478, 2009. ISSN 10902716.

YUAN, P.; SCHAEFER, L. Equations of state in a lattice Boltzmann model. **Physics of Fluids**, AIP, v. 18, n. 4, p. 42101, 2006. ISSN 10706631.

ZHAI, Q.; ZHENG, L.; ZHENG, S. Pseudopotential lattice Boltzmann equation method for two-phase flow: A higher-order Chapman-Enskog expansion. **Physical Review E**, APS, v. 95, n. 2, p. 23313, 2017.

---

ZHANG, C.; CHEN, L.; JI, W.; LIU, Y.; LIU, L.; TAO, W.-Q. Lattice Boltzmann mesoscopic modeling of flow boiling heat transfer processes in a microchannel. **Applied Thermal Engineering**, v. 197, p. 117369, 2021. ISSN 1359-4311.

ZHANG, L.; WANG, T.; JIANG, Y.; KIM, S.; GUO, C. A study of boiling on surfaces with temperature-dependent wettability by lattice Boltzmann method. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 122, p. 775–784, 2018. ISSN 0017-9310.

ZHANG, R.; CHEN, H. Lattice Boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows. **Physical Review E**, APS, v. 67, n. 6, p. 66711, 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**, v. 131, p. 1–10, 2019. ISSN 0017-9310.

ZOU, Q.; HE, X. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. **Physics of Fluids**, v. 9, n. 6, p. 1591–1598, 1997.

ZOU, Q.; HOU, S.; CHEN, S.; DOOLEN, G. D. A improved incompressible lattice Boltzmann model for time-independent flows. **Journal of Statistical Physics**, v. 81, n. 1-2, p. 35–48, 1995.

ZUBER, N. Nucleate boiling. The region of isolated bubbles and the similarity with natural convection. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 6, n. 1, p. 53–78, 1963.



## **Apêndices**



## APÊNDICE A – POLINÔMIOS DE HERMITE

Os polinômios de Hermite podem ser obtidos através da função peso:

$$\omega(\mathbf{x}) = \frac{e^{-\mathbf{x}^2/2}}{2\pi^{D/2}}, \quad (\text{A.1})$$

a partir da qual, os tensores polinomiais podem ser derivados através da seguinte expressão:

$$\mathcal{H}^{(n)} \equiv (-1)^{(n)} \frac{1}{\omega(\mathbf{x})} \nabla^{(n)} \omega(\mathbf{x}). \quad (\text{A.2})$$

Assim, os elementos de um tensor de ordem  $n$  são dados através da seguinte expressão:

$$\mathcal{H}_{\alpha_1 \dots \alpha_n}^{(n)} = (-1)^n \frac{1}{\omega(\mathbf{x})} \frac{\partial^{(n)} \omega(\mathbf{x})}{\partial x_{\alpha_1} \dots \partial x_{\alpha_n}}. \quad (\text{A.3})$$

Pelo Eq. (A.3) é possível verificar que os polinômios de Hermite são simétricos em relação à troca de índices, uma vez que as derivadas parciais também possuem essa propriedade. Além disso, é possível demonstrar que os polinômios também possuem a propriedade de ortogonalidade:

$$\int \omega(\mathbf{x}) \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{x}) \mathcal{H}_{\beta}^{(m)}(\mathbf{x}) = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}^{(n+m)} \left( \prod_{i=1}^D n_i \right), \quad (\text{A.4})$$

em que  $\delta_{\alpha\beta}^{(n+m)}$  assume valor igual a 1 apenas se  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  for uma permutação dos índices  $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_n)$ , caso contrário, seu valor é 0. Por exemplo,  $(x, x, z, y)$  é uma permutação de  $(y, x, z, x)$ , mas não de  $(x, x, x, y)$ . O valor  $n_i$  é a quantidade de ocorrências da dimensão  $i$  nos índices  $\alpha$ . Por exemplo, no caso tridimensional em que  $\alpha = (x, x, y)$ , temos  $n_x = 2$ ,  $n_y = 1$ ,  $n_z = 0$ .

A propriedade da ortogonalidade é utilizada para realizar projeções de funções contínuas e quadrado integráveis no espaço formado pelos polinômios de Hermite. Essa expansão é dada por:

$$f(x) = \omega(\mathbf{x}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{\alpha}^{(n)} \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{x}), \quad (\text{A.5})$$

em que os coeficientes  $a_{\alpha}$  são dados por:

$$a_{\alpha}^{(n)} = \int f(\mathbf{x}) \mathcal{H}_{\alpha}^{(n)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (\text{A.6})$$

Os polinômios até de terceira ordem são dados pelas seguintes expressões:

$$\mathcal{H}^{(0)}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{A.7})$$



$$\mathcal{H}_\alpha^{(1)}(\mathbf{x}) = x_\alpha, \quad (\text{A.8})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(\mathbf{x}) = x_\alpha x_\beta - \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma}^{(3)}(\mathbf{x}) = x_\alpha x_\beta x_\gamma - (x_\gamma \delta_{\alpha\beta} + x_\alpha \delta_{\gamma\beta} + x_\beta \delta_{\alpha\gamma}). \quad (\text{A.10})$$

No caso tridimensional, esses polinômios resultam em:

$$\mathcal{H}^{(0)} = 1, \quad (\text{A.11})$$

$$\mathcal{H}_x^{(1)} = x, \quad \mathcal{H}_y^{(1)} = y, \quad \mathcal{H}_z^{(1)} = z \quad (\text{A.12})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{xx}^{(2)} &= x^2 - 1, \\ \mathcal{H}_{yy}^{(2)} &= y^2 - 1, \\ \mathcal{H}_{zz}^{(2)} &= z^2 - 1, \\ \mathcal{H}_{xy}^{(2)} &= \mathcal{H}_{yx}^{(2)} = xy, \\ \mathcal{H}_{xz}^{(2)} &= \mathcal{H}_{zx}^{(2)} = xz, \\ \mathcal{H}_{yz}^{(2)} &= \mathcal{H}_{zy}^{(2)} = yz, \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{xxx}^{(3)} &= x^3 - 3x, \quad \mathcal{H}_{yyy}^{(3)} = y^3 - 3y, \quad \mathcal{H}_{zzz}^{(3)} = z^3 - 3z \\ \mathcal{H}_{xyy}^{(3)} &= \mathcal{H}_{yyx}^{(3)} = \mathcal{H}_{yxy}^{(3)} = xy^2 - x, \\ \mathcal{H}_{xzz}^{(3)} &= \mathcal{H}_{zxx}^{(3)} = \mathcal{H}_{zxx}^{(3)} = xz^2 - x, \\ \mathcal{H}_{yzz}^{(3)} &= \mathcal{H}_{zyz}^{(3)} = \mathcal{H}_{zzy}^{(3)} = yz^2 - y, \\ \mathcal{H}_{yxx}^{(3)} &= \mathcal{H}_{xyx}^{(3)} = \mathcal{H}_{xxy}^{(3)} = yx^2 - y, \\ \mathcal{H}_{zxx}^{(3)} &= \mathcal{H}_{xzx}^{(3)} = \mathcal{H}_{xxz}^{(3)} = zx^2 - z, \\ \mathcal{H}_{zyy}^{(3)} &= \mathcal{H}_{yzy}^{(3)} = \mathcal{H}_{yyz}^{(3)} = zy^2 - z, \\ \mathcal{H}_{xzy}^{(3)} &= \mathcal{H}_{xzy}^{(3)} = \mathcal{H}_{yxz}^{(3)} = \mathcal{H}_{yzx}^{(3)} = \mathcal{H}_{zyx}^{(3)} = \mathcal{H}_{zxy}^{(3)} = xyz. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

## A.1 Exemplo unidimensional

Para ilustrar a expansão, tomemos como exemplo a aproximação da função  $f(x) = e^{-x^2}$  utilizando a expansão até a terceira ordem. Para o caso unidimensional, os polinômios de Hermite são dados por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(0)} &= 1, & \mathcal{H}^{(1)} &= x, \\ \mathcal{H}^{(2)} &= x^2 - 1, & \mathcal{H}^{(3)} &= x^3 - 3x. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Os gráficos desses polinômios, assim como da função peso  $\omega(x)$ , são exibidos na Fig. 51. Os coeficientes até a ordem 3 são encontrados através da expressão Eq. (A.6).

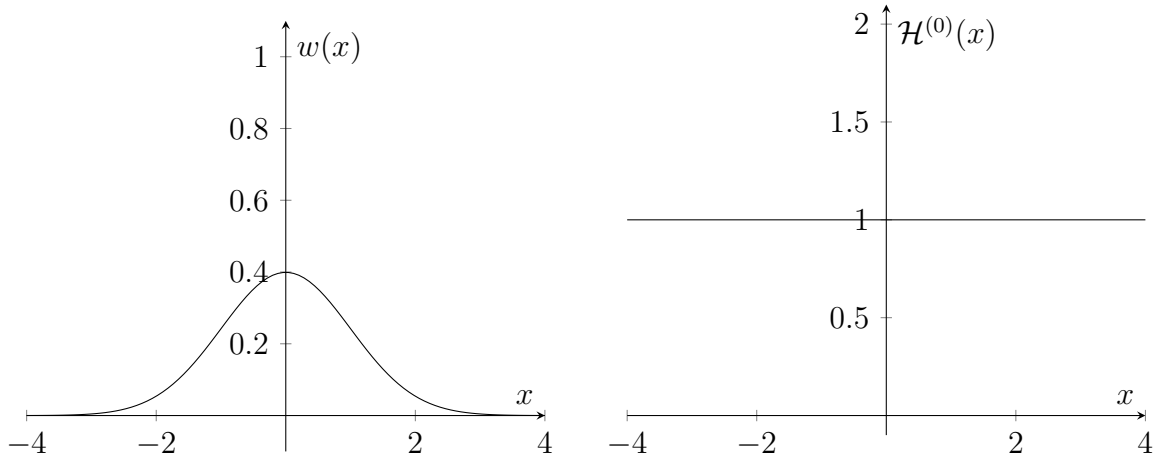
$$\begin{aligned}
 a^{(0)} &= \int e^{-x^2} 1 dx &&= \sqrt{\pi} \\
 a^{(1)} &= \int e^{-x^2} x dx &&= 0 \\
 a^{(2)} &= \int e^{-x^2} (x^2 - 1) dx &&= -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
 a^{(3)} &= \int e^{-x^2} (x^3 - 3x) dx &&= 0.
 \end{aligned}
 \tag{A.16}$$

Assim, a função  $f(x) = e^{-x^2}$ , pode ser aproximada até o termo de ordem 3 pelos polinômios de Hermite da seguinte forma:

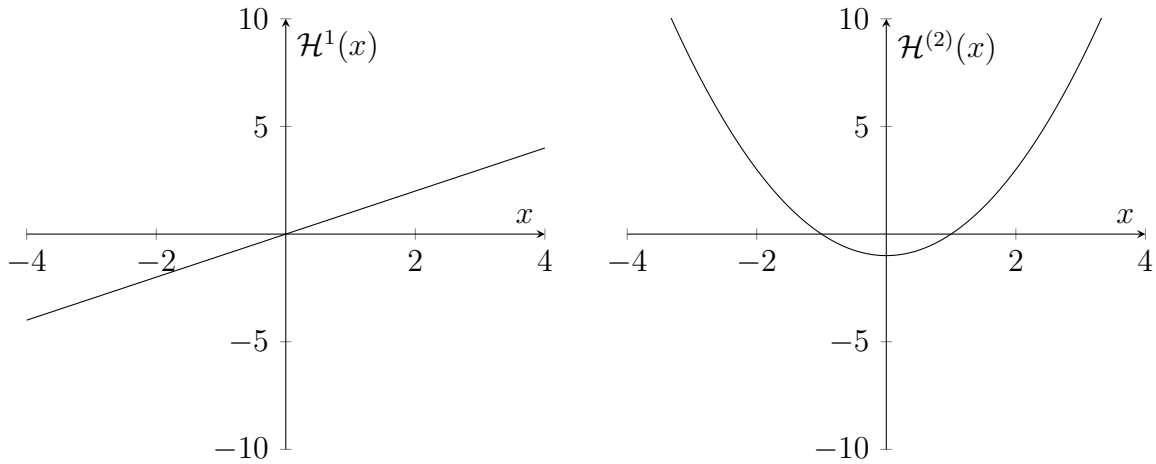
$$f(x) \approx \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \left( \sqrt{\pi} - \frac{\sqrt{\pi}}{4}(x^2 - 1) \right).
 \tag{A.17}$$

A comparação entre a função  $f(x)$  e sua aproximação por polinômios de Hermite até ordem 3 pode ser vista na Fig. 52.

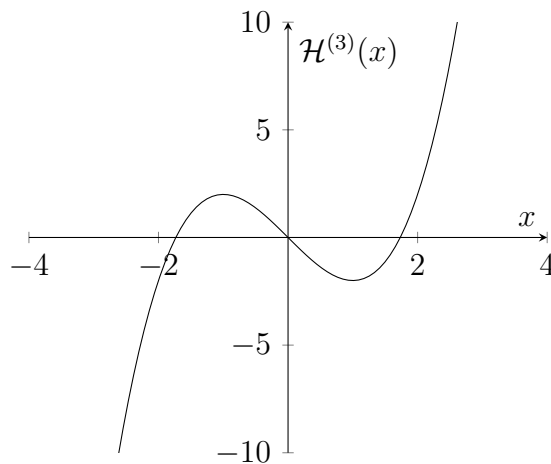
Figura 51 – Função peso  $w(x)$  da família de polinômios de Hermite (a) e seus quatro primeiros polinômios (b)-(e), com suas respectivas ordens indicadas em seus títulos.



(a) Função peso  $w(x)$  para a família de polinômios de Hermite. (b) Polinômio de Hermite de ordem zero,  $\mathcal{H}^{(0)}(x)$ .

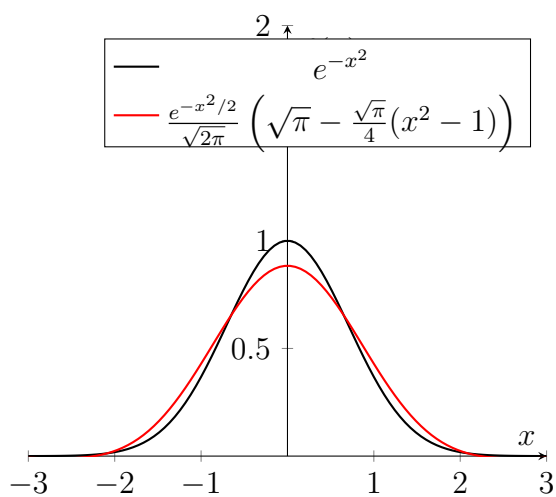


(c) Polinômio de Hermite de ordem um,  $\mathcal{H}^{(1)}(x)$ . (d) Polinômio de Hermite de ordem dois,  $\mathcal{H}^{(2)}(x)$ .



(e) Polinômio de Hermite de ordem três,  $\mathcal{H}^{(3)}(x)$ .

Figura 52 – Comparação entre a função  $f(x) = e^{-x^2}$  (em preto) e sua aproximação utilizando polinômios de Hermite até ordem 3 (em vermelho).



Fonte: Elaborado pelo autor.



## APÊNDICE B – DEFINIÇÃO DAS MATRIZES DO OPERADOR DE COLISÃO MRT

As definições das matrizes  $M$  e  $M^{-1}$  são dadas de acordo com Lallemand e Luo (2000), para o conjunto D2Q9.

$$M = \begin{pmatrix} M_\rho \\ M_e \\ M_\epsilon \\ M_{j_x} \\ M_{q_x} \\ M_{j_y} \\ M_{q_y} \\ M_{p_{xx}} \\ M_{p_{xy}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

em que cada uma das combinações lineares dada pelo produto das linhas pela função de distribuição  $f_i$  possui um significado físico.  $M_\rho$  resulta na densidade,  $M_e$  está relacionada à energia,  $M_\epsilon$  é relacionado ao quadrado da energia,  $M_{j_x}$  corresponde à componente  $x$  da quantidade de movimento,  $M_{q_x}$  está relacionada ao fluxo da energia na direção  $x$ ,  $M_{j_y}$  relacionado à componente  $y$  da quantidade de movimento,  $M_{q_y}$  ao fluxo da energia na direção  $y$ ,  $M_{p_{xx}}$  corresponde à componente diagonal do tensor de tensões e  $M_{p_{xy}}$  à componente fora da diagonal principal. A matriz de relaxação  $\Lambda = \text{diag}(\omega_\rho, \omega_e, \omega_\epsilon, \omega_j, \omega_q, \omega_j, \omega_q, \omega, \omega)$ , em que  $\omega_k = \tau_k^{-1}$ , é responsável pela relaxação de cada um desses momentos, respectivamente. Note, que pela Eq. (2.76), apenas dois fatores aparecem na equação macroscópica final:  $\omega$ , responsável pelo controle da viscosidade dinâmica e relacionado a  $M_{p_{xx}}$  e  $M_{p_{yy}}$ , e o fator  $\omega_e$ , relacionado a  $M_e$  e que dá controle ao segundo fator de viscosidade.

A matriz  $M^{-1}$  é dada por:

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & -\frac{1}{9} & \frac{1}{9} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & 0 & 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{6} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & -\frac{1}{36} & -\frac{1}{18} & 0 & 0 & -\frac{1}{6} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & 0 & -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{18} & \frac{1}{36} & \frac{1}{6} & \frac{1}{12} & -\frac{1}{6} & -\frac{1}{12} & 0 & -\frac{1}{4} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.2})$$

Os momentos de equilíbrio  $\mathbf{m}^{\text{eq}}$  podem ser expressos por:

$$\mathbf{m}^{\text{eq}} = \rho(1, -2 + 3|\mathbf{u}|^2, 1 - 3|\mathbf{u}|^2, u_x, -u_x, u_y, -u_y, u_x^2 - u_y^2, u_x, u_y)^T. \quad (\text{B.3})$$

## APÊNDICE C – NÚMEROS ADIMENSIONAIS

Esta seção tem como objetivo servir de uma referência para os números adimensionais citados ao longo do texto.

Tabela 17 – Resumo dos números adimensionais representativos ao trabalho presente.

| Número Adimensional | Definição                                 | Significado físico  |
|---------------------|---|---|
| Bond                | $Bo = \frac{g\Delta\rho L^2}{\sigma}$     | Relação entre as forças gravitacionais e forças de tensão superficial                           |
| Número capilar      | $Ca = \frac{\mu u L}{\sigma}$             | Influência da tensão superficial em relação às forças inerciais                                 |
| Nusselt             | $Nu = \frac{\alpha L}{\kappa}$            | Taxa de transferência de calor em relação à condutividade térmica                               |
| Jakob               | $Ja = \frac{c_v (T_v - T_{sat})}{h_{lg}}$ | Razão entre o calor sensível e calor latente de vaporização                                     |
| Knudsen             | $Kn = \ell/L$                             | Razão entre o caminho livre médio das moléculas e comprimento físico representativo do problema |
| Prandtl             | $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$                 | Relação entre a transferência de quantidade de movimento e a transferência de calor             |
| Reynolds            | $Re = \frac{\rho u L}{\mu}$               | Relação entre as forças inerciais e as forças viscosas em escoamentos                           |

Fonte: Elaborado pelo autor.





## **APÊNDICE D – TEMPOS DE SIMULAÇÃO**

Os tempos das simulações dos capítulos 4 e 6, mais voltados para a parte teórica, necessitaram apenas de simulações de problemas de interface plana e gota estática com malhas pequenas. Para esses casos, as simulações foram executadas na máquina 1 e/ou 2 (ver Tab. 7), e os tempos médios são em torno de 1 a 2 minutos para simulações de interface plana, e 5 a 7 minutos para os problemas de gota estática.

Tabela 18 – Tempos de simulação para casos simulados de ebulição em piscina no Cluster Santos Dumont.

| NX   | $T_w$ | $\rho_w$ | tempo      | MLUPs  | Processos | NSteps   |
|------|-------|----------|------------|--------|-----------|----------|
| 160  | 1     | 3.439    | 21.3s      | 48.1   | 80        | 40000    |
| 240  | 1     | 3.439    | 1m13.5s    | 70.56  | 80        | 90000    |
| 360  | 1     | 3.439    | 4m42.1s    | 93.04  | 90        | 202500   |
| 540  | 1     | 3.439    | 19m9.8s    | 115.56 | 108       | 455625   |
| 160  | 1.2   | 3.439    | 22.3s      | 45.97  | 80        | 40000    |
| 240  | 1.2   | 3.439    | 1m13       | 71.05  | 80        | 90000    |
| 360  | 1.2   | 3.439    | 4m38.2s    | 94.34  | 90        | 202500   |
| 540  | 1.2   | 3.439    | 19m8s      | 115.73 | 108       | 455625   |
| 160  | 1     | 0.38     | 21.4s      | 47.91  | 80        | 40000    |
| 240  | 1     | 0.38     | 1m13.9s    | 70.17  | 80        | 90000    |
| 360  | 1     | 0.38     | 4m39.2s    | 94     | 90        | 202500   |
| 540  | 1     | 0.38     | 19m10.6s   | 115.47 | 108       | 455625   |
| 160  | 1.2   | 0.38     | 22.5s      | 45.51  | 80        | 40000    |
| 240  | 1.2   | 0.38     | 1m15s      | 69.15  | 80        | 90000    |
| 360  | 1.2   | 0.38     | 4m37.1s    | 94.7   | 90        | 202500   |
| 540  | 1.2   | 0.38     | 19m4.9s    | 116.04 | 108       | 455625   |
| 160  | 1     | 0.38     | 36.4s      | 30.93  | 40        | 44000    |
| 320  | 1     | 0.38     | 4m21.8s    | 68.83  | 80        | 176000   |
| 640  | 1     | 0.38     | 47m6.7s    | 102.01 | 80        | 704000   |
| 1280 | 1     | 0.38     | 386m45.4s  | 198.82 | 160       | 2816000  |
| 2560 | 1     | 0.38     | 6242m34.5s | 197.09 | 160       | 11264000 |
| 160  | 1.2   | 0.38     | 36.8s      | 30.61  | 40        | 44000    |
| 320  | 1.2   | 0.38     | 4m21.2s    | 69     | 80        | 176000   |
| 640  | 1.2   | 0.38     | 45m35.2s   | 105.42 | 80        | 704000   |
| 1280 | 1.2   | 0.38     | 391m36.6s  | 196.36 | 160       | 2816000  |
| 2560 | 1.2   | 0.38     | 4145m31.8s | 296.78 | 256       | 11264000 |
| 160  | 1     | 3.439    | 36.3s      | 31.04  | 40        | 44000    |
| 320  | 1     | 3.439    | 4m21s      | 69.06  | 80        | 176000   |
| 640  | 1     | 3.439    | 80m58.4    | 59.35  | 40        | 704000   |
| 1280 | 1     | 3.439    | 478m5.4s   | 160.84 | 128       | 2816000  |
| 2560 | 1     | 3.439    | 6195m59s   | 198.57 | 160       | 11264000 |
| 160  | 1.2   | 3.439    | 36.3s      | 31     | 40        | 44000    |
| 320  | 1.2   | 3.439    | 4m21.7s    | 68.87  | 80        | 176000   |
| 640  | 1.2   | 3.439    | 80m51.7s   | 59.43  | 40        | 704000   |
| 1280 | 1.2   | 3.439    | 388m47.2s  | 197.78 | 160       | 2816000  |
| 2560 | 1.2   | 3.439    | 12375m45s  | 99.41  | 128       | 11264000 |

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 19 – Tempos de simulação para casos simulados de evaporação de uma gota no Cluster Santos Dumont.

| NX  | Tempo    | MLUPs  | Processos | NSteps |
|-----|----------|--------|-----------|--------|
| 128 | 19.7s    | 50.02  | 64        | 60000  |
| 192 | 56.9s    | 87.51  | 96        | 135000 |
| 288 | 4m23.3s  | 95.69  | 96        | 303750 |
| 432 | 17m12.2s | 123.56 | 96        | 683437 |

Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 20 – Tempos de simulação para casos simulados do problema de Stefan no Cluster Santos Dumont.

| NX   | $c_v$ | Tempo  | MLUPs | Processos | NSteps   |
|------|-------|--------|-------|-----------|----------|
| 160  | 5     | 12s    | 1.99  | 10        | 150000   |
| 320  | 5     | 50s    | 3.85  | 20        | 600000   |
| 640  | 5     | 3m42s  | 6.91  | 40        | 2400000  |
| 1280 | 5     | 17m0s  | 12.04 | 80        | 9600000  |
| 2560 | 5     | 79m16s | 20.67 | 80        | 38400000 |
| 160  | 10    | 11.4s  | 2.1   | 10        | 150000   |
| 320  | 10    | 49.8s  | 3.85  | 20        | 600000   |
| 640  | 10    | 3m38s  | 7.05  | 40        | 2400000  |
| 1280 | 10    | 16m45s | 12.22 | 80        | 9600000  |
| 2560 | 10    | 80m50s | 20.27 | 80        | 38400000 |



## **Anexos**



**ANEXO A – TRABALHOS ORIGINADOS DA PESQUISA**





## Research paper

## Pseudopotential Lattice Boltzmann Method for boiling heat transfer: A mesh refinement procedure

Alfredo Jaramillo\*, Vinícius Pessoa Mapelli, Luben Cabezas-Gómez

Heat Transfer Research Group, Department of Mechanical Engineering, São Carlos School of Engineering, University of São Paulo, Trabalhador São-Carlense Avenue, 400, 13566-590, São Carlos, SP, Brazil



## ARTICLE INFO

## Keywords:

Pseudopotential LBM  
Boiling  
Heat transfer  
Lattice Boltzmann Equation  
Mesh refinement

## ABSTRACT

Boiling is a complex phenomenon where different non-linear physical interactions take place and for which the quantitative modeling of the mechanism involved is not fully developed yet. In the last years, many works have been published focusing on the numerical analysis of this problem. However, a lack of numerical works assessing quantitatively the sensitivity of these numerical simulations to grid parameters can be identified, especially for the Lattice Boltzmann method (LBM). The main goal of this work is to propose a mesh refinement methodology for simulating phase-change heat transfer problems employing the pseudopotential LBM. This methodology was based on relating the physical parameters to their lattice counterparts for an arbitrary mesh under the viscous regime (where  $\Delta t \propto \Delta x^2$ ). A suitable modification of the EOS parameters, the adjusting of thermodynamic consistency and surface tension for a certain  $\Delta x$  were the main steps of the proposed methodology. A first ensemble of simple simulations including the droplet vaporization and the Stefan problems was performed to validate the proposed method and to assess the influence of some physical mechanisms. Global norms in space and time were used to evaluate the variations of both the density and temperature fields for pool boiling simulations when the lattice discretization is refined. It was observed that the proposed methodology provides convergent results for all the problems considered, and the convergence orders depend on the complexity of the simulated phenomena.

## 1. Introduction

Boiling heat transfer is a phenomenon widely exploited in common daily tasks as long as in industrial applications, such as nuclear reactors, heat pipes, industrial boilers, refrigeration and power systems, and others [1]. In general, pool boiling represents a boiling process at the body surface immersed in a large volume of liquid [1], and it is one of the main boiling mechanisms addressed in the literature. This boiling process takes place in quenching processes, in electronic devices immersed in cooling liquids, and in flooded evaporators employed in industrial refrigeration installations and nuclear power stations using pressurized water reactors, to mention a few applications. The reason for its widespread adoption is its high efficiency in transferring heat, especially in the nucleate boiling regime, where vapor bubbles cycle through well-known phases of formation, growth, and departure. In this paper, a mesh refinement study for obtaining mesh independent solutions is proposed and applied to three studied problems related to liquid–gas phase-change, namely, the one-dimensional Stefan problem, the evaporation of a two-dimensional droplet in a superheated vapor and the pool boiling problem in two dimensions. The applied methodology is a step forward in the numerical simulation of boiling processes

that occur in real applications with the pseudopotential LBM. The mathematical modeling and numerical analysis for this phenomenon represent a challenging problem with inherent non-linear behavior, and physical phenomena evolving along with different scales [2,3]. Moreover, solid–liquid–vapor interparticle interaction may take place, which has been proved to have an important influence on quantities of interest like the heat transfer coefficient [4]. For that reason, several researchers have dedicated themselves to better understand these phenomena, either experimentally, theoretically, or numerically [5–14].

Recently, a numerical method that has drawn attention is the Lattice Boltzmann Method (LBM) due to its potential to simulate a variety of complex phenomena such as flow in porous medium [15,16], turbulence [17,18], particle suspensions [19,20] and others [9,14,21–23]. A comprehensive review of the method, focusing on multiphase flows, thermal flows, and thermal multiphase flows with phase change has been recently provided by Li et al. [24]. One of the LBM advantages for simulating interfacial dynamics lies in the fact that it does not involve front-tracking, as is the case with more traditional methods

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [ajaramillopalma@gmail.com](mailto:ajaramillopalma@gmail.com) (A. Jaramillo), [vinicius.mapelli@usp.br](mailto:vinicius.mapelli@usp.br) (V. Pessoa Mapelli), [lubencg@sc.usp.br](mailto:lubencg@sc.usp.br) (L. Cabezas-Gómez).



Contents lists available at ScienceDirect

Physica A

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/physa](http://www.elsevier.com/locate/physa)

# On the force scheme influence on pseudopotential method coexistence curve

Vinicius Pessoa Mapelli<sup>a,\*</sup>, Luiz Eduardo Czelusniak<sup>a</sup>,  
Matheus dos Santos Guzella<sup>b</sup>, Luben Cabezas-Gómez<sup>a</sup>

<sup>a</sup> São Carlos School of Engineering, University of São Paulo, 400 Trabalhador são-carlense avenue, São Carlos, SP, Brazil

<sup>b</sup> Institute of Science and Technology, Federal University of the Jequitinhonha and Mucuri Valleys, Diamantina, Brazil



## ARTICLE INFO

### Article history:

Received 10 May 2021

Received in revised form 11 January 2022

Available online 20 April 2022

### Keywords:

Lattice Boltzmann method

Pseudopotential method

Single-component multiphase

Thermodynamic consistency

Force schemes

## ABSTRACT

Pseudopotential method has been drawing attention in simulating multiphase flows by adding an interparticle force to lattice Boltzmann method (LBM). However, implementing a known force field effect into evolution of particle distribution function is still an active field of interest, specially when higher order terms play significant role in resulting macroscopic equations. A considerable number of forcing schemes has already been proposed, and although many have shown their differences up to second order analysis, there is still some debate about high order terms. In this work, a study taking into account third order forcing terms is carried out, in order to better identify the reasons for existing distinct coexistence curves when the same interparticle force is employed through distinct forcing schemes. Third order terms related to spatial interparticle force gradients are taken into account, and a theoretical analysis is carried out in order to study gas–liquid coexistence curves. It is shown that this curve can be characterized by a single parameter,  $\Gamma$ , dependent on employed relaxation time and forcing scheme, which allows the current analysis to be used for other schemes as well. Flat interface simulations are carried out in order to study the behavior of gas–liquid coexistence curve. A good agreement between the numerical and theoretical results validates the presented approach. Static droplet simulations were carried out, where surface tension behavior also respect the expected trend of higher values for lower  $\Gamma$ . Maximum spurious velocities of renowned forcing schemes from literature were also studied, without a clear correlation with  $\Gamma$  parameter.

© 2022 Elsevier B.V. All rights reserved.

## 1. Introduction

Lattice Boltzmann method (LBM) models a population of random moving microscopic particles employing statistical tools, an approach known to deal with mesoscopic scales [1]. In hydrodynamic limit, LBM is capable of recovering macroscopic Navier–Stokes equations, and great effort has been employed to extend its capabilities to simulate different physical phenomena. Shan and Chen [2] made one of first attempts to model multiphase flows proposing an interparticle force dependent on a pseudopotential function, which is computed through the original expected potential, the density field.

Several forcing schemes have been proposed to include the effects of a force field into the single relaxation time (SRT) discretized lattice Boltzmann equation (LBE) [2–6]. Shan and Chen [2], original authors of pseudopotential method,

\* Corresponding author.

E-mail address: [vinicius.mapelli@usp.br](mailto:vinicius.mapelli@usp.br) (V.P. Mapelli).



encit 2020



18th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering  
November 16–20, 2020 (Online)

ENC-2020-0457

## INVESTIGATION ON INFLUENCE OF FORCING SCHEMES ON THEORETICAL AND SIMULATED GAS-LIQUID COEXISTENCE CURVE USING PSEUDOPOTENTIAL LATTICE BOLTZMANN METHOD

Vinícius Pessoa Mapelli

Luben Cabezas-Gómez

University of São Paulo, São Carlos School of Engineering, SP, Brazil

vinicius.mapelli@usp.br

**Abstract.** Multiphase flows is a research field that draws much attention for its occurrence in natural and industrial processes. Modeling these flows accurately is very challenging, and in the last few decades, pseudopotential framework in lattice Boltzmann method has arisen as an interesting alternative to traditional CFD simulations due to its simplicity. In the present work, a third order analysis is used to study the behavior of gas-liquid coexistence curve for a flat planar interface. Two forcing schemes, namely, Guo et al. (2002) and Shan and Chen (1993), are employed in order to verify whether simulation results are well predicted by theoretical analysis. Present work analysis was compared with literature theoretical analysis, simulation and Maxwell coexistence curve results. Current theoretical coexistence curve was able to predict simulation results within 7% of accuracy while analysis from literature deviate 86% from simulation results. No differences were observed for Guo forcing scheme. Present work was also able to predict well the coexistence curve dependence of Shan-Chen scheme on relaxation time. Although applications of such schemes may be limited, a better understanding of these schemes and good theoretical approaches are key steps in order to modify and enhance lattice Boltzmann methods to simulate wider ranges of flow conditions.

**Keywords:** Lattice Boltzmann method, Pseudopotential method, gas-liquid flow, flat interface

### 1. INTRODUCTION

Multiphase flows are of great interest in both academic and industrial researches due to its natural occurrence in different applications, such as chemical, power-generation, heat exchanger industries, among others (Krüger *et al.*, 2017). Accurately modeling such multiphase flows is very challenging, and different approaches can be employed (Li *et al.*, 2012). In the last decades, the lattice Boltzmann method (LBM) has drawn attention for being an interesting alternative approach to simulate different problems such as porous (Guo and Zhao, 2002; Liu *et al.*, 2016) and compressible flows (Alexander *et al.*, 1992; Kataoka and Tsutahara, 2004).

Regarding multiphase flows, the pseudopotential approach proposed by Shan and Chen (1993), which incorporates an interaction potential dependent on the density, has been shown to be an effective and simple approach to multiphase and multicomponent flows. The ability to incorporate gas-liquid coexistence behavior is done through a forcing scheme, which is used to include the proposed interparticle force dependent on the pseudopotential function. A formidable number of forcing schemes has been proposed for LBM, in which most notable ones are, namely, Guo *et al.* (2002); He *et al.* (1998); Kupershtokh *et al.* (2009) and, also, the original scheme proposed in the first pseudopotential work, Shan and Chen (1993).

Such different procedures to include interparticle potential into the lattice Boltzmann equation play significant influence on stability and achievable density ratios. In fact, correctly predicting simulation results from theoretical analysis has been of major interest, since the second order analysis, commonly employed for other problems, is not able to reproduce observed simulation results. Distinct strategies have been seen in the literature to correctly predict and reproduce a thermodynamic consistent behavior in lattice Boltzmann simulations. Wagner (2006) carried out a fifth-order equilibrium analysis on to show some corrections that should be employed in order to achieve thermodynamic consistency. This analysis employed one-dimensional lattices with 3 discrete velocities (D1Q3), however, the conclusions can be extended to most common lattices used in literature, namely, D2Q9, D3Q19 and D3Q27. One of the drawbacks of such lattices is that they are second-order approximation of continuum Boltzmann equation in velocity space, and as such, they are not able to correctly recover high-order moments of distribution function. A thorough discussion and a systematic procedure for obtaining higher-order representations is shown by Shan *et al.* (2006). Philippi *et al.* (2006) also discusses how the commonly used lattices are not sufficient to correctly retrieve macroscopic behavior of energy conservation equation. They



***EESC • USP***