



IMPLEMENTAÇÃO DE MODELO NUMÉRICO PARA A SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS

Sérgio Luis Oliveira de Siqueira Júnior

Projeto Final de Curso

Orientadores

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc

Agosto de 2012

IMPLEMENTAÇÃO DE MODELO NUMÉRICO PARA A SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS

Sérgio Luis Oliveira de Siqueira Júnior

Projeto Final de curso submetido ao Corpo Docente da Escola de Química, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado por:

João Felipe Mitre de Araujo , D.Sc

Ricardo de Andrade Medronho, D.Sc

Thiago Judson Lima de Oliveira, Eng.

Orientado por:

Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva, D.Sc

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc

Rio de Janeiro, RJ – Brasil
Agosto de 2012

de Siqueira Júnior, Sérgio Luis.

Desenvolvimento de solver para escoamento em meio poroso/ Sérgio Luis
Oliveira de Siqueira Júnior. - Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2012
viii, 55 p.;il.

Projeto Final – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química,
2012. Orientadores: Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva e Paulo Laranjeira da Cunha
Lage

1. Meio poroso. 2. Caminho preferencial. 3. CFD. 4. Projeto Final (Graduação –
UFRJ/EQ). Luiz Fernando Lopes Rodrigues Silva e Paulo Laranjeira da Cunha Lage.

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar, à minha família por todo o apoio, carinho e compreensão nos momentos difíceis (os quais não foram poucos), por toda a faculdade.

Agradeço aos meus professores orientadores, Luiz Fernando e Paulo, pela paciência que tiveram comigo, por todas as vezes em que não lhes dei o feedback necessário sobre a evolução do trabalho e, por isso, muitas vezes acabei em caminhos errados.

Agradeço aos meus companheiros de LTFD, por nunca negar uma resposta às minhas perguntas, fossem elas sobre o OpenFOAM ou se eu poderia tomar um pouco do chimarrão alheio.

Agradeço a todos os amigos que fiz durante os 5 anos de faculdade, fossem eles marroquinos, ou não; Villains ou Heroes.

Agradeço em especial a uma das pessoas que mais me apoiou durante toda essa jornada, que conheci no começo dela e que sem ela provavelmente não a teria finalizado. Obrigado Mari.

Resumo do Projeto Final de Curso apresentado à Escola de Química como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Engenheiro Químico.

IMPLEMENTAÇÃO DE MODELO NUMÉRICO PARA A SIMULAÇÃO DO ESCOAMENTO EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS

Sérgio Luis Oliveira de Siqueira Júnior

Agosto, 2012

Orientadores: Luiz Fernando Rodrigues Silva, D.Sc

Paulo Laranjeira da Cunha Lage, D.Sc

Meios porosos são largamente encontrados na indústria química, sendo eles naturais, como reservatórios de petróleo, solos, rochas e aquíferos, ou artificiais, como algumas membranas. Portanto, o estudo do escoamento de fluidos em meios porosos é de grande importância para a indústria. Nesse trabalho será apresentada a implementação de um solver, que possibilita a simulação deste escoamento, no pacote CFD OpenFOAM, escrito em C++ e de código aberto. A modelagem foi feita através da aplicação da Lei de Darcy à equação de Navier-Stokes, compreendendo meios porosos com a porosidade variando espacialmente, de forma aleatória, gerando caminhos preferenciais. Simulações utilizando o solver foram feitas para verificação do código.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação e Objetivo	2
1.2	Estrutura do texto	3
2	Escoamento em meios porosos	4
2.1	Características de um meio poroso	4
2.2	Lei de Darcy	8
2.3	Equações do movimento	11
2.4	Média volumétrica das equações de transporte	12
2.5	Equações de transporte acopladas a Darcy	14
3	CFD e Pacote OpenFOAM	17
3.1	Método de Volumes Finitos	17
3.2	OpenFOAM	19
3.2.1	Definição	19
3.2.2	A linguagem de programação no OpenFOAM	20
3.2.3	Solvers	21
3.2.4	Estrutura dos casos	22
4	Metodologia	25
4.1	Desenvolvimento do solver	25
4.1.1	Arquivos característicos do solver	27
4.1.2	Heterogeneidade do meio poroso	32
4.2	Estudo de casos	35

5	Resultados	38
5.1	Caso 1	38
5.2	Caso 2	39
5.3	Caso 3	43
5.4	Caso 4	47
6	Conclusões e Sugestões	51
6.1	Conclusões	51
6.2	Sugestões para trabalhos futuros	52
	Referências Bibliográficas	53

Lista de Figuras

2.1	Imagens superiores: Exemplos de meios porosos naturais: A) areia de praia, B)arenito, C) pedra calcária, D) pão de centeio, E) madeira, F) pulmão humano. Imagens inferiores: materiais porosos granulares usados na industria da construção. Imagem extraída de Bear [1].	5
2.2	Esquema do experimento de Darcy [2].	8
2.3	Relação entre o fator de fricção e o número de Reynolds para escoamento em meio poroso. Imagem extraída de Nield et al. [1].	10
2.4	Volume elementar representativo em um meio poroso (REV) [3].	13
3.1	Representação de um volume de controle [4].	18
3.2	Visão geral da estrutura do OpenFOAM. Imagem extraída de [5]	19
3.3	Estrutura de diretórios de um solver. Imagem extraída de [5]	21
3.4	Estrutura de diretórios de um caso [5]. Imagem extraída de [5]	22
4.1	Geometria das simulações	35
4.2	Campo de porosidade heterogêneo.	36
4.3	Campo de porosidade heterogêneo com caminho preferencial.	36
4.4	Campo de porosidade heterogêneo com caminho preferencial nas paredes.	37
5.1	Campo de pressão no escoamento homogêneo.	39
5.2	Queda de pressão no escoamento homogêneo.	39
5.3	Linha traçada no domínio para análise.	39
5.4	Campo de pressão no escoamento heterogêneo.	41
5.5	Comportamento da pressão na extensão da linha	41
5.6	Comportamento das pressão modificada na extensão da linha	41

5.7	Porosidade no escoamento heterogêneo, sendo analisada na linha traçada no domínio.	42
5.8	Velocidade superficial no escoamento heterogêneo, sendo analisada na linha traçada no domínio.	42
5.9	Velocidade intersticial no escoamento heterogêneo, sendo analisada na linha traçada no domínio.	42
5.10	Campo de pressão no escoamento heterogêneo com caminho preferencial.	43
5.11	Comportamento da pressão na extensão da linha.	44
5.12	Comportamento da pressão modificada na extensão da linha.	44
5.13	Porosidade no escoamento heterogêneo com caminho preferencial, sendo analisada na linha traçada no domínio.	45
5.14	Velocidade superficial no escoamento heterogêneo com caminho preferencial, sendo analisada na linha traçada no domínio.	45
5.15	velocidade intersticial no escoamento heterogêneo com caminho preferencial, sendo analisada na linha traçada no domínio.	46
5.16	Campo de velocidade superficial no escoamento heterogêneo com caminho preferencial.	46
5.17	Campo vetorial de velocidade superficial no escoamento heterogêneo com caminho preferencial.	46
5.18	Perfil da velocidade.	47
5.19	Campo vetorial da velocidade.	48
5.20	Linhas A e B traçadas para análise, respectivamente.	48
5.21	Comportamento da porosidade na linha A.	48
5.22	Comportamento da porosidade na linha B.	49
5.23	Comportamento da velocidade superficial na linha B	49
5.24	Comportamento da velocidade superficial na linha A	49

Capítulo 1

Introdução

Fenômenos de transporte como difusão, convecção, dispersão e adsorção, que ocorrem no interior de meios porosos naturais ou artificiais surgem em diversas áreas da ciência e da engenharia. Reatores heterogêneos com reação catalítica ou não catalítica e separações cromatográficas são alguns dos processos em engenharia química que dependem do transporte seletivo e controlado de misturas gasosas através de meios porosos. A acessibilidade e a velocidade de transporte na estrutura interna das partículas porosas, têm um papel fundamental no projeto de processos químicos [1].

Na indústria de petróleo e gás o estudo do escoamento em meios porosos é de extrema relevância, pois os seus reservatórios são formações geológicas porosas. Na indústria química são muito utilizados em reatores catalíticos, pois um catalisador poroso tem maior área de contato que catalisadores não porosos. Nestes e em outros processos, os fenômenos de transporte mais relevantes são a transferência de quantidade de movimento, calor e de massa, além da possibilidade de ocorrência de reação química [6].

O comportamento em todos os processos citados é influenciado decisivamente pela estrutura da matriz sólida. Qualquer modelo que pretenda descrever adequadamente um meio poroso deverá levar em conta esses aspectos e incluí-los na modelagem dos fenômenos de transporte [2]. No entanto, quanto mais informação da estrutura do meio é considerada,

mais complexos se tornam os modelos que o descrevem. Por exemplo, a maioria dos meios porosos naturais e artificiais são heterogêneos, sendo importante na modelagem do meio levar em consideração essa característica.

O aparecimento de fraturas em escoamentos em meios porosos é cada vez mais reconhecido como uma importante característica do escoamento e transporte em sistemas heterogêneos. As fraturas fornecem caminhos preferenciais para o escoamento do fluido em rochas, diminuindo a resistência à passagem do fluido se comparado ao restante do meio que a circunda [7]. Entretanto, esse é um assunto de difícil tratamento e que ainda necessita de estudos mais aprofundados.

1.1 Motivação e Objetivo

Uma vez que o estudo dos fenômenos de transporte em meios porosos é importante, é necessário desenvolver ferramentas e modelos que prevejam o escoamento nestes meios. A Fluidodinâmica computacional (*Computational Fluid Dynamics* - CFD) [8] resolve as equações de transporte para certas condições de contorno especificadas, sendo um método de simulação de problemas de campo envolvendo escoamento e processos de transferência de calor e massa. Na fluidodinâmica computacional, as equações de conservação da mecânica do contínuo são resolvidas numericamente.

Já existem modelos implementados que resolvem o escoamento através de meios porosos em CFD, como é o caso de alguns *softwares* comerciais, porém estes apresentam custos elevados de licenciamento. Há também *softwares* livres como o OpenFOAM [5], que é distribuído gratuitamente junto com o código fonte permitindo grande flexibilidade no desenvolvimento de novos modelos.

O presente trabalho tem como objetivo realizar a simulação CFD de escoamentos em meios porosos heterogêneos ao implementar a equação de transporte acoplada à Lei de Darcy, através da abordagem Euleriana. Para isso, o OpenFOAM foi utilizado por ser um *software* de CFD com código aberto, possibilitando que sejam feitas modificações e

novas implementações.

1.2 Estrutura do texto

No Capítulo 2, são apresentadas definições sobre a morfologia e a modelagem do escoamento através de um meio poroso. O Capítulo 3 apresenta uma revisão do método de volumes finitos aplicado a CFD e a estrutura do pacote OpenFOAM. No Capítulo 4, é explicitada a metodologia adotada para o desenvolvimento do novo aplicativo e sua funcionalidade, além da descrição dos casos simulados para avaliar a metodologia implementada. No Capítulo 5, são analisados os resultados obtidos com o aplicativo desenvolvido. Por fim, são apresentadas as conclusões do trabalho no Capítulo 6.

Capítulo 2

Escoamento em meios porosos

2.1 Características de um meio poroso

O meio poroso é um material que consiste de uma matriz sólida com vazios interconectados. A matriz pode ser tanto rígida (situação mais usual) quanto sofrer pequenas deformações com o escoamento [1]. A interconectividade dos vazios, chamados poros, permite o escoamento de um ou mais fluidos através do material. Na situação mais simples (escoamento de uma única fase) o vazio é preenchido por um único fluido. Em escoamentos bifásicos, ambas as fases podem compartilhar os espaços vazios.

Em um meio poroso natural, a distribuição dos poros com respeito a forma e tamanho é irregular. Exemplos de meios porosos naturais são: leitos formados por areia de praia, pedras calcárias, arenito, entre outros, como apresentado na Figura 2.1 [1].

Para diversas propostas de modelagem, as propriedades geométricas da matriz porosa são necessárias. Certas propriedades geométricas macroscópicas, como a porosidade (α) e a permeabilidade (K) são definidas e determinadas experimentalmente, sendo empregadas como parâmetros para descrever a geometria da matriz porosa.

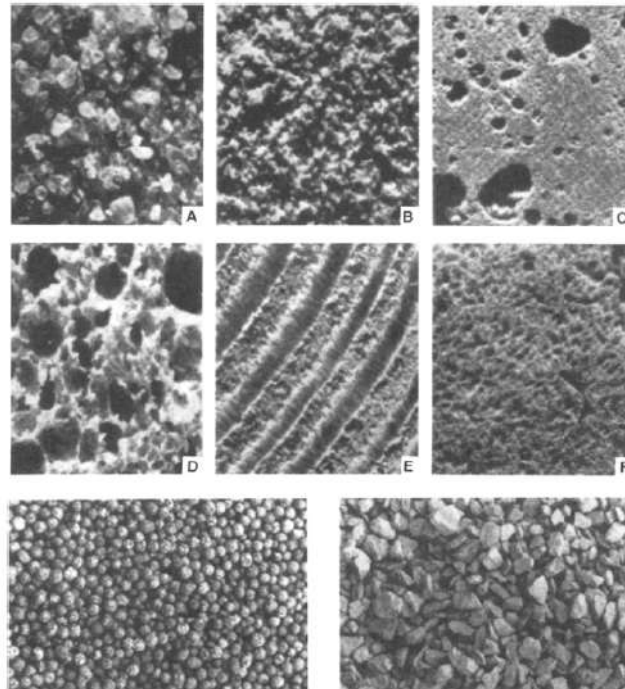


Figura 2.1: Imagens superiores: Exemplos de meios porosos naturais: A) areia de praia, B)arenito, C) pedra calcária, D) pão de centeio, E) madeira, F) pulmão humano. Imagens inferiores: materiais porosos granulares usados na indústria da construção. Imagem extraída de Bear [1].

A porosidade, por definição, é a razão entre o volume dos espaços vazios e o volume total do meio, ou seja:

$$\alpha = \frac{\text{Volume de vazios}}{\text{Volume total do meio}} \quad (2.1)$$

Portanto, a porosidade varia entre 0 e 1.

A permeabilidade, por sua vez, nos dá uma informação de como esses espaços vazios estão conectados. Essa é uma quantidade que depende somente da geometria e é frequentemente chamada de permeabilidade absoluta. Ela descreve a habilidade de uma determinada fase escoar pelos canais entre os poros. Devido a sua importância como parâmetro de caracterização de meios porosos, dados precisos de permeabilidade são necessários para simulações macroscópicas. Uma relação geral entre α e K tem sido procurada por vários pesquisadores ao longo dos anos, e um resumo dessas correlações pode ser encontrada em Yazdchi et al.[9]. Atualmente, sabe-se que a forma dessa relação depende fortemente do

tipo de material da matriz, podendo ter uma dependência tanto exponencial quanto em lei de potência.

Sob o ponto de vista estrutural pode-se classificar o meio poroso em relação a homogeneidade, isotropia e ordenação. Por homogeneidade entende-se que o meio é invariante por translação. Um meio poroso é isotrópico quando, qualquer que seja a direção considerada, a resistência ao escoamento (ou outra propriedade física) for a mesma em todas as direções. A maioria dos meios porosos naturais são anisótropos, isto é, não-isotrópicos [10].

A permeabilidade é um tensor que depende da anisotropia do meio, apresentando grande variabilidade. Dessa forma, a permeabilidade de um determinado ponto do meio é caracterizada pelo tensor permeabilidade do ponto:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix}$$

Caso se trate de um meio poroso homogêneo, o tensor permeabilidade será igual em todos os pontos, caso contrário o meio poroso é dito heterogêneo.

Se, olhando o tensor permeabilidade, assumirmos que os eixos principais coincidem com a direção do sistema de coordenadas, o tensor de permeabilidade se torna diagonal:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{bmatrix}$$

onde K_x , K_y e K_z são os coeficientes de permeabilidade nas direções x, y e z.

Se os coeficientes dessa matriz forem iguais, ou seja $K_x=K_y=K_z=K$, o meio poroso é classificado como isotrópico e o tensor será:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K & 0 & 0 \\ 0 & K & 0 \\ 0 & 0 & K \end{bmatrix}$$

Valores da permeabilidade para materiais naturais variam largamente. Valores típicos para solos são, em geral, da faixa de 10^{-7} a $10^{-20}m^2$ [1].

Os meios porosos são raramente homogêneos, tendo características heterogêneas e apresentando estruturas de diversas escalas [6]. Uma das questões cruciais para modelar escoamentos em meios heterogêneos é a relação entre o escoamento e a permeabilidade do meio [11].

Diversos autores estudaram o comportamento do escoamento preferencial em meios porosos consequente da sua heterogeneidade. Dentre eles, David [12] estudaram numericamente o escoamento monofásico em matrizes porosas demonstrando a existência de caminhos preferenciais com picos de velocidade. Park et. al. [13] estudaram o caminho preferencial em meios heterogêneos usando a técnica de rastreamento de partículas. Crandall et. al. [7] propuseram uma modelagem computacional para escoamentos através de fraturas em rochas permeáveis, através de tomografias das fraturas [14]. Outros textos baseados no estudo de caminhos preferenciais em meios porosos foram propostos na literatura [15, 16, 17].

O escoamento de um fluido newtoniano incompressível em um meio poroso rígido é representado por um sistema de equações diferenciais parciais composto pela conservação de massa fluida e da lei de Darcy, que relaciona a velocidade média de escoamento nos poros com o gradiente de um potencial. Na próxima seção será descrita a lei de Darcy, a partir de seu caráter experimental e a partir de hipóteses simplificadoras para o balanço de momento linear de um fluido newtoniano incompressível que escoar em meio poroso rígido. São apresentadas as técnicas de média volumétrica e as equações de transporte em um meio poroso derivadas através dessa abordagem.

2.2 Lei de Darcy

A relação entre a vazão de um fluido em um meio poroso e a diferença de pressão a ele aplicada foi primeiramente quantificada por Henri Darcy em 1856 [18]. Seu experimento consistia em fazer escoar, sob pressão, um fluido de massa específica e viscosidade uniformes através de um tubo cilíndrico de seção transversal uniforme A , com uma seção de espessura L preenchida com areia completamente saturada, conforme mostra o esquema simplificado da Figura 2.2 [2].

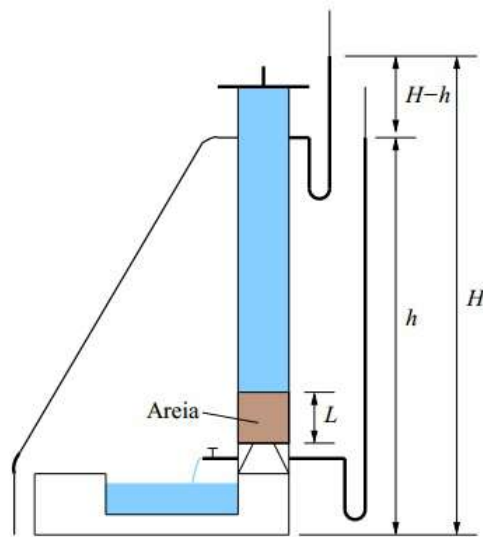


Figura 2.2: Esquema do experimento de Darcy [2].

De seus experimentos, Darcy concluiu que a vazão Q é proporcional à área de seção transversal do tubo, proporcional à diferença de carga ($H-h$) e inversamente proporcional ao comprimento L . Quando combinadas, essas conclusões dão origem à fórmula de Darcy:

$$Q = KA \frac{(H-h)}{L} \quad (2.2)$$

É muito frequente o uso da velocidade de Darcy, dada por

$$\mathbf{u} = \frac{Q}{A} \quad (2.3)$$

Esta é uma velocidade média tomada a partir da vazão sobre toda a seção A , ou seja,

uma velocidade superficial, e não deve ser confundida com a velocidade real do fluido nos poros, que deve ser medida a partir da área efetiva dos poros na seção.

Em notação diferencial, a lei de Darcy é expressa por [1]:

$$\mathbf{u} = -\frac{K}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \quad (2.4)$$

onde $\frac{\partial P}{\partial x}$ é o gradiente de pressão na direção no escoamento e μ é a viscosidade dinâmica do fluido. O coeficiente K é a permeabilidade intrínseca do meio com dimensão L^2 .

Em três dimensões a Equação 2.4 é generalizada para:

$$\mathbf{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \cdot \nabla P \quad (2.5)$$

onde agora a permeabilidade \mathbf{K} é um tensor. Para o caso de um meio isotrópico a permeabilidade é um escalar e a Equação 2.5 é simplificada para:

$$\nabla P = -\frac{\mu}{K} \mathbf{u} \quad (2.6)$$

Para escoamentos com baixa velocidade, a lei de Darcy descreve corretamente o escoamento no meio poroso. Entretanto, com o aumento da velocidade, começam a aparecer discrepâncias entre os dados experimentais e resultados obtidos pela lei de Darcy [19].

Forchheimer [20] atribuiu essa discrepância a efeitos da energia cinética do fluido e sugeriu modificar a Equação de Darcy adicionando um termo ($\rho_f u^2$) representativo da energia cinética como apresentado na Equação 2.8, gerando a equação de Darcy-Forchheimer. Esse termo é capaz de levar em consideração o comportamento não linear do gradiente de pressão em relação à velocidade.

$$\nabla P = -\frac{\mu}{K} \mathbf{u} - \rho_f \frac{c_f}{K_1} \mathbf{u}^2 \quad (2.7)$$

onde c_f é uma constante adimensional, geralmente adotada como 0,55 [19], e K_1 [m] é o coeficiente de Forchheimer.

Não há acordo geral sobre a natureza do coeficiente K_1 para diferentes meios porosos. Uma grande variedade de abordagens e metodologias aplicadas são encontradas para o

cálculo de K_1 , tipicamente dependente da permeabilidade, porosidade e tortuosidade do meio. Uma revisão de diferentes fórmulas para calcular o coeficiente de Forchheimer pode ser encontrada em Sobieski [19].

O número de Reynolds é um número adimensional que expressa a razão entre as forças inercias e viscosas e pode ser calculado por:

$$Re = \frac{ud}{\nu} \quad (2.8)$$

onde, u é a velocidade média do fluido, ν é a viscosidade cinemática e d é uma distância característica da geometria.

Por analogia, foram definidos alguns números de Reynolds para escoamento em meios porosos e em grande parte, eles apenas substituem o parâmetro d por algum outro parâmetro. Alguns utilizam d_{10} , outros d_{50} , mas Collins [21] sugere que se use $(\frac{K}{\alpha})^{1/2}$. Ward [22] usou $K^{1/2}$ e plotando com um fator de fricção, também modificado, obteve uma curva, como mostrado na Figura 2.3 [2].

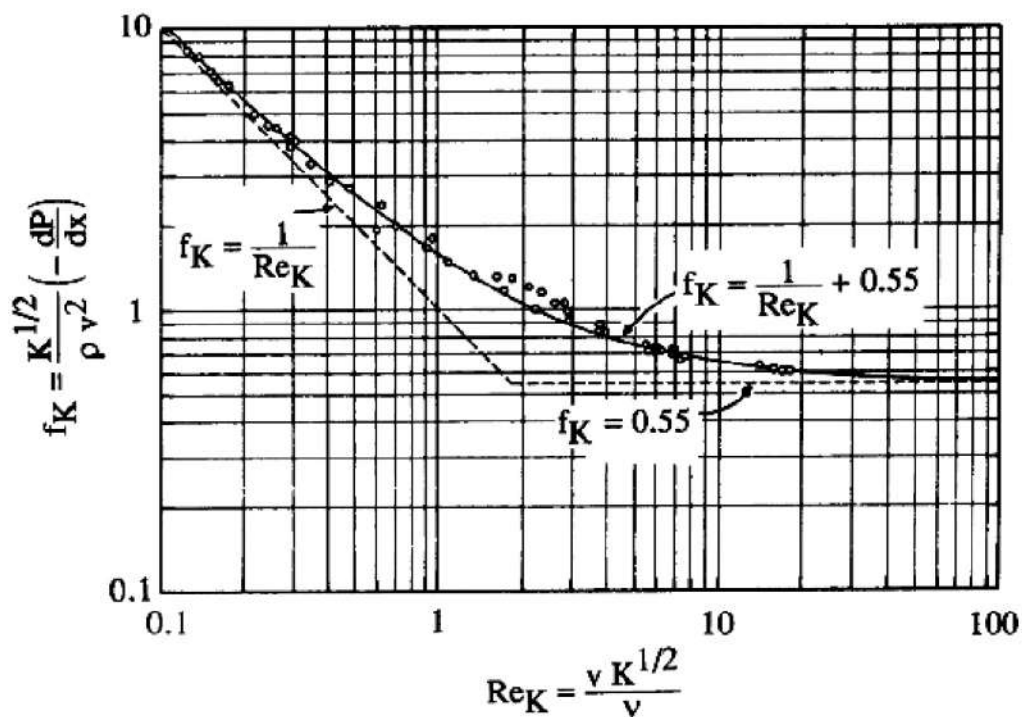


Figura 2.3: Relação entre o fator de fricção e o número de Reynolds para escoamento em meio poroso. Imagem extraída de Nield et al. [1].

Com essa curva tornou-se possível definir uma zona de transição em que a Lei de Darcy deixa de ser válida e se torna necessária a presença do termo de Forchheimer. Essa transição ocorre quando o número de Reynolds se encontra na faixa de 1 a 10, pois as forças inerciais passam a predominar [1].

2.3 Equações do movimento

A equação de Darcy representa uma forma simplificada da equação do movimento do fluido escoando através de um meio poroso. As equações governantes dos diversos fenômenos de transporte em mecânica dos fluidos podem ser escritas em um nível microscópico, onde as equações descrevem o fenômeno físico para um ponto dentro de uma fase particular em certo domínio.

Duas importantes equações microscópicas que governam o processo de escoamento são as equações de Navier-Stokes, que descrevem o transporte de momento de um fluido Newtoniano e incompressível, e a equação da continuidade [10].

A equação de conservação da quantidade de movimento, restrita ao caso incompressível e newtoniano, desprezando forças externas pode ser escrita como:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} + \nabla p - \mu \nabla^2 \mathbf{v} = 0 \quad (2.9)$$

onde \mathbf{v} é a velocidade, p é a pressão e μ é a viscosidade. O termo $\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ é o termo de acúmulo, $\rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$ é o termo convectivo e $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$ é o termo difusivo. O termo ∇p é a força externa responsável pelo transporte do fluido.

A equação da continuidade é dada por:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.10)$$

Como o fluido é incompressível, a equação da continuidade se torna:

$$\nabla \cdot (\mathbf{v}) = 0 \quad (2.11)$$

Assim, a equação da quantidade de movimento pode ser reescrita como:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot (\mathbf{v}\mathbf{v}) + \nabla p - \mu \nabla^2 \mathbf{v} = 0 \quad (2.12)$$

No meio poroso, a geometria da superfície que circunda a fase fluida, na qual as condições de contorno são definidas, é em geral muito complexa para ser descrita. Portanto, descrever o fenômeno de transporte em um meio poroso deve ser feito, na maior parte dos casos, em um nível macroscópico. Uma técnica para modelar o escoamento através de meios porosos é a técnica de média volumétrica das equações microscópicas [23].

2.4 Média volumétrica das equações de transporte

As equações de conservação de quantidade de movimento, massa e energia de misturas multifásicas podem ser obtidas por técnicas de promediação das equações de conservação que são válidas para cada uma das fases de forma isolada. Existem vários processos de promediação, usando médias amostral, temporal ou volumétrica [3, 24, 25].

A média volumétrica é adequada para escoamentos espacialmente não homogêneos, mas que o seu comportamento médio espacial é homogêneo. Este tipo de média é usada basicamente para meios porosos onde o volume representativo é muito menor que o volume total de interesse.

As equações macroscópicas governantes do escoamento através de meios porosos podem, então, ser obtidas pela média volumétrica das equações microscópicas correspondentes para um elemento de volume representativo (REV), como mostrado na Figura 2.4. O REV deve possuir dimensões grandes o suficiente para que se suponha um comportamento constante das propriedades dentro dele, mas ao mesmo tempo suficientemente pequenas para se evitar elevados gradientes de grandezas locais.

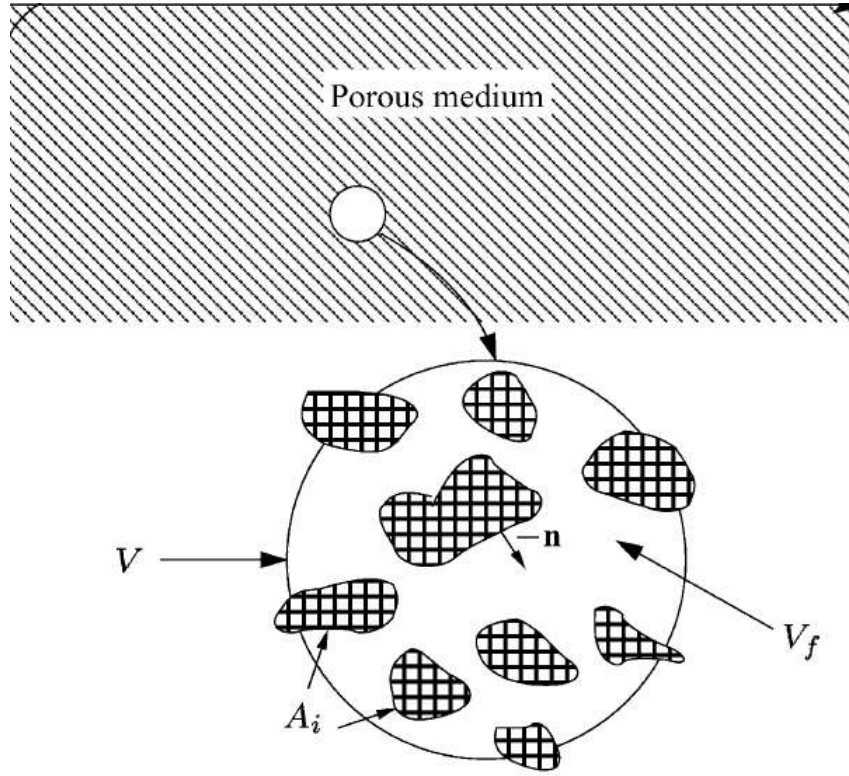


Figura 2.4: Volume elementar representativo em um meio poroso (REV) [3].

No estudo de fenômenos de transporte multifásicos, dois tipos de média volumétrica são comumente introduzidas [25]. A primeira é a média espacial volumétrica que é definida por

$$\langle \Psi \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_f} \Psi dV \quad (2.13)$$

onde Ψ é uma variável física qualquer, V_f representa o volume da fase fluida contida dentro do volume médio V . Entretanto, $\langle \Psi \rangle$ não é, necessariamente, igual a Ψ quando este último é uma constante. Então uma segunda média, a média intrínseca da fase é definida como:

$$\langle \Psi \rangle_f = \frac{1}{V_f} \int_{V_f} \Psi dV \quad (2.14)$$

que é mais representativa da condição na fase fluida. Essas duas médias são relacionadas através da porosidade, α , por:

$$\langle \Psi \rangle = \alpha \langle \Psi \rangle_f, \quad \alpha = \frac{V_f}{V} \quad (2.15)$$

Para se derivar as equações macroscópicas governantes, relações entre as médias vo-

lumétricas das derivadas e as derivadas das médias volumétricas são necessárias. Essas relações são apresentadas em diversos trabalhos ([25, 26, 27]) e são conhecidas como o teorema da média volumétrica local, e podem ser escritas como:

$$\langle \nabla \Psi \rangle = \nabla \langle \Psi \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_i} \Psi \mathbf{n} dS \quad (2.16)$$

$$\langle \nabla \cdot \Psi \rangle = \nabla \cdot \langle \Psi \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_i} \Psi \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.17)$$

$$\left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \Psi \rangle}{\partial t} \quad (2.18)$$

onde A_i é a área interfacial sólido-fluido e \mathbf{n} é o vetor normal orientado para fora do fluido em direção a fase sólida, como apresentado na Figura 2.4.

2.5 Equações de transporte acopladas a Darcy

Aplicando o operador de média volumétrica nas equações microscópicas, obtém-se a equação de movimento em meios porosos, cuja a dedução pode ser encontrada nos diferentes trabalhos de Bear [2], Bird [10], Whitaker [25]. Logo, para um fluido escoando em um meio poroso:

$$\frac{\partial(\alpha \rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla(\alpha p) + \nabla \cdot [\alpha \mu (\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T)] + \mathbf{M} \quad (2.19)$$

que, aplicando a relação de Dupuit-Forchheimer [1] $\mathbf{u} = \alpha \mathbf{v}$, torna-se:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\rho \mathbf{u} \mathbf{u}}{\alpha} \right) = -\nabla(\alpha p) + \nabla \cdot \left[\alpha \mu \left(\nabla \left(\frac{\mathbf{u}}{\alpha} \right) + \left(\nabla \left(\frac{\mathbf{u}}{\alpha} \right) \right)^T \right) \right] + \mathbf{M} \quad (2.20)$$

onde α é a porosidade do meio, ρ é a massa específica do fluido, \mathbf{v} é a velocidade intersticial, \mathbf{u} é a velocidade superficial, p é a pressão, μ é a viscosidade e \mathbf{M} é um termo que representa as forças interfaciais. Para um escoamento bifásico em leito fixo esta força é basicamente o arrasto, sendo dada por [28, 29]:

$$\mathbf{M} = -\alpha \beta (\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_s) \quad (2.21)$$

onde v_f é a velocidade do fluido e v_s é a velocidade do sólido. O valor de β depende da magnitude da velocidade relativa entre as fases. O valor do coeficiente beta para os casos em que $\alpha < 0,8$, pode ser calculada pela equação de Kozeny-Carmán [28]:

$$\beta = 180 \frac{(1 - \alpha)^2 \mu}{\alpha^2 (d_p \phi_p)^2} \quad (2.22)$$

onde d_p é o diâmetro volumétrico da partícula, isto é, o diâmetro da esfera de mesmo volume da partícula e ϕ_p é a esfericidade da partícula, que é definida como [30]:

$$\phi_p = \frac{\text{Area superficial da esfera de diametro } d_p}{\text{Area superficial da partícula}} \quad (2.23)$$

Para o caso do escoamento de um fluido através de um meio poroso, a força de interação entre as fases também é representada através do termo linear de Darcy na velocidade do fluido. Neste caso, a Equação (2.21) torna-se:

$$\mathbf{M} = -\alpha\beta\mathbf{v}_f = -\frac{\mu\alpha^2}{K}\mathbf{v}_f \quad (2.24)$$

onde K é a permeabilidade do meio poroso, em m^2 , dado pela relação:

$$K = \frac{\alpha^3 (d_p \phi_p)^2}{180(1 - \alpha)^2} \quad (2.25)$$

A Equação (2.24) pode ser representada em termos da velocidade superficial do fluido:

$$\mathbf{M} = -\alpha\beta\mathbf{v}_f = -\frac{\mu\alpha}{K}\mathbf{u}_f \quad (2.26)$$

Caso o escoamento seja suficientemente lento os termos inerciais e viscosos podem ser desprezados frente aos termos do gradiente de pressão e do arrasto. Assim, a equação (2.20) se torna:

$$\nabla(\alpha p) = -\mathbf{M} \quad (2.27)$$

Considerando a porosidade uniforme, obtém-se:

$$\nabla p = -\frac{\mu}{K}\mathbf{u} \quad (2.28)$$

que é a Equação de Darcy.

No presente trabalho a Equação (2.20) será implementada e o termo fonte \mathbf{M} será modelado pelo termo linear de Darcy (Equação (2.28)). A permeabilidade será calculada pela equação de Kozeny-Carmán (Equação (2.22)).

Capítulo 3

CFD e Pacote OpenFOAM

Este trabalho foi desenvolvido utilizando o OpenFOAM como ferramenta CFD, visto que é um *software* disponível com código aberto. Esta seção visa apresentar a definição do conceito de fluidodinâmica computacional e o *software* OpenFOAM com uma visão a nível de usuário e programador.

3.1 Método de Volumes Finitos

A Fluidodinâmica Computacional (*Computational Fluid Dynamics* – CFD) consiste na análise de sistemas envolvendo fluxo de fluidos, transferências de calor e massa, fenômenos associados a reações químicas, dentre outros, através da modelagem numérica, ou seja, recorrendo a meios computacionais [8].

O ponto de partida de qualquer método numérico é o modelo matemático, por exemplo, um conjunto de equações diferenciais parciais e condições de fronteira que regem o processo. O procedimento da resolução numérica consiste na discretização do domínio e das equações diferenciais parciais. Existem vários métodos sendo os mais conhecidos: Método das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Volumes Finitos (MVF) e Método dos Elementos Finitos (MEF).

O Método dos Volumes Finitos (MVF) é a técnica mais bem estabelecida e usada para propósitos gerais. O conceito chave usado durante toda a formulação de Volumes Finitos é o princípio de conservação de uma determinada quantidade física expressa pelas equações governantes sobre qualquer volume finito, também denominado volume de controle, que podem ser irregulares no tamanho e na forma. Assume-se que o domínio do problema está dividido num conjunto de volumes de controle, conforme ilustrado na Figura 3.1.

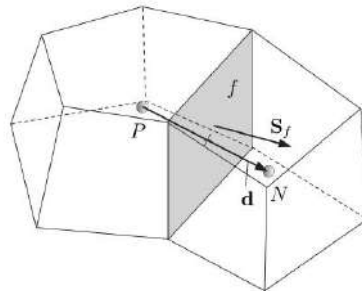


Figura 3.1: Representação de um volume de controle [4].

Os valores de uma variável ϕ são armazenados no centróide dos volumes de controle. As equações discretizadas da variável dependente ϕ são obtidas integrando a equação governantes sobre cada um dos volumes de controle no domínio.

Os valores das variáveis nas superfícies dos volume de controle são obtidos por interpolação em função dos valores no centro do volume de controle. As integrais de volume e de superfície são aproximadas usando fórmulas de quadratura apropriadas. Como resultado, obtém-se uma equação algébrica para cada volume de controle, na qual aparecem os valores das variáveis no nó em questão e nos nós vizinhos. Maiores detalhes sobre os métodos numéricos podem ser encontrados na literatura [31, 8, 32].

3.2 OpenFOAM

3.2.1 Definição

O OpenFOAM é um *software* de CFD gratuito e de código aberto que usa a linguagem de programação C++ [33, 34]. Ele tem aplicações prontas (*solvers*) que são projetados para resolver um problema específico na mecânica do contínuo. Uma das características do OpenFOAM é que novos *solvers* e utilitários podem ser criados pelos usuários, ou podem modificar os já existentes, com alguns pré-requisitos como conhecimento da física e técnicas de programação envolvidas. O OpenFOAM, é composto por solvers específicos para determinado problema físico, bibliotecas, utilitários de pré e pós-processamento e códigos fonte do programa [5]. A estrutura geral do OpenFOAM é mostrada na Figura 3.2.

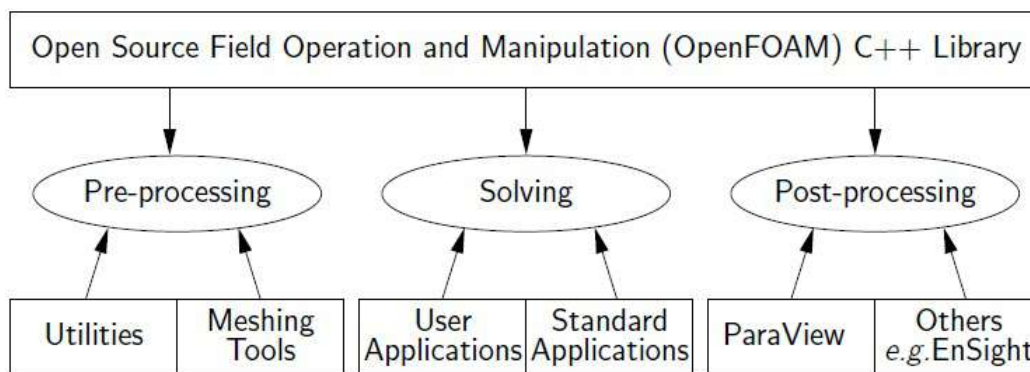


Figura 3.2: Visão geral da estrutura do OpenFOAM. Imagem extraída de [5]

O conceito geral das bibliotecas do OpenFOAM consiste em aproximar a linguagem da programação computacional à linguagem da modelagem matemática. No OpenFOAM, as equações diferenciais são representadas através de uma estrutura de código que se assemelha à descrição matemática utilizada na modelagem do problema físico. Desta forma, é possível fazer uma correspondência entre a implementação e a equação original. Outra grande vantagem associada ao OpenFOAM é a sua praticidade para aplicações CFD. No OpenFOAM, as variáveis do problema são definidas através de um objeto específico, que

caracteriza o conceito matemático implícito em cada tipo de variável.

3.2.2 A linguagem de programação no OpenFOAM

O sucesso da linguagem verbal e matemática é baseada na eficiência, especialmente em expressar conceitos abstratos. Por exemplo, no escoamento de um fluido, usa-se o termo campo de velocidade, que tem significado sem nenhuma referência a natureza do escoamento. O termo encapsula a ideia de movimento com direção e magnitude e o relaciona a outras propriedades físicas. Em matemática, pode-se representar o campo de velocidade por um símbolo, \mathbf{U} , e expressar certos conceitos usando símbolos, por exemplo, magnitude do campo de velocidade, $|\mathbf{U}|$. A vantagem da linguagem matemática é sua eficiência, o que faz possível expressar conceitos complexos com extrema clareza [5].

Os problemas que se deseja resolver na mecânica do contínuo são primeiro apresentados em linguagem verbal e em seguida como equações diferenciais parciais nas dimensões de espaço e tempo. As equações contêm os seguintes conceitos: escalares, vetores, tensores, e campos; além de álgebra de tensores e dimensões. A resolução dessas equações envolve procedimentos de discretização e algoritmos de solução.

A linguagem de programação C++ fornece um mecanismo – classes – para declarar tipos e operações associadas que são parte da linguagem matemática usada em ciência e engenharia. Por exemplo, a velocidade é um campo vetorial para o qual deveria existir, em um código objeto-orientado, uma classe *vectorField*. O campo de velocidade \mathbf{U} seria então um objeto da classe *vectorField*. Ainda, novas classes podem herdar ou receber propriedades de outras classes, por exemplo, um *vectorField* pode ser derivado de uma classe *vector* e de uma classe *Field*. A linguagem C++ fornece um mecanismo chamado template classes, de forma que a classe *Field<Type>* possa representar um campo de qualquer *<Type>*, como *scalar*, *vector* ou *tensor*. As características gerais da classe template são passadas para qualquer classe criada a partir deste template. Os templates e a herança reduzem a duplicação de código e criam hierarquias de classe que impõem uma estrutura ao código.

Uma vez declarados os campos de variáveis como objetos de classes de acordo com suas características, a sintaxe de escrita dos solvers se assemelha à solução das equações diferenciais parciais, e são escritas no código de forma sequencial.

3.2.3 Solvers

Os *solvers* são um conjunto de arquivos contendo a modelagem do problema físico e são organizados usando uma convenção padrão onde o arquivo principal de cada aplicação leva o mesmo nome do diretório onde está contido. O arquivo principal possui a extensão de código fonte em C++ e o nome da aplicação. Por exemplo, o código para uma aplicação (ou *solver*) chamada *newApp* geralmente reside em um diretório chamado *newApp* e o arquivo de código principal é chamado de *newApp.C*, como mostrado na Figura 3.3. O diretório deve conter também o subdiretório *Make*, contendo dois arquivos: *files* e *options*, cujas funções podem ser lidas no manual do programador [4].

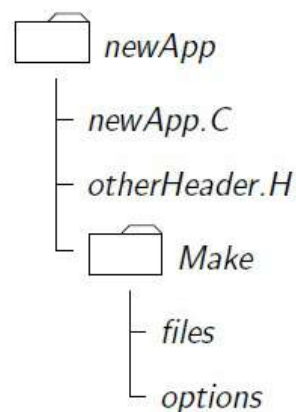


Figura 3.3: Estrutura de diretórios de um solver. Imagem extraída de [5]

Após a elaboração do código, as etapas de uma simulação podem ser divididas em: gerar a estrutura de diretórios necessária para efetuar a simulação, pois os solvers são utilizados em casos que exigem uma configuração apropriada de diretórios com os arquivos de simulação dentro dele; ações de pré-processamento, como geração de geometria e malha, definição de parâmetros e condições de contorno da simulação; solução numérica do problema; e análise dos resultados (pós-processamento).

3.2.4 Estrutura dos casos

Os *solvers* com códigos de interesse implementados são utilizados em casos que exigem uma configuração apropriada de diretórios com os arquivos de simulação dentro deles. No OpenFOAM todos os casos seguem uma estrutura de diretórios que contém os arquivos que armazenam as informações necessárias para que este seja resolvido pelo *solver*. Estes arquivos possuem as informações como a descrição da geometria, detalhes da malha, condições de contorno, parâmetros para os métodos numéricos e as propriedades físicas do problema. Os casos são configurados pela edição desses arquivos texto.

A estrutura de diretórios é dividida em três subdiretórios (diretório de tempo, *system* e *constant*) onde estão incluídos os arquivos com as informações que caracterizam cada caso, como apresentado na Figura 3.4.

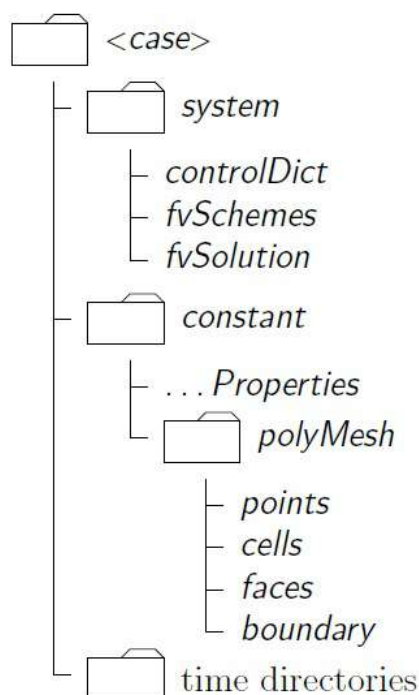


Figura 3.4: Estrutura de diretórios de um caso [5]. Imagem extraída de [5]

<Diretório de tempo>: contém os arquivos individuais de dados para os campos das variáveis tratadas no caso (por exemplo, campo de velocidade, pressão, tensão, etc.). O

nome associado ao diretório de tempo refere-se ao instante simulado no qual os dados são escritos.

<System>: Os arquivos contidos neste diretório estão associados ao procedimento de solução do caso. Devem existir pelo menos 3 arquivos neste diretório: o *controlDict*, o *fvSolution* e o *fvSchemes*. Dados relacionados ao controle de tempo, leitura e escrita dos dados de solução são configurados no dicionário *controlDict*. As especificações dos métodos de discretização de volumes finitos são feitas no dicionário *fvSchemes*, enquanto que a especificação dos esquemas de controle de algoritmos e tolerância são feitos no *fvSolution*.

<Constant>: deve conter os arquivos de propriedades físicas pertinentes ao caso, por exemplo, *transportProperties*. A descrição completa da geometria e da malha deve ser incluída no diretório *polyMesh*. O gerador de malha fornecido pelo OpenFOAM, *blockMesh*, gera malhas a partir de uma descrição especificada em um dicionário, *blockMeshDict*.

Informações mais detalhadas sobre a utilização do pacote OpenFOAM podem ser encontradas nos manuais disponíveis (*User's Guide [5]* e *Programmer's Guide [4]*).

No OpenFOAM atualmente há *solvers* para a simulação de meios porosos com reação, com fluidos incompressíveis, com escoamento multifásico, porém em nenhum deles a porosidade varia no espaço, o que é mais comum de ser encontrado, o que os torna muito limitados. Assim como, a força resistiva não é calculada em nenhum deles, ela é simplesmente estipulada pelo usuário e se torna esse valor em toda a simulação.

Em relação a estudos realizados em CFD sobre escoamento em meios porosos, Rahimi et al. [35] usaram o pacote de CFD FLUENT para estudar a queda de pressão em um separador poroso, obtendo um resultado que apresentou um desvio de 14% de resultados experimentais. Zhao et al. [36] estudaram a eficiência de separação através de meios porosos usando diversas geometrias e condições operacionais, fazendo uso do FLUENT. Os resultados foram importantes para demonstrar quais parâmetros operacionais influenciam na eficiência de separação. Pak et al. [37] com o auxílio do pacote DIGITAL Visual FORTRAN simularam o escoamento laminar de um fluido através de tubos porosos em fluxo

cruzado, como uma membrana tubular usada para Microfiltração, fazendo uso da Lei de Darcy e observou que aumentando o número de Reynolds melhorava-se a performance do processo. Janajreh et al. [38] analisaram a queda de pressão em um separador poroso usado em plantas de flash com multi estágios para dessalinização e com os resultados concluíram que de todos os parâmetros analisados a resistência inercial foi o que apresentou o maior efeito na queda de pressão.

Observa-se que é possível usar os pacotes CFD para fazer simulações de escoamentos em meios porosos, pois mostram concordância com experimentos. Contudo, é importante ressaltar que em grande parte das modelagens aplicadas ao meio poroso, a porosidade só é utilizada para calcular a força resistiva, não tendo funcionalidade nos outros termos da equação. No *solver* que foi desenvolvido, isso não ocorre, pois esta foi inserida em todos os termos da equação.

Capítulo 4

Metodologia

Nesta seção será abordada a implementação do código no OpenFOAM, gerando um *solver* capaz de prever escoamentos laminares de fluidos incompressíveis em meios porosos com a porosidade variando espacialmente, de forma randômica, no domínio. A Equação 2.20 será implementada e o termo fonte M será modelado pelo termo linear de Darcy. A permeabilidade será calculada pela equação de Kozeny-Carmán.

4.1 Desenvolvimento do solver

A implementação do *solver* foi dada a partir de um *solver* já existente, o *icoFoam*, que prevê o escoamento laminar e transiente de um fluido Newtoniano incompressível. As modificações foram a criação de novos campos e novas variáveis, a modificação da equação do momento e do acoplamento pressão-velocidade, que são apresentados ao longo desta seção.

O código do *solver* é escrito no arquivo principal *darcyPreferentialFoam.C*, conforme apresentado no Código 4.1. Dentro deste arquivo estão incluídos os arquivos de cabeçalho *.H*, sendo alguns gerais para todos os *solver* do OpenFOAM e outros específicos do *solver* desenvolvido que incluem as equações de transporte do fluido no meio poroso, o

Inicialmente o código começa declarando a biblioteca *fvCFD.H*, usada para acessar várias outras bibliotecas para o funcionamento do código. A biblioteca *setRootCase.H* é usada para testar a validade dos argumentos *argc* e *argv* da simulação. As bibliotecas *createTime.H* e *createMesh.H* são responsáveis pela criação de banco de dados para armazenar dados sobre o caso simulado e a estrutura da malha utilizada. O arquivo *initContinuityErrs.H* declara e inicializa o erro cumulativo da continuidade. No arquivo *createFields.H* é feita a declaração das variáveis e propriedades físicas específicas de cada caso.

Após a inclusão dos arquivos de cabeçalho é usado o comando *while (runTime.loop())*, que é um laço, para repetir as instruções de solução das equações ao longo do tempo, sendo interrompidas quando o tempo final especificado pelo usuário é atingido. Em seguida, o arquivo *readPISOControls.H* é incluído dando início ao laço para correção do acoplamento pressão-velocidade PISO.

As equações de transporte do meio poroso estão especificadas nos arquivos *UEqn.H* e *pEqn.H*. O código finaliza com a linha de comando *runTime.write()* que permite a saída dos resultados em arquivos nos diretórios de tempo do caso simulado.

4.1.1 Arquivos característicos do solver

Os arquivos característicos do *solver darcyPreferentialFoam* são os arquivos *createFields.H* que contém a declaração das variáveis e propriedades físicas características do escoamento estudado e arquivos *UEqn.H* e *pEqn.H* onde as equações para escoamento em meios porosos são implementadas.

No arquivo *createFields.H* as propriedades declaradas referentes ao meio poroso foram:

- Diâmetro de partícula (*dp*);
- Esfericidade de partícula (*phip*);
- Porosidade (*porosity*);
- Permeabilidade (*K*).

As variáveis dp e $phip$ do meio poroso e ρ para o fluido foram declaradas como escalares, se mantendo constantes em todo o domínio. Elas são especificadas pelo usuário no dicionário *transportProperties*, construído a partir da classe *IOdictionary* e *IOobject* que define os atributos de um objeto de modo a fornecer meios para entrada e/ou saída de dados (usualmente em arquivos). A viscosidade do fluido μ foi declarada como um campo escalar. Essas informações estão mostradas no Código 4.2.

Código 4.2: Declaração de variáveis. createFields.H

```

1   IOdictionary transportProperties
2   (
3       IOobject
4       (
5           "transportProperties",
6           runtime.constant(),
7           mesh,
8           IOobject::MUST_READ,
9           IOobject::NO_WRITE
10      )
11  );

13  dimensionedScalar dp(transportProperties.lookup("dp"));
14  scalar phip(readScalar(transportProperties.lookup("phip")));
15  dimensionedScalar rho(transportProperties.lookup("rho"));

17  volScalarField mu
18  (
19      IOobject
20      (
21          "mu",
22          runtime.timeName(),
23          mesh,
24          IOobject::MUST_READ,
25          IOobject::AUTO_WRITE
26      ),
27      mesh
28  );

```

A porosidade e permeabilidade receberam um tratamento diferenciado e por isso estão descritas nas subseções 4.1.2 e 4.1.3.

As variáveis resolvidas de escoamento foram pressão e velocidade, que são variáveis de campo e dependem de uma informação associada a cada ponto do espaço. Desta forma, a pressão é definida como *volScalarField* por ser tratar de uma grandeza escalar e, o campo de velocidade é definido como um *volVectorField*, por se tratar de uma grandeza vetorial. Foram declaradas duas velocidades e duas pressões para a simulação:

- Velocidade Superficial (U), usada no algoritmo de solução do escoamento no meio poroso;
- Velocidade intersticial (v), que será calculada pela relação de Dupuit-Forchheimer. Criada para ser analisada no pós-processamento;
- Pressão (P), inicializada para estipular as condições de contorno;
- Pressão modificada (p), é a pressão utilizada no acoplamento pressão-velocidade, sendo igual ao produto da pressão (P) e a porosidade.

Código 4.3: Declaração de variáveis.

```
2     volVectorField U
3     (
4         IObject
5         (
6             "U",
7             runtime.timeName(),
8             mesh,
9             IObject::MUST_READ,
10            IObject::AUTO_WRITE
11        ),
12        mesh
13    );

15    volVectorField v
16    (
17        IObject
18        (
```

```

19         "v",
20         runTime.timeName(),
21         mesh,
22         IOobject::NO_READ,
23         IOobject::AUTO_WRITE
24     ),
25     U/porosity
26 );

28 volScalarField P
29 (
30     IOobject
31     (
32         "P",
33         runTime.timeName(),
34         mesh,
35         IOobject::MUST_READ,
36         IOobject::AUTO_WRITE
37     ),
38     mesh
39 );

41 volScalarField p
42 (
43     IOobject
44     (
45         "p",
46         runTime.timeName(),
47         mesh,
48         IOobject::NO_READ,
49         IOobject::AUTO_WRITE
50     ),
51     P*porosity,
52     P.boundaryField().types()
53 );

```

A Equação 2.20 foi ,então, incluída no código. Para tal, o último termo da equação $(\nabla \cdot [\alpha\mu(\nabla(\frac{\mathbf{u}}{\alpha}) + (\nabla(\frac{\mathbf{u}}{\alpha})^T)])$ teve de ser modificado, pois devido à variação da porosidade com a posição ela não pode deixar o gradiente, gerando assim, um problema na declaração do termo. Na modificação, o termo foi desmembrado em outros quatro termos, fazendo uso da regra do quociente para as derivadas. A Equação 2.20, foi então, dividida pela massa específica, graças a essa divisão o valor de p será sempre igual a Pressão dividida pela massa específica, e sua unidade será m^2/s^2 .

O método numérico de solução adotado é a discretização através do método de volumes finitos [32]. O termo da derivada temporal é implementado pelo operador **ddt**, o cálculo do divergente pelo operador **div** usando o fluxo ϕ , os termos fontes são incluídos pelo operador **Sp** e o laplaciano, pelo operador **laplacian**.

Alguns outros operadores foram utilizados na implementação, por necessidades matemáticas. O operador **linearInterpolate** faz a interpolação de uma variável para a face, necessário pois quando se resolve um divergente as propriedades devem estar na face. Outro operador utilizado foi o **&**, que faz o cálculo do produto escalar.

Código 4.4: UEqn.H.

```

1 fvVectorMatrix UEqn
2     (
3         fvm::ddt (U)
4         + fvm::div(phi/linearInterpolate(porosity), U)
5         + fvm::Sp(beta/rho,U)
6         - fvm::laplacian(mu/rho, U)
7         + fvc::Sp(fvc::laplacian(mu/(rho*porosity), porosity), U)
8         - (fvc::grad(U) & fvc::grad(mu/rho))
9         + (fvc::Sp(1.,U) & fvc::grad(mu/(porosity*rho))*fvc::grad(porosity
10            )))
11    );
12 solve(UEqn == -fvc::grad(p));

```

4.1.2 Heterogeneidade do meio poroso

A porosidade foi declarada como um *volScalarField* para que assim fosse possível que tivesse um valor diferente em cada célula. Para atribuir um valor randômico nas células foi necessário um tratamento especial a essa variável. Para que esses valores não fugissem da realidade eles não poderiam apresentar uma grande variação entre uma célula e outra e era desejada que o usuário controlasse quais seriam os valores limites do intervalo da porosidade.

Para isso foram declaradas duas outras variáveis: o *volScalarField* *porosity_{med}* que representa o valor médio da porosidade, que é inicializada pelo usuário no dicionário de tempo 0, atribuindo assim valores para as células; e o *scalar* *porosity_{var}*, que terá seu valor atribuído pelo usuário no dicionário *transportProperties* e que representa a variação máxima que o valor da porosidade pode ter em comparação à porosidade média em cada célula, conforme o Código 4.5.

Código 4.5: Declaração dos parâmetros para a porosidade. createFields.H.

```
1 scalar porosity_var
2 (
3     readScalar(transportProperties.lookup("porosity_var"))
4 );

6 volScalarField porosity_medio
7 (
8     IOobject
9     (
10        "porosity_medio",
11        runtime.timeName(),
12        mesh,
13        IOobject::MUST_READ,
14        IOobject::AUTO_WRITE
15    ),
16    mesh
17 );
```

A porosidade é então inicializada em um laço for que faz uso de $porosity_{med}$, $porosity_{var}$ e de uma função de C++ que gera números pseudo aleatórios, como apresentado no Código 4.6.

Código 4.6: Campo de porosidade randômico. createFields.H.

```

1   volScalarField porosity
2   (
3       IObject
4       (
5           "porosity",
6           runTime.timeName(),
7           mesh,
8           IObject::READ_IF_PRESENT,
9           IObject::AUTO_WRITE
10      ),
11      mesh
12  );

14      std::srand(time(NULL));

16      for (int i=0; i<=porosity.internalField().size(); i++)
17      {
18          int x = rand() % 101;
19          porosity[i]= 2*porosity_var*x/100 + porosity_med[i]-
20                  porosity_var ;

```

Para se fazer uso de uma função de C++ em um código OpenFOAM deve-se usar *std::* antes do uso da função, como é feito na linha 95 do código 7, que por padrão retira informações da hora do sistema para a criação de números randômicos com o uso de *srand(time(NULL))*. Dentro do laço será inicializada a porosidade célula por célula, fazendo uso da equação 5.1.

$$porosity = 2 \frac{porosity_{var} * x}{100} + porosity_{med} - porosity_{var} \quad (4.1)$$

A permeabilidade está incluída no coeficiente β ($\beta = \mu\alpha/K$) conforme o Código 4.7.

A permeabilidade foi calculada pela equação de Kozeny-Carman, segundo a Equação 2.25.

Código 4.7: Declaração do coeficiente β . createFields.H.

```
1   volScalarField beta
2   (
3       IOobject
4       (
5           "beta",
6           runtime.timeName(),
7           mesh,
8           IOobject::NO_READ,
9           IOobject::AUTO_WRITE
10      ),
11      (180*sqr(1-porosity))*mu/(pow(porosity,2)*sqr(dp*phip))
12  );
```

4.2 Estudo de casos

No presente trabalho foram simulados quatro casos para análise da modelagem implementada. Todos fizeram uso da mesma geometria, malha e condições de contorno, diferindo apenas na distribuição do campo de porosidade.

A geometria usada foi um canal retangular com 1 metro de comprimento, 0,1 metro de largura e 0,01 metro de profundidade conforme mostrado na figura 4.1.

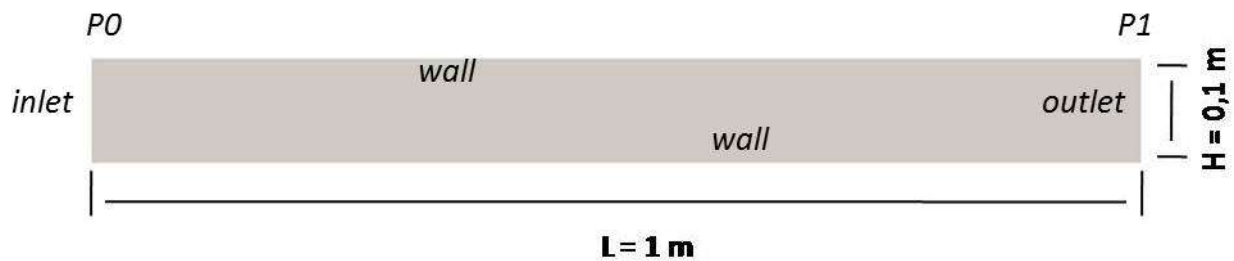


Figura 4.1: Geometria das simulações

As propriedades do fluido que escoar foram arbitradas para simular o escoamento da água à temperatura ambiente, com valores de massa específica igual a 1000 kg/m^3 e viscosidade igual $1,002 \times 10^{-3} \text{ kg/(m.s)}$. Como condição de contorno o domínio foi submetido a um gradiente de pressão de $400 \times 10^3 \text{ Pa/m}$ (o fluido escoar da esquerda para a direita). Esse gradiente foi arbitrado, pois gera valores de velocidade que estão dentro do regime de Darcy, segundo o gráfico da Figura 2.3.

As partículas foram consideradas esféricas ($\phi = 1$). O diâmetro de partícula varia de acordo com o meio estudado e para os casos deste trabalho foi utilizado o valor de $3 \times 10^{-4} \text{ m}$, valor médio encontrado na literatura para solos ([39]).

Em relação ao campo de porosidade os casos foram divididos como a seguir:

Caso 1: Meio homogêneo. Porosidade contante e igual em todo o domínio com o valor arbitrado de 0,35.

Caso 2: Meio heterogêneo com o campo de porosidade randômico (Figura 4.2) variando na faixa de 0,3 a 0,4.

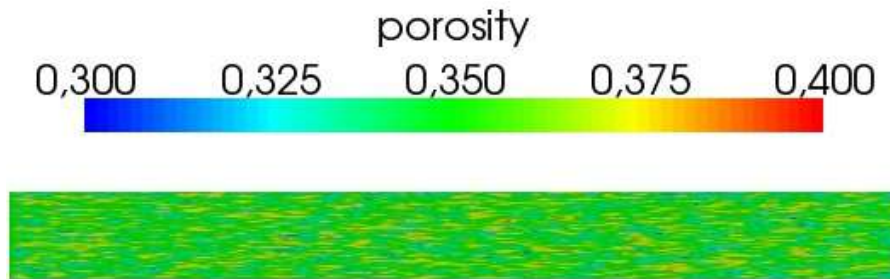


Figura 4.2: Campo de porosidade heterogêneo.

Caso 3: Meio heterogêneo com caminho preferencial (Figura 4.3). No domínio a porosidade varia de 0,3 a 0,4, exceto em alguns volumes da parte central da geometria, onde varia de 0,4 a 0,5, originando um caminho preferencial.

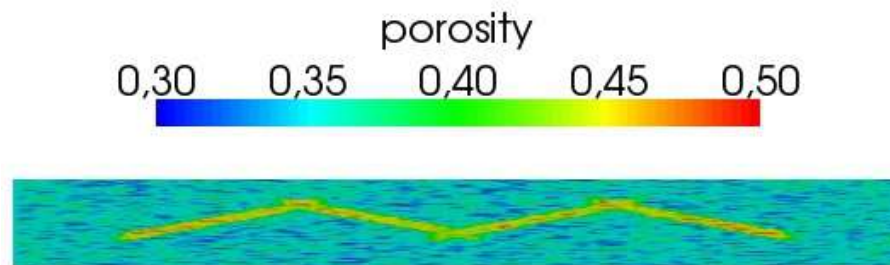


Figura 4.3: Campo de porosidade heterogêneo com caminho preferencial.

Caso 4: Meio heterogêneo com caminho preferencial na região da parede (Figura 4.4). As variações da porosidade são as mesmas que no caso 3 (0,3 a 0,4 no domínio e 0,4 a 0,5 no caminho preferencial).

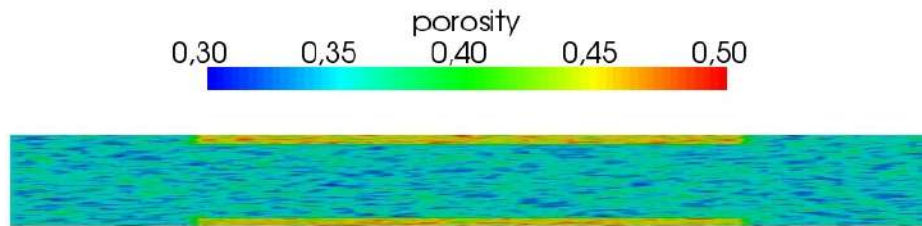


Figura 4.4: Campo de porosidade heterogêneo com caminho preferencial nas paredes.

Duas malhas foram feitas, para um processo de convergência com dois tamanhos analisados. As malhas são hexaédricas, uma com 5000 elementos e outra com 10000. O teste de convergência de malha para o Caso 1, onde não há aleatoriedade da porosidade, foi feito pela comparação dos resultados das simulações com o analítico, já para os outros casos foram feitas dez simulações e calculadas a média e o desvio padrão da vazão para ambas as malhas. Em relação aos parâmetros da simulação, o passo de tempo utilizado foi de 0,01 segundos, a tolerância nos resíduos das equações discretizadas para convergência foi de 10^{-10} para a pressão e 10^{-8} para a velocidade. O tempo total de simulação foi de 1 segundo, tempo suficiente para alcançar o estado estacionário em todos os casos.

Capítulo 5

Resultados

Os resultados estão apresentados nesse capítulo de acordo com o estudo de caso.

5.1 Caso 1

Os resultados obtidos nas simulações (malhas de 5000 e 10000 elementos) apresentaram o mesmo valor de velocidade superficial (0,0202553 m/s) constante por todo o domínio, indicando uma convergência de malha já alcançada. Esse valor foi comparado com o resultado analítico da equação de Darcy, (Equação 2.1) para um escoamento unidirecional em um meio homogêneo, como apresentado na Equação 5.1.

$$\nabla p = -\frac{\mu}{K}u = -\frac{\beta}{\alpha}u \Rightarrow -400 \times 1000 = -\frac{6911760}{0,35}u \Rightarrow u = 0,0202553m/s \quad (5.1)$$

Para verificar a solução calculou-se as vazões de entrada e de saída para analisar a conservação de massa e os valores obtidos foram de $2,02553 \times 10^{-5} m^3/s$ na entrada e na saída, apresentando valores sem discordância, em ambas as simulações.

Na Figura 5.1 pode-se visualizar o perfil de pressão no domínio. Por se tratar de um escoamento no regime de Darcy em um meio com a permeabilidade constante, esperava-se que a queda de pressão fosse linear. Esse comportamento pode ser observado pelo gráfico

Pressão x Comprimento da Figura 5.2, que mostra o comportamento da pressão sobre uma linha traçada da entrada do domínio até sua saída (Figura 5.3). A linha foi traçada entre os pontos (0 , 0,05) e (1 , 0,05)

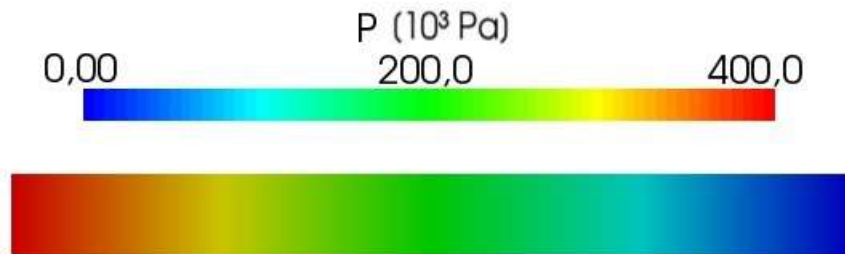


Figura 5.1: Campo de pressão no escoamento homogêneo.

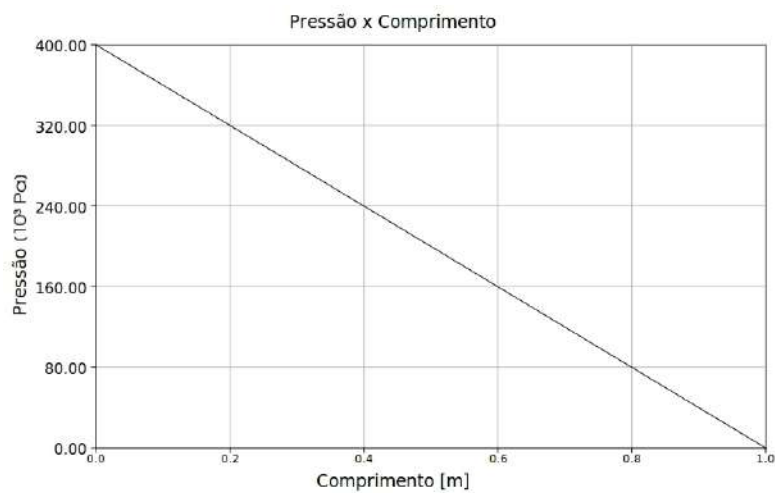


Figura 5.2: Queda de pressão no escoamento homogêneo.



Figura 5.3: Linha traçada no domínio para análise.

5.2 Caso 2

No segundo caso estudado, em que a porosidade varia no domínio entre 0,3 e 0,4 de forma aleatória, foram feitas simulações com as mesmas malhas de 5000 e 10000 elementos

e o critério de convergência foi a análise das vazões de entrada. Como nesse caso os resultados mudam de simulação para simulação, devido às diferentes distribuições da porosidade, foram feitas dez simulações em cada malha e com os valores encontrados para as vazões, foram calculados a média e o desvio padrão dos resultados da vazão. Na Tabela 5.1 são apresentados os valores das médias das vazões e seus desvios padrão calculados.

Tabela 5.1: Resultados para as vazões na entrada e na saída.

<i>n^o de elementos</i>	<i>média da vazão [m³/s]</i>	<i>desvio padrão [m³/s]</i>
5000	2,0334e-5	1,1353e-7
10000	2,0280e-5	8,0038e-8

Ambas as malhas apresentam média e desvio padrão semelhantes compreendendo a mesma faixa. O mais importante para este caso é verificar que o resultado do caso anterior está dentro das duas faixas de vazão, pois a diferença entre os casos é a distribuição da porosidade no domínio, enquanto em um ela é constante e igual a 0,35, em outro ela varia, mas a sua média é 0,35.

Diferente do Caso 1, o Caso 2 apresenta uma queda de pressão (P) não linear, com flutuações devido a variação espacial da porosidade e, conseqüentemente da velocidade. Quem apresenta uma queda linear é a pressão modificada ($p = \alpha P$). Isso ocorre, porque os termos viscosos e inerciais podem ser desprezados no presente caso, e a Equação 2.27 é válida. O perfil da pressão e o comportamento da pressão e da pressão modificada pela extensão da mesma linha usada no Caso 1 (Fig. 5.3), podem ser observados nas Figuras 5.4, 5.5 e 5.6, respectivamente.

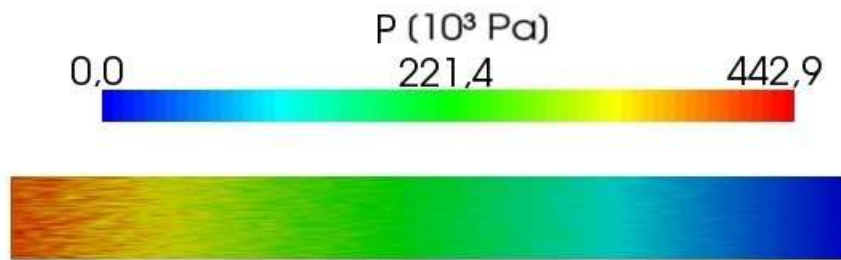


Figura 5.4: Campo de pressão no escoamento heterogêneo.

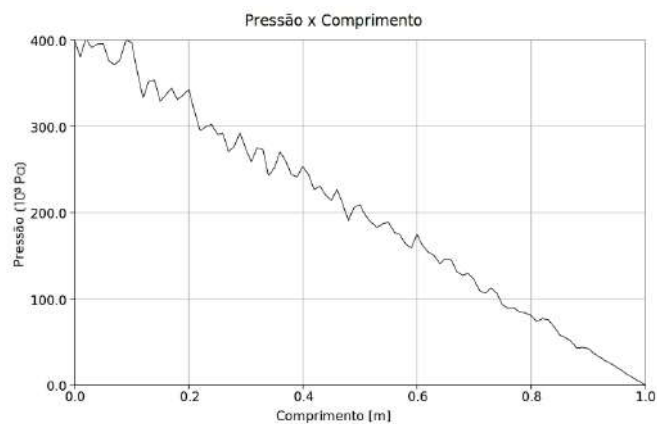


Figura 5.5: Comportamento da pressão na extensão da linha

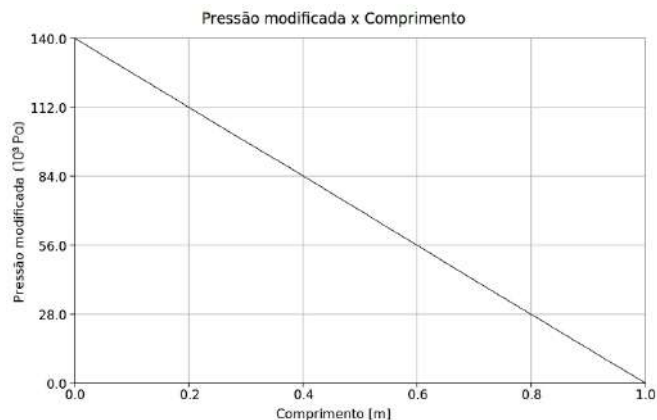


Figura 5.6: Comportamento das pressão modificada na extensão da linha

O comportamento das velocidades intersticial e superficial é melhor entendido se analisado em conjunto com a porosidade. As Figuras 5.7, 5.8 e 5.9 mostram as variações dessas três grandezas.

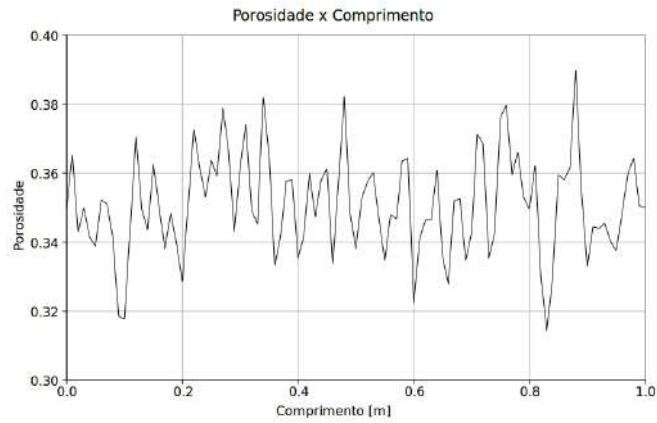


Figura 5.7: Porosidade no escoamento heterogêneo, sendo analisada na linha traçada no domínio.

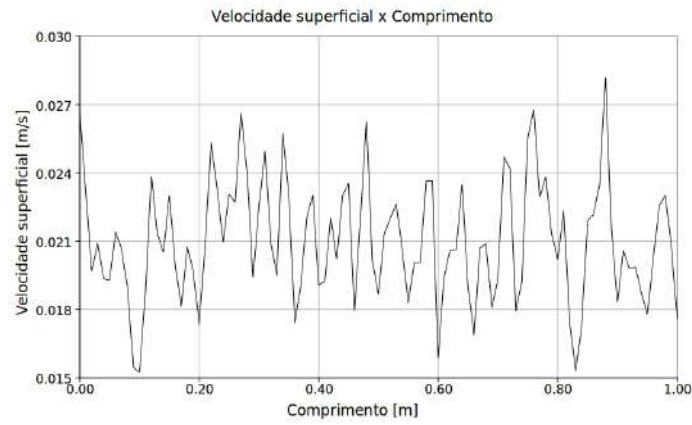


Figura 5.8: Velocidade superficial no escoamento heterogêneo, sendo analisada na linha traçada no domínio.

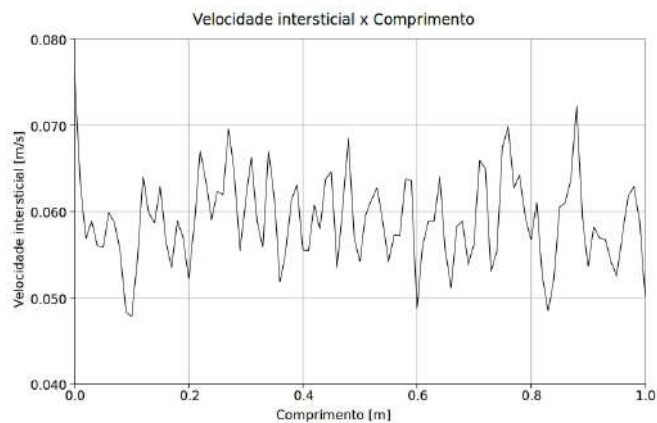


Figura 5.9: Velocidade intersticial no escoamento heterogêneo, sendo analisada na linha traçada no domínio.

Podemos ver que, quando a porosidade apresenta picos, o mesmo fazem as velocidades superficial e intersticial.

5.3 Caso 3

Nesse caso a porosidade varia entre 0,3 e 0,4 em todo o domínio, com exceção da formação em M na região central, de caminho preferencial ao escoamento, onde a mesma varia entre 0,4 e 0,5. Para este caso foi feito o mesmo processo de convergência de malha que no caso anterior, obtendo os resultados da Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Resultados para as vazões na entrada e na saída.

n^0 de elementos	média da vazão [m^3/s]	desvio padrão [m^3/s]
5000	2,2851e-5	7,0263e-8
10000	2,2868e-5	5,2325e-8

Assim como no Caso 2 a pressão (P) apresenta comportamento não linear, enquanto a pressão modificada varia linearmente (Figuras 5.10, 5.12 e 5.11, respectivamente).



Figura 5.10: Campo de pressão no escoamento heterogêneo com caminho preferencial.

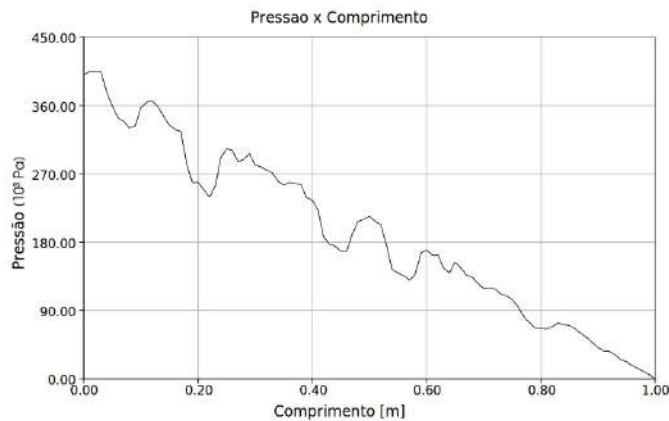


Figura 5.11: Comportamento da pressão na extensão da linha.

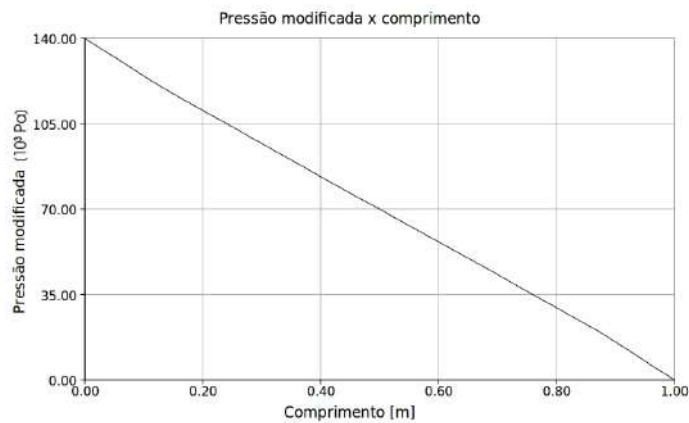


Figura 5.12: Comportamento da pressão modificada na extensão da linha.

Observa-se que a pressão (P) apresenta valores maiores que o imposto pela condição de contorno na entrada (400). Isso ocorre porque, neste caso em particular, há a presença do caminho preferencial. Analisando a porosidade (Figura 5.13), pode-se ver que quando o escoamento passa por um pico de porosidade, a pressão cai bastante, mas ao voltar a região de menor porosidade a pressão aumenta, o que é explicado, pela maior dificuldade de se atravessar tal região. Nas Figuras 5.14 e 5.15, tem-se o comportamento das velocidades e pode-se ver como fica evidente o aumento das mesmas quando passam por uma região de alta porosidade. Nas Figuras 5.16 e 5.17, está ilustrado o desenvolvimento das velocidades no domínio, representado pelos seus perfis.

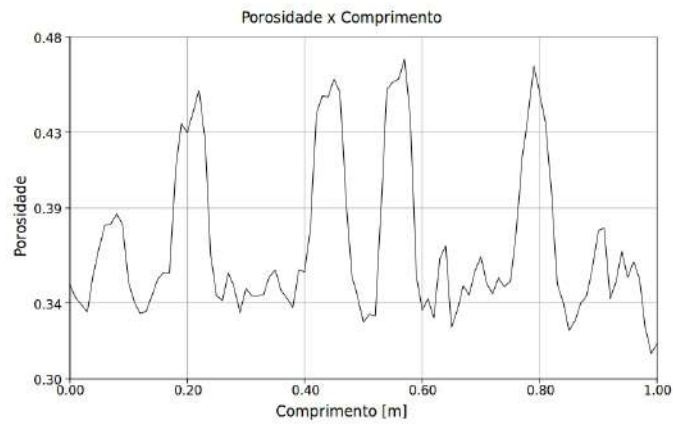


Figura 5.13: Porosidade no escoamento heterogêneo com caminho preferencial, sendo analisada na linha traçada no domínio.

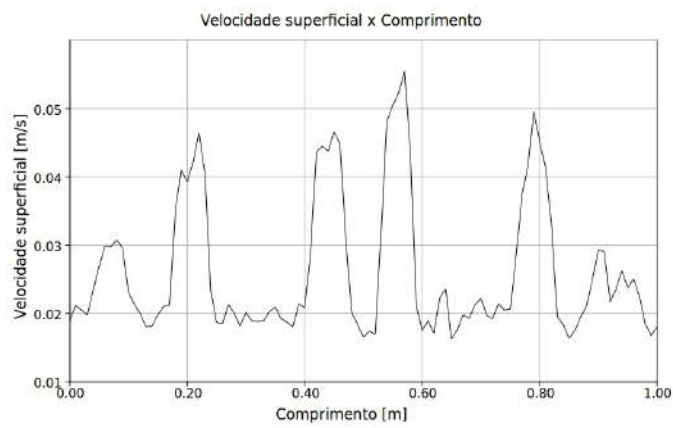


Figura 5.14: Velocidade superficial no escoamento heterogêneo com caminho preferencial, sendo analisada na linha traçada no domínio.

5.4 Caso 4

Assim como no caso 3, neste caso a porosidade varia de 0,3 a 0,4 no domínio, com exceção do caminho preferencial que, desta vez, se encontra nas paredes. Os resultados do teste de convergência de malha são mostrados na tabela 5.3.

Tabela 5.3: Resultados para as vazões na entrada e na saída.

n° de elementos	média da vazão [m^3/s]	desvio padrão [m^3/s]
5000	2,3703e-5	9,1545e-8
10000	2,3747e-5	4,9464e-8

Para este caso o perfil de velocidade superficial é mostrado na figura 5.18, assim como os vetores (Figura 5.18) e como esperado pode-se observar que ela encontra seu pico no caminho preferencial, na parede do duto.

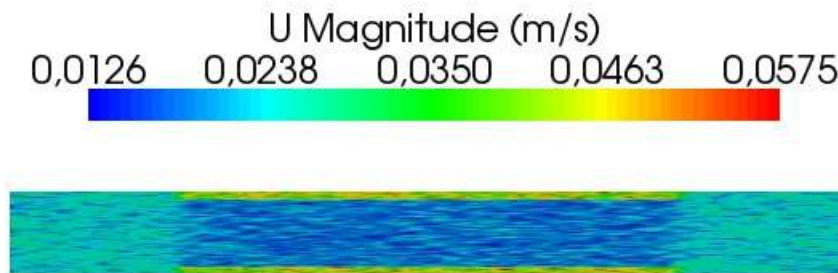


Figura 5.18: Perfil da velocidade.

Para este caso o perfil de velocidade superficial é mostrado na figura 5.18 e como esperado pode-se observar que ela encontra seu pico no caminho preferencial, na parede do duto.

Para este caso foram utilizadas duas linhas paralelas ao eixo y, por ser mais interessante a análise nessa direção. A linha A corta o domínio antes do início do caminho preferencial, entre os pontos (0,1 , 0) e (0,1 , 0,1), ou seja, por toda a linha a porosidade está no intervalo de 0,3 a 0,4. Já a linha B cruza o domínio no meio do deslocamento no eixo x, entre os pontos (0,5 , 0) e (0,5 , 0,1), como apresentado na figura 5.20.

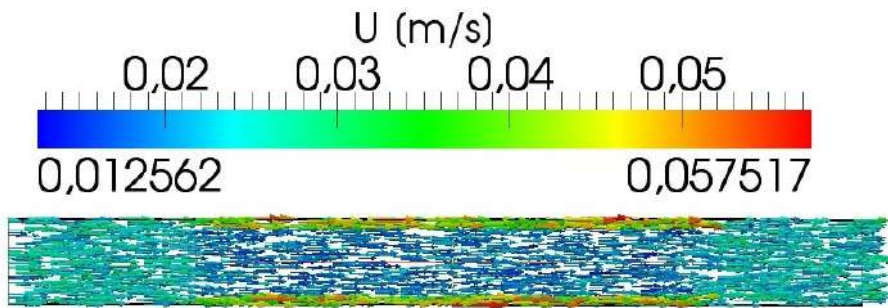


Figura 5.19: Campo vetorial da velocidade.

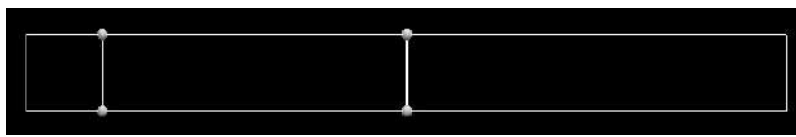


Figura 5.20: Linhas A e B traçadas para análise, respectivamente.

Essas linhas foram utilizadas para fazer a análise da velocidade superficial e da porosidade. Na linha B podemos observar pelas Figuras 5.21 e 5.22 que o comportamento de ambas é similar. O comportamento da velocidade na linha A é apresentado na figura 5.23.

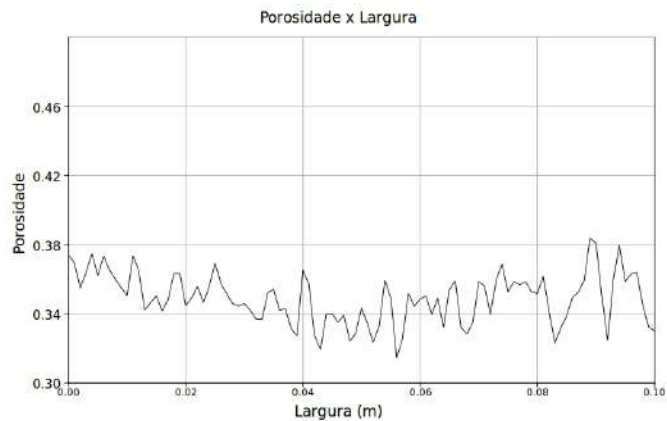


Figura 5.21: Comportamento da porosidade na linha A.

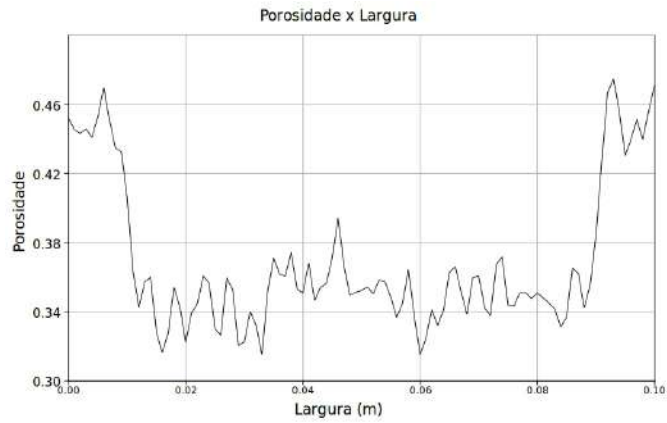


Figura 5.22: Comportamento da porosidade na linha B.

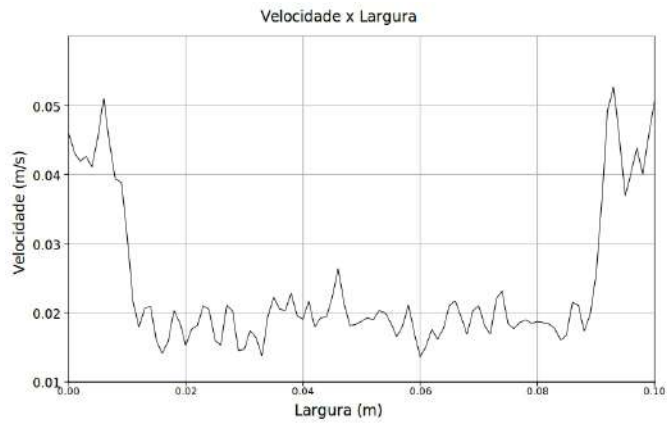


Figura 5.23: Comportamento da velocidade superficial na linha B

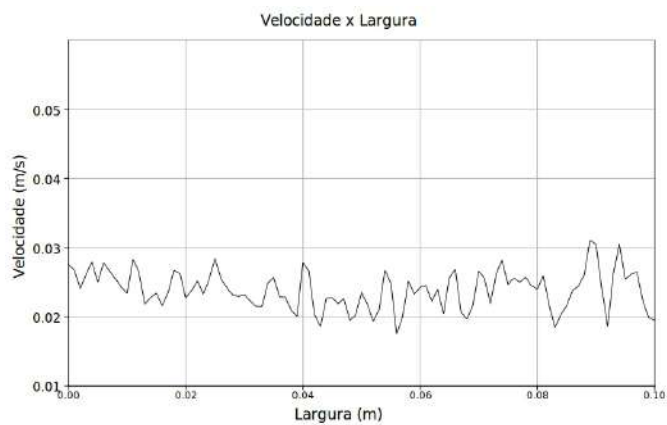


Figura 5.24: Comportamento da velocidade superficial na linha A

Ao se analisar os dois perfis de velocidade pode-se observar que, quando há caminho preferencial (reta B), há picos mais acentuados de velocidade onde a porosidade é maior,

enquanto que no início do escoamento, onde não caminho preferencial (reta A), há picos, porém menores se comparados com os da reta B. Isso se dá pela conservação de massa que faz com que a vazão seja constante por todo o domínio.

Capítulo 6

Conclusões e Sugestões

6.1 Conclusões

Neste trabalho foi proposto a implementação de um solver para escoamento de fluidos Newtonianos através de meios porosos fraturados no pacote CFD OpenFOAM. Foram apresentadas as justificativas para escolha deste pacote, juntamente com a metodologia utilizada para a resolução escoamentos com a porosidade variando espacialmente e com a força resistiva sendo dependente desta. Foi feita também uma breve descrição do pacote OpenFOAM.

Foi implementada a equação de Navier-Stokes acoplada a Darcy e a equação de Kozeny-Carmán para o cálculo do termo da força resistiva. O uso do pacote OpenFOAM tornou a implementação mais fácil de ser feita, mais abrangente e mais acessível, tornando possível sua modificação para casos ainda mais complexos no futuro.

Com a metodologia implementada foi possível observar o comportamento da velocidade devido a variação da porosidade e como essa variação afeta a queda pressão, fazendo com que esta tenha um comportamento não-linear. Em especial os casos com os meios fraturados demonstraram como o fluido tende a ir pelas fraturas preterindo, assim, o restante do meio.

6.2 Sugestões para trabalhos futuros

Algumas sugestões para continuação do presente trabalho são propostas.

- Pode-se indicar a modificação na modelagem para se prever o escoamento de fluido compressível, tal como o gás natural em reservatórios de petróleo;
- A implementação de uma permeabilidade anisotrópica.;
- A adição do termo de Forchheimer, para ser possível se simular escoamentos a velocidades maiores.

Referências Bibliográficas

- [1] D.A. Nield e A. Bejan. *Convection in Porous Media*. Springer, New York, 3 edition, 2006.
- [2] J. Bear. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Dover Publications, New York, 1972.
- [3] M. Chandesris e D. Jamet. Boundary conditions at a planar fluid-porous interface for a poiseuille flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49:2137–2150, 2006.
- [4] OpenFOAM. *Programmer's Guide*. Open CFD Limited, 2010.
- [5] OpenFOAM. *User Guide*. Open CFD Limited, 2010.
- [6] A. Carminati, A. Kaestner, P. Lehmann, e H. Fluhler. Unsaturated water flow across soil aggregate contacts. *Advances in Water Resources*, 31:1221–1231, 2008.
- [7] D. Crandall, G. Ahmadi, e D. H. Smith. Computational modeling of fluid flow through a fracture in permeable rock. *Transport in Porous Media*, 84:493–510, 2010.
- [8] C. R. Maliska. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. LTC, Rio de Janeiro, 2004.
- [9] K. Yazdchi, S. Srivastava, e S. Luding. Microstructural effects on the permeability of periodic fibrous porous media. *International Journal of Multiphase Flow*, 37:956–966, 2011.
- [10] Bird.R. B., Stewart W., e E. N. Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley and Sons, Inc., Rio de Janeiro, 2002.

- [11] A. Fiori e Jankovic. On preferential flow, channeling and connectivity in heterogeneous porous formations. *International Association for Mathematical Geosciences*, 44:133–145, 2011.
- [12] C. David. Geometry of flow paths for fluid transport in rocks. *Journal of Geophysical Resources*, 1992.
- [13] C. Park, C. Beyer, S. Bauer, e O. Kolditz. A study of preferential flow in heterogeneous media using random walkparticle tracking. *Geosciences Journal*, 12:285–297, 2008.
- [14] V. Rasoulli e A. Hosseinian. Correlations developed for estimation of hydraulic parameters of rough fractures through the simulation of jrc flow channels. *Rock Mechanics and Rock Engineering*, 44:447–461, 2011.
- [15] G. Yang, Ng. G. W. Cook, e L. R. Myer. Analysis of preferential flow paths using graph theory. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science And Geomechanics Abstracts*, 30:1423–1429, 1993.
- [16] F. Baratelli, M. Giudici, e C. Vassena. Single and dual-domain models to evaluate the effects of preferential flow paths in alluvial sediments. *Transport in Porous Media*, 87:465–484, 2010.
- [17] Y. Gautier e B. Noetinger. Preferential flow-paths detection for heterogeneous reservoirs using a new renormalization technique. *Transport in Porous Media*, 26:1–23, 1997.
- [18] H. Darcy. Les fontaines publiques de la ville de dijon. *Dalmont*, 1856.
- [19] W. Sobieski e Trykozko A. Darcy and forchheimer laws in experimental and simulation studies of flow through porous media. 2008.
- [20] P. Forchheimer. *Wasserbewegung durch Boden*. Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure, 1901.
- [21] R. E. Collins. Flow of fluids through porous materials. 1961.

- [22] J. C. Ward. Turbulent flow in porous media. 1964.
- [23] J. L. Lage, M. J. Lemos, e D. Nield. *Transport Phenomena in Porous Media II*. Pergamon, 2002.
- [24] S. Whitaker. *The method of Volume Averaging*. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [25] S. Whitaker. Flow in porous media i: A teorical derivation of darcy's law. *Transport in Porous Meida I*, pages 3–25, 1986.
- [26] J. C. Slattery. *Momentum, Energy and mass tranfer in continua*. McGraw-Hill, New York, 1972.
- [27] K. Vafai e R. Thiyagarja. Analysis of flow and heat transfer at the interface region of a porous media. *Transport in Porous Meida I*, 30:1391–1405, 1987.
- [28] D. Gidaspow. Multiphase flow and fluidization. *Academic Press, San Diego*, 1994.
- [29] D. Gidaspow, J. Jung, e R. K. Singh. Hydrodynamics of fluidization using kinetic theory: an emerging paradigm. *Powder Technology*, 148:123–141, 2004.
- [30] G. Massarani. *Fluidodinâmica em Sistemas Particulados*. E-papers, Rio de Janeiro, 2002.
- [31] H. K. Versteeg e W. Malalasekera. *An introduction to computational fluid dynamics - The finite volume method*. Longman Scientific and Technical, Reino Unido, 1995.
- [32] H. Jasak. Error analysis and estimation for definite volume method with applications to fluid flow, 1996.
- [33] B. Stroustrup. *The C++ Programming Language*. ATeT, 1997.
- [34] D. Yang. *C++ and Object Oriented Numeric Computing for Scientists and Engineers*. Springer-Verlag, Nova York, 2000.
- [35] R. Rahimi e D. Abbaspour. Determination of pressure drop in wire mesh mist eliminator by computer fluid dynamics. 2007.

- [36] J. Zhao e B. Jin. Study of the separation efficiency of a demister vane with response surface methodology. 2006.
- [37] A. Pak, T. Mohammadi, S.M. Hosseinalipour, e V. Allahdini. Cfd modeling of porous membranes. 2006.
- [38] I. Janajreh, A. Hasania, e H. Fath. Numerical simulation of vapor flow and pressure drop across the demister of multi stage flash desalination plant. 2012.
- [39] G. W. Gee e D. Or. *Methods of soil Analysis*. Soil Science Society of America, 2002.