

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Liliana de Luca Xavier Augusto

**Aplicação do método de lattice Boltzmann na
simulação de meios filtrantes: implementação
de códigos para geração do domínio de cálculo
e condição de contorno de escorregamento**

Tese de Doutorado

São Carlos – São Paulo

Março de 2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Liliana de Luca Xavier Augusto

Aplicação do método de lattice Boltzmann na simulação de meios filtrantes: implementação de códigos para geração do domínio de cálculo e condição de contorno de escorregamento

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de doutor em Engenharia Química.

Orientadora: Prof.^a Dr.^a Gabriela Cantarelli Lopes


Coorientadores: Prof. Dr. José Antônio Silveira Gonçalves e Prof. Dr. Paolo Tronville

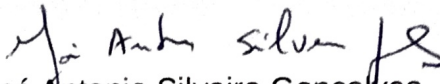
São Carlos – São Paulo

Março de 2018

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE TESE DE LILIANA DE LUCA XAVIER AUGUSTO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 19 DE MARÇO DE 2018.

BANCA EXAMINADORA:


Gabriela Cantarelli Lopes
Orientadora, UFSCar


José Antonio Silveira Gonçalves
Coorientador, UFSCar


Rodrigo Béttega
UFSCar


Thiago Faggion de Pádua
UFSCar


Dirceu Noriler
UNICAMP


Luben Cabezas Gómez
USP

Agradecimentos

Agradeço aos meus pais pelo amor incondicional, pelo apoio nas decisões e por sempre me incentivarem a continuar estudando. À minha família por compreenderem que a ausência física às vezes se faz necessária.

Aos professores Dra. Gabriela Cantarelli Lopes e Dr. José Antônio Silveira Gonçalves pela oportunidade, orientação e conselhos fundamentais não só no desenvolvimento desta tese, mas também na iniciação à carreira profissional. Sem o apoio de vocês, jamais teria chegado até aqui. Ao Dr. Thiago Faggion de Pádua pelas discussões sempre interessantes.

A todos os envolvidos no projeto PVE, Jaqueline, Hélio, Ana Isabela, Ana Cláudia e Bruno, às professoras Dra. Mônica Lopes Aguiar e Dra. Vádila Giovana Guerra Béttega da de Departamento de Engenharia Química (DEQ) da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) e ao Dr. Paolo Tronville do Instituto Politécnico de Torino (PoliTo) na Itália pelo fornecimento de dados essenciais utilizados no desenvolvimento do trabalho e por todo o conhecimento passado durante o desenvolvimento do projeto.

Ao Dr. Mathias Krause do Instituto de Tecnologia de Karlsruhe (KIT) na Alemanha e todo o seu grupo de pesquisa, especialmente ao Thomas e ao Jesse, pela recepção como também membro do grupo de pesquisa e por toda a ajuda durante o intercâmbio, tendo sido indispensável para o aprendizado de um assunto ainda pouco discutido no campo da engenharia.

Aos colegas de CFD, Gabriel, Marina, Christian e Ricardo, pelas discussões interessantes e valiosa troca de conhecimentos. Aos amigos Paula, Marcos, Bira, Larissa, Cadu, Tatiane, Dimas, Ana Clara, Rafael, Vinícius, Flávia e Eduardo pela amizade construída durante o tempo em São Carlos. Aos amigos do Centro de Secagem por todos os momentos de distração e pelos cafés de todo dia. Obrigada por tornarem estes quatro anos mais leves.

Aos amigos do intercâmbio, Fernando, Guilherme, especialmente a Débora, Suzanny e Lívia, por todas as memórias e *hashtags* que criamos juntas durante o doutorado sanduíche. Ao Vitor e Vicente pela amizade em Karlsruhe. A experiência não teria sido a mesma sem vocês.

Ao Lucas, pelo amor e companheirismo diário mesmo à distância.

Ao Departamento de Engenharia Química (DEQ) e ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química (PPGEQ) da UFSCar, pela infraestrutura e recursos disponibilizados para o desenvolvimento da tese.

Ao Marcelo do Departamento de Física (DF) pela ajuda com o funcionamento do *cluster*.

Ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento (CNPq) pela concessão das bolsas de estudo no país (141773/2014-6) e durante o intercâmbio (200932/2015-2). A Capes pelo financiamento do projeto de Pesquisador Visitante Especial (PVE) (88881.030417/2013-01).

A todos que, de alguma forma, contribuíram para o desenvolvimento desta tese.

Resumo

Diversos estudos vêm sendo realizados com o intuito de encontrar o melhor ponto de operação para os meios filtrantes, nos quais a modelagem e simulação vêm se tornando grandes aliadas. Neste trabalho, foi desenvolvido um código para a construção de modelos geométricos de meios filtrantes para serem, posteriormente, utilizados em simulações numéricas, a partir de dados obtidos por análises estatísticas e de imagens de microscopia. Duas abordagens (distribuições aleatória e uniforme) foram utilizadas para a alocação das fibras no interior das fronteiras do meio filtrante. A biblioteca OpenLB, que utiliza o método mesoscópico de lattice Boltzmann, baseado na teoria cinética dos gases, foi utilizada para o cálculo do escoamento do gás e estimativa da queda de pressão através do meio filtrante. A condição de contorno de escorregamento livre foi implementada no código OpenLB, por uma abordagem mesoscópica da reflexão especular das funções de distribuição, e então aplicada na superfície das fibras, com a finalidade de representar um escoamento em regime de escorregamento. A condição de contorno proposta foi verificada em escoamentos confinados no interior de um duto e ao redor de obstáculos, de forma que os dados foram comparados com resultados obtidos por simulações em escala macroscópica, realizadas no pacote comercial ANSYS Fluent, o qual resolve numericamente as equações de Navier-Stokes, e também com dados da literatura. Nas simulações em meios filtrantes, as condições de contorno de escorregamento livre e de não-escorregamento foram aplicadas nas superfícies das fibras, e os resultados numéricos das quedas de pressão de três meios filtrantes foram comparados com dados experimentais. Uma melhor concordância entre os dados numéricos e experimentais foi observada quando a condição de escorregamento livre foi empregada. Isso evidencia a necessidade de se utilizar a condição de contorno adequada em casos de escoamentos com número de Knudsen consideravelmente alto. Além disso, uma análise da influência do tamanho do domínio computacional sobre a queda de pressão também foi realizada, com o objetivo de determinar a menor dimensão capaz de representar de forma fiel o modelo geométrico do meio filtrante. De acordo com os resultados, há uma tendência na estabilização da queda de pressão com o aumento do domínio, uma vez que a fração de sólidos é calculada com maior precisão. Esta estabilização ocorre em melhor acordo quando a aleatoriedade é utilizada para a distribuição de fibras no meio filtrante.

Palavras-chaves: Método de lattice Boltzmann. Condição de contorno de escorregamento livre. Modelos geométricos de meios filtrantes.

Abstract

Many studies have been carried out to find the best operating point for filter media, and the mathematical modeling and simulation are becoming an important tool. In this work, a code was built to generate geometric models for filter media from data obtained by statistical analysis and microscopic images, to be used in simulations. Two different approaches (random and uniform distributions) were used to allocate the fiber inside the limits of the filter medium. The OpenLB library, which uses the mesoscopic approach lattice Boltzmann method based on kinetic of gases, was used to calculate the gas flow and estimate the pressure drop through the filter medium. A free slip boundary condition was implemented in OpenLB code, using the mesoscopic approach of specular reflection of the distribution functions. This boundary condition was then applied on the fibers surfaces, with the purpose of correctly represent the slip flow regime. The free slip boundary condition was verified by simulating flows in confined duct and around obstacles, and the results were compared with data obtained by macroscopic simulations carried out on the commercial package ANSYS Fluent, which solves Navier-Stokes equations, and also with data found in literature. In filter media simulations, the free slip and no-slip boundary conditions were applied on the fibers surfaces and the numerical results of three types of filter media were then compared to experimental data. A better agreement between numerical and experimental data was observed if the free slip boundary condition was used. This confirms the need to consider the proper boundary condition in flows with high Knudsen number. Moreover, an analysis of the influence of the size of the computational domain on the pressure drop was also carried out, in order to determine the smaller size of the geometric model of the filter medium. According to the results, the pressure drop tends to become stable with the increasing of the domain, since the solid fraction is more accurate. This stabilization occurs with better agreement when the random allocation of the fibers are used to distribute the fibers inside the filter medium.

Keywords: Lattice Boltzmann method. Free slip boundary condition. Geometric model for filter media.

Lista de Tabelas

Tabela 3.1 – Parâmetros para diferentes arranjos de rede.	34
Tabela 4.1 – Parâmetros estimados para cada PDF, pelo método da verossimilhança.	58
Tabela 5.1 – Características dos meios filtrantes utilizados nas simulações.	85
Tabela 5.2 – Meio filtrante F6, com alocação aleatória das fibras.	91
Tabela 5.3 – Meio filtrante F6, com alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).	92
Tabela 5.4 – Meio filtrante F8, com alocação aleatória das fibras.	93
Tabela 5.5 – Meio filtrante F8, com alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).	94
Tabela 5.6 – Meio filtrante H13, com alocação aleatória das fibras.	94
Tabela 5.7 – Meio filtrante H13, com alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).	94
Tabela 5.8 – Perdas de energia, com coordenadas aleatórias.	100
Tabela 5.9 – Perdas de energia, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	100
Tabela A.1 – $y = 10 \mu m$	121
Tabela A.2 – $y = 20 \mu m$	121
Tabela A.3 – $y = 30 \mu m$	122
Tabela A.4 – $y = 40 \mu m$	122
Tabela A.5 – $y = 50 \mu m$	122
Tabela A.6 – $y = 60 \mu m$	122
Tabela A.7 – $y = 70 \mu m$	122
Tabela A.8 – $y = 10 \mu m$	123
Tabela A.9 – $y = 20 \mu m$	123
Tabela A.10 – $y = 30 \mu m$	123
Tabela A.11 – $y = 40 \mu m$	123
Tabela A.12 – $y = 50 \mu m$	123
Tabela A.13 – $y = 60 \mu m$	123
Tabela A.14 – $y = 70 \mu m$	124

Tabela A.15- $y = 10 \mu m$.	124
Tabela A.16- $y = 20 \mu m$.	124
Tabela A.17- $y = 30 \mu m$.	124
Tabela A.18- $y = 40 \mu m$.	124
Tabela A.19- $y = 50 \mu m$.	125
Tabela A.20- $y = 60 \mu m$.	125
Tabela A.21- $y = 70 \mu m$.	125
Tabela A.22- $y = 10 \mu m$.	125
Tabela A.23- $y = 20 \mu m$.	125
Tabela A.24- $y = 30 \mu m$.	126
Tabela A.25- $y = 40 \mu m$.	126
Tabela A.26- $y = 50 \mu m$.	126
Tabela A.27- $y = 60 \mu m$.	126
Tabela A.28- $y = 70 \mu m$.	126
Tabela A.29- $y = 5 \mu m$.	127
Tabela A.30- $y = 10 \mu m$.	127
Tabela A.31- $y = 20 \mu m$.	127
Tabela A.32- $y = 30 \mu m$.	127
Tabela A.33- $y = 40 \mu m$.	128
Tabela A.34- $y = 50 \mu m$.	128
Tabela A.35- $y = 5 \mu m$.	128
Tabela A.36- $y = 10 \mu m$.	128
Tabela A.37- $y = 20 \mu m$.	128
Tabela A.38- $y = 30 \mu m$.	128
Tabela A.39- $y = 40 \mu m$.	129
Tabela A.40- $y = 50 \mu m$.	129
Tabela A.41- $y = 10 \mu m$.	129
Tabela A.42- $y = 20 \mu m$.	129
Tabela A.43- $y = 30 \mu m$.	129
Tabela A.44- $y = 40 \mu m$.	129
Tabela A.45- $y = 50 \mu m$.	130
Tabela A.46- $y = 60 \mu m$.	130
Tabela A.47- $y = 70 \mu m$.	130
Tabela A.48- $y = 10 \mu m$.	130
Tabela A.49- $y = 20 \mu m$.	130
Tabela A.50- $y = 30 \mu m$.	131
Tabela A.51- $y = 40 \mu m$.	131
Tabela A.52- $y = 50 \mu m$.	131
Tabela A.53- $y = 60 \mu m$.	131

Tabela A.54- $y = 70 \mu m$.	131
Tabela A.55- $y = 10 \mu m$.	132
Tabela A.56- $y = 20 \mu m$.	132
Tabela A.57- $y = 30 \mu m$.	132
Tabela A.58- $y = 40 \mu m$.	132
Tabela A.59- $y = 50 \mu m$.	133
Tabela A.60- $y = 60 \mu m$.	133
Tabela A.61- $y = 70 \mu m$.	133
Tabela A.62- $y = 10 \mu m$.	133
Tabela A.63- $y = 20 \mu m$.	133
Tabela A.64- $y = 30 \mu m$.	134
Tabela A.65- $y = 40 \mu m$.	134
Tabela A.66- $y = 50 \mu m$.	134
Tabela A.67- $y = 60 \mu m$.	134
Tabela A.68- $y = 70 \mu m$.	134
Tabela A.69- $y = 5 \mu m$.	135
Tabela A.70- $y = 10 \mu m$.	135
Tabela A.71- $y = 20 \mu m$.	135
Tabela A.72- $y = 30 \mu m$.	135
Tabela A.73- $y = 40 \mu m$.	136
Tabela A.74- $y = 50 \mu m$.	136
Tabela A.75- $y = 5 \mu m$.	136
Tabela A.76- $y = 10 \mu m$.	136
Tabela A.77- $y = 20 \mu m$.	136
Tabela A.78- $y = 30 \mu m$.	136
Tabela A.79- $y = 40 \mu m$.	137
Tabela A.80- $y = 50 \mu m$.	137

Lista de Figuras

Figura 3.1 – Esquema do processo de filtração de superfície.	22
Figura 3.2 – Esquema do processo de filtração de profundidade.	23
Figura 3.3 – Sistema em diferentes escalas.	27
Figura 3.4 – Arranjos em uma dimensão.	33
Figura 3.5 – Arranjos em duas dimensões.	33
Figura 3.6 – Arranjos em três dimensões.	33
Figura 3.7 – Funções de distribuição desconhecidas nas fronteiras.	35
Figura 3.8 – Condição de contorno periódica.	36
Figura 3.9 – Condições de contorno <i>bounce back</i> e reflexão especular.	37
Figura 3.10–Processo de criação da geometria e voxelização.	39
Figura 3.11–Estrutura de dados do OpenLB.	40
Figura 3.12–Números correspondentes aos diferentes materiais para o caso de um cilindro bidimensional entre placas planas.	40
Figura 3.13–Etapas de colisão e propagação.	41
Figura 4.1 – Técnica de <i>electrospinning</i> para fabricação de meios filtrantes.	54
Figura 4.2 – Imagens para análise dos diâmetros das fibras.	55
Figura 4.3 – Volume em excesso, descontado no cálculo da fração de sólidos.	56
Figura 4.4 – Histogramas dos conjuntos de diâmetros de fibras.	57
Figura 4.5 – Testes das distribuições para os dados experimentais.	58
Figura 4.6 – Gráficos quantil-quantil para as três distribuições.	58
Figura 4.7 – Esquema de discretização do intervalo de diâmetros de fibras.	60
Figura 4.8 – PDF’s calculadas a partir do código computacional.	63
Figura 4.9 – Esquema para o cálculo da distância máxima entre duas fibras.	64
Figura 4.10–Geração e escolha do melhor candidato no algoritmo de Mitchell (1991)	66
Figura 4.11–Saída do código computacional para geração da geometria do meio filtrante.	67
Figura 4.12–Modelo do meio filtrante gerado com o auxílio do código computacional.	68
Figura 4.13–Fibras octogonal e circular.	68

Figura 4.14–Tipos de fronteiras.	70
Figura 5.1 – Geometrias utilizadas para verificação da condição de contorno, unidades em metros.	75
Figura 5.2 – Detalhes do <i>grid</i> das placas planas paralelas.	76
Figura 5.3 – EOC para o escoamento entre duas placas planas paralelas, com esquema <i>bounce back</i>	78
Figura 5.4 – Contornos de velocidade obtidos para o escoamento entre placas planas paralelas.	79
Figura 5.5 – EOC para o escoamento ao redor de obstáculos, para a queda de pressão.	82
Figura 5.6 – EOC para o escoamento ao redor de obstáculos, para o coeficiente de arraste.	83
Figura 5.7 – Quedas de pressão para o escoamento ao redor de obstáculos.	84
Figura 5.8 – Coeficientes de arraste para o escoamento ao redor de obstáculos.	85
Figura 5.9 – Perfis de velocidade ao longo do domínio, para o cilindro, com esquema <i>bounce back</i>	86
Figura 5.10–Perfis de velocidade ao longo do domínio, para o octógono, com esquema <i>bounce back</i>	86
Figura 5.11–Perfis de velocidade ao longo do domínio, para o octógono, com reflexão especular.	87
Figura 5.12–Domínios computacionais dos meios filtrantes gerados por alocação randômica das fibras.	87
Figura 5.13–Domínios computacionais dos meios filtrantes gerados por alocação de fibras segundo o algoritmo de Mitchell (1991).	88
Figura 5.14–EOC para meios filtrantes, com esquema <i>bounce back</i> e com coordenadas aleatórias.	90
Figura 5.15–EOC para meios filtrantes, com reflexão especular e com coordenadas aleatórias.	91
Figura 5.16–EOC para meios filtrantes, com esquema <i>bounce back</i> , segundo algoritmo de Mitchell (1991).	92
Figura 5.17–EOC para meios filtrantes, com reflexão especular, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	93
Figura 5.18–Erro relativo entre as frações de sólido em função da dimensão y	95
Figura 5.19–Queda de pressão em função da dimensão y , para a alocação aleatórias das fibras.	96
Figura 5.20–Queda de pressão em função da dimensão y , para a alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).	97
Figura 5.21–Contornos de velocidade para o meio filtrante F6, com coordenadas aleatórias.	102

Figura 5.22–Contornos de velocidade para o meio filtrante F6, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	102
Figura 5.23–Contornos de velocidade para o meio filtrante F8, com coordenadas aleatórias.	103
Figura 5.24–Contornos de velocidade para o meio filtrante F8, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	103
Figura 5.25–Contornos de velocidade para o meio filtrante H13, com coordenadas aleatórias.	104
Figura 5.26–Contornos de velocidade para o meio filtrante H13, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	104
Figura 5.27–Contornos de pressão para o meio filtrante F6, com coordenadas aleatórias.	105
Figura 5.28–Contornos de pressão para o meio filtrante F6, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	105
Figura 5.29–Contornos de pressão para o meio filtrante F8, com coordenadas aleatórias.	106
Figura 5.30–Contornos de pressão para o meio filtrante F8, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	106
Figura 5.31–Contornos de pressão para o meio filtrante H13, com coordenadas aleatórias.	107
Figura 5.32–Contornos de pressão para o meio filtrante H13, com algoritmo de Mitchell (1991).	107

Lista de Símbolos

ΔP	Queda de pressão através de um meio filtrante [Pa]
Δt	Passo no tempo [s]
Ω	Operador de colisão [$s^2 m^{-6}$]
α	Média da distribuição beta [m]
β	Desvio padrão da distribuição beta [$-$]
δt	Parâmetro de discretização temporal adimensional [$-$]
δx	Parâmetro de discretização espacial adimensional [$-$]
ϵ	Fração de sólidos do meio filtrante [$-$]
ϵ_{exp}	Fração de sólidos do meio filtrante obtida experimentalmente [$-$]
ϵ_{mod}	Fração de sólidos do meio filtrante calculada pelo modelo [$-$]
λ	Caminho livre médio das moléculas [m]
μ	Viscosidade dinâmica do fluido [$kg m^{-1} s^{-1}$]
μ_0	Média da distribuição log-normal [m]
μ_g	Média da distribuição normal [m]
ν	Viscosidade cinemática do fluido [$m^2 s^{-1}$]
ω	Frequência de relaxação [s^{-1}]
ρ	Massa específica [$kg m^{-3}$]
σ_0	Desvio padrão da distribuição log-normal [$-$]
σ_g	Desvio padrão da distribuição normal [$-$]

σ_v	Coefficiente de acomodação tangencial $[-]$
τ	Tempo de relaxação $[s]$
τ_i	Momento das moléculas que incidem sobre a superfície $[kg\ m\ s^{-1}]$
τ_r	Momento das moléculas que são refletidas pela superfície $[kg\ m\ s^{-1}]$
τ_w	Momento das moléculas que incidem sobre a superfície $[kg\ m\ s^{-1}]$
Λ	Matriz de colisão $[-]$
\mathcal{L}	Comprimento de escorregamento $[m]$
A	Seção transversal exposta do meio filtrante $[m^2]$
$A_{frontal}$	Área frontal do corpo no escoamento externo $[m^2]$
\mathbf{c}_{re}	Velocidade discreta na condição de reflexão especular $[m\ s^{-1}]$
\mathbf{c}	Velocidade microscópica do fluido $[m\ s^{-1}]$
\mathbf{c}_{bb}	Velocidade discreta na condição de <i>bounce back</i> $[m\ s^{-1}]$
C_1, C_2	Coefficientes de escorregamento $[-]$
C_D	Coefficiente de arraste $[-]$
c_s	Velocidade do som no fluido $[m\ s^{-1}]$
$charL$	Comprimento característico $[m]$
$charU$	Velocidade característica $[m\ s^{-1}]$
$C_{D_{obstáculo, fh}}$	Coefficiente de arraste para cada solução $[-]$
$C_{D_{obstáculo}}^*$	Coefficiente de arraste obtido com a melhor resolução $[-]$
D_i	Termo central da distribuição discreta de diâmetros de fibras $[m]$
d_m	Diâmetro médio da fibra $[m]$
$D_{máx}$	Diâmetro máximo da fibra $[m]$
$D_{mín}$	Diâmetro mínimo da fibra $[m]$
$D_{i+1/2}$	Termo intermediário posterior da distribuição discreta de diâmetros de fibras $[m]$
$D_{i-1/2}$	Termo intermediário anterior da distribuição discreta de diâmetros de fibras $[m]$
d_{mol}	Diâmetro das moléculas $[m]$

$e_{u,h}$	Erro relativo entre as soluções com diferentes resoluções, para a velocidade [–]
$e_{p,h}$	Erro relativo entre as soluções com diferentes resoluções, para a pressão [–]
$e_{placas, fh}$	Erro relativo entre as velocidades central e de entrada do escoamento entre placas planas paralelas [–]
e_{placas}^*	Solução obtida com a melhor resolução, entre as duas placas paralelas [–]
$e_{CD,h}$	Erro relativo entre as soluções com diferentes resoluções, para o coeficiente de arraste [–]
\mathbf{F}	Força externa por unidade de massa [$m s^{-2}$]
\tilde{f}_i	Valor intermediário entre as etapas de colisão e propagação [$s^3 m^{-6}$]
f	Função de distribuição de partículas [$s^3 m^{-6}$]
F_D	Força de arraste [$kg m s^{-2}$]
f_i^{eq}	Função de equilíbrio local de partículas [$s^3 m^{-6}$]
F_k	Força devido ao movimento do fluido (N)
F_n	Força atribuída às tensões normais (N)
F_t	Força atribuída às tensões cisalhantes tangenciais (N)
f_x, f_y	Números randômicos gerados pelo código C++ [–]
F_{atrito}	Força devido ao atrito entre o fluido e a superfície sólida (N)
f_{bb}	Função de distribuição na condição de <i>bounce back</i> [$s^3 m^{-6}$]
F_{forma}	Força devido a gradientes adversos de pressão (N)
f_{re}	Função de distribuição na condição de reflexão especular [$s^3 m^{-6}$]
G_1	Partículas que entram no meio filtrante [–]
G_2	Partículas que atravessam o meio filtrante [–]
G_3	Partículas que ficam retidas no meio filtrante [–]
h	Parâmetro de discretização espacial [m]
k_1	Constante de permeabilidade Darciana ou viscosa [m^2]
k_2	Constante de permeabilidade não-Darciana [m]
k_B	Constante de Boltzmann [$kg m^2 s^{-2} K^{-1}$]

L	Comprimento característico genérico [m]
$latticeL$	Espaçamento entre os nós [m]
$latticeU, \delta u$	Parâmetro de velocidade adimensional [-]
M	Massa molecular [u]
m	Soma dos comprimentos de todas as fibras [m]
\mathbf{n}	Vetor normal à superfície sólida [-]
n_i	Quantidade de fibras em cada intervalo [-]
$n_i(frac)$	Fração de fibras com diâmetros entre D e dD [-]
N_{fibras}	Número total de fibras [-]
n_{mol}	Número de moléculas [-]
P	Penetração do meio filtrante [-]
p	Pressão [Pa]
p_1	Pressão antes do meio filtrante [Pa]
p_2	Pressão depois do meio filtrante [Pa]
$p_{obstáculo, fh}$	Queda de pressão para cada solução [Pa]
$p_{obstáculo}^*$	Queda de pressão obtida com a melhor resolução [Pa]
Q	Vazão volumétrica de ar [$m^3 s^{-1}$]
q_F	Fator de qualidade do meio filtrante [Pa^{-1}]
R	Constante dos gases ideais [$kg m^2 s^{-2} K^{-1} mol^{-1}$]
S	Distância mínima entre duas fibras escolhida pelo usuário [m]
$S_{máx}$	Distância máxima permitida entre duas fibras [m]
T	Temperatura [K]
t	Tempo [s]
\mathbf{u}	Velocidade macroscópica [$m s^{-1}$]
u	Velocidade superficial [$m s^{-1}$]
u_F	Velocidade de filtração [$m s^{-1}$]

$u_{superfície}$ Velocidade da superfície [$m s^{-1}$]

U_{fluido} Velocidade adimensional do fluido [-]

u_{fluido} Velocidade do fluido [$m s^{-1}$]

$U_{superfície}$ Velocidade adimensional da superfície [-]

w_i Pesos associados a cada direção i [-]

\boldsymbol{x} Coordenada espacial [m]

\boldsymbol{x}_f Coordenada localizada no fluido [m]

\boldsymbol{x}_s Coordenada localizada no sólido [m]

X Espessura do meio filtrante [m]

x_{ale}, y_{ale} Coordenadas aleatórias das fibras [m]

$x_{direita}, x_{esquerda}, y_{inferior}, y_{superior}$ Coordenadas dos limites do domínio computacional [m]

Sumário

1	INTRODUÇÃO	18
2	OBJETIVOS DA TESE	21
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
3.1	Aspectos gerais da filtração	22
3.2	Método de lattice Boltzmann	26
3.2.1	Equação de Boltzmann	28
3.2.2	Equação de lattice Boltzmann	29
3.2.3	Operador de colisão BGK	29
3.2.4	Propriedades macroscópicas	32
3.2.5	Tipos de arranjos da rede	32
3.2.6	Condições iniciais e de contorno	34
3.2.7	Algoritmo básico da biblioteca OpenLB	37
3.3	O efeito de escorregamento	42
3.4	Estudos relacionados: escoamento em meios filtrantes	43
4	IMPLEMENTAÇÃO DOS CÓDIGOS COMPUTACIONAIS	53
4.1	Geração de um domínio computacional para o meio filtrante	53
4.1.1	Obtenção das imagens e análise estatística	54
4.1.2	Algoritmo para geração de um domínio bidimensional	59
4.2	Implementação da condição de contorno de escorregamento	68
5	EXPERIMENTOS NUMÉRICOS E RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES	74
5.1	Verificação da condição de contorno	74
5.1.1	Escoamento entre placas planas paralelas	74
5.1.2	Escoamento ao redor de obstáculos	79
5.2	Aplicação em meios filtrantes	84
6	CONCLUSÕES	108
7	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	109

REFERÊNCIAS	110
-----------------------	-----

APÊNDICES	120
------------------	------------

APÊNDICE A – DADOS DE QUEDA DE PRESSÃO	121
A.1 Meio filtrante F6, com coordenadas aleatórias.	121
A.1.1 Com reflexão especular na superfície das fibras	121
A.1.2 Com <i>bounce back</i> na superfície das fibras.	123
A.2 Meio filtrante F8, com coordenadas aleatórias.	124
A.2.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.	124
A.2.2 Com <i>bounce back</i> na superfície das fibras.	125
A.3 Meio filtrante H13, com coordenadas aleatórias.	127
A.3.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.	127
A.3.2 Com <i>bounce back</i> na superfície das fibras.	128
A.4 Meio filtrante F6, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	129
A.4.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.	129
A.4.2 Com <i>bounce back</i> na superfície das fibras.	130
A.5 Meio filtrante F8, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	132
A.5.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.	132
A.5.2 Com <i>bounce back</i> na superfície das fibras.	133
A.6 Meio filtrante H13, segundo algoritmo de Mitchell (1991).	135
A.6.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.	135
A.6.2 Com <i>bounce back</i> na superfície das fibras.	136

Introdução

O aumento das atividades industriais e o crescimento dos centros urbanos têm ocasionado o agravamento da poluição ambiental. Por afetar diretamente a qualidade de vida da população, a minimização da emissão de poluentes tornou-se questão primordial. De acordo com a Organização Mundial da Saúde (2016), a inalação de poluentes pode causar doenças respiratórias e cardiovasculares, a curto e longo prazo. Esta preocupação com o controle da poluição atmosférica motivou a fundação de órgãos que regulamentam a emissão de poluentes, como é o caso do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA), criado em 1981. A CETESB, Companhia Ambiental do Estado de São Paulo, também classifica os poluentes atmosféricos e define os limites máximos permitidos de emissão de poluentes. Baseado no Decreto Estadual 59113 (2013), a CETESB monitora a qualidade do ar para os seguintes tipos de poluentes: partículas inaláveis (MP_{10}), partículas inaláveis finas ($MP_{2,5}$), dióxido de enxofre (SO_2), dióxido de nitrogênio (NO_2), ozônio (O_3), monóxido de carbono (CO) e fumaça.

Para atender às regulamentações impostas pelos órgãos fiscalizadores, diversas operações para separação gás-sólido são utilizadas nas indústrias, com o objetivo de reter partículas poluentes geradas durante os processos industriais. As principais categorias de limpadores de gás incluem os lavadores, as câmaras gravitacionais, os precipitadores eletrostáticos e os filtros. Dentre estas estratégias para remoção de partículas de correntes gasosas, o processo de filtração é uma operação de separação que se destaca dentre as demais, uma vez que apresenta um custo relativamente baixo aliado a alta eficiência de coleta para ampla faixa granulométrica e a pouca sensibilidade às mudanças nas condições operacionais (HINDS, 1999).

Além da necessidade de garantir uma melhor qualidade do ar atmosférico, diversos processos industriais utilizam a filtração em alguma etapa como operação unitária. Em indústrias farmacêuticas, esta técnica é largamente empregada. Souto, Severino e Santana (2012a) e Souto, Severino e Santana (2012b) apresentaram um processo de fabricação de nanopartículas utilizadas na produção de medicamentos e, dentre as etapas envolvidas no processo, a filtração de nanopartículas está presente. Sutherland (2011) apresentou um

breve histórico sobre a aplicação do processo de filtração em operações farmacêuticas e biotecnológicas, destacando os pontos em que esta operação pode ser utilizada ao longo da linha de produção de medicamentos.

O grande desafio do processo de filtração é encontrar um ponto de operação no qual a queda de pressão seja a menor possível, e a eficiência de coleta seja máxima. Com o objetivo de encontrar um ponto ótimo entre estas duas variáveis, são necessários estudos para investigar o escoamento através do meio filtrante. Estas investigações podem ser realizadas via método experimental ou por simulações numéricas. Nas investigações experimentais, grandezas fundamentais são medidas durante ensaios do processo de filtração. Muitas vezes, estes procedimentos requerem equipamentos de custo elevado e, muitas vezes, não são suficientes para descrever o problema em amplos regimes de forma detalhada. Já o método teórico envolve o cálculo de grandezas físicas, como velocidade e pressão, através das leis de conservação que caracterizem o escoamento. A utilização de métodos numéricos para a resolução destas equações tem a vantagem de fornecer resultados discretos ao longo do espaço e no tempo, uma vez que é possível calcular os valores das grandezas físicas ponto a ponto por todo o domínio computacional.

Em meios filtrantes utilizados em sistemas de ventilação e em salas limpas, o objetivo é, geralmente, a coleta de partículas de diâmetros bastante reduzidos, da ordem de poucos micrômetros até alguns nanômetros. Em situações como estas, utiliza-se um meio poroso pelo qual as partículas atravessam e são capturadas quando o tamanho do poro é menor do que as mesmas. Neste tipo de operação, conhecido como filtração de profundidade, é importante saber como estas fibras estão distribuídas no interior do meio poroso, para que seja possível se conhecer o escoamento por entre o emaranhado fibroso. Novamente, a modelagem e a simulação se apresentam como ferramentas essenciais nestes estudos, já que torna possível a observação de fenômenos em escalas reduzidas. A disposição das fibras tem grande influência na estimativa da queda de pressão na filtração de profundidade, de forma que a representação do meio filtrante deve ser o mais fiel possível de um meio filtrante real.

O meio filtrante fibroso, geralmente empregado na filtração de profundidade, é caracterizado por um entrelaçado de fibras. Sua estrutura permite uma alta permeabilidade do gás e, conseqüentemente, baixa resistência ao escoamento. A eficiência de coleta neste tipo de filtro depende da fração de sólido do elemento filtrante e do tamanho das partículas a serem retidas. Em geral, as fibras que compõem este tipo de meio filtrante possuem diâmetros variando de poucos nanômetros até maiores que $50 \mu m$. Quando as fibras são pequenas, da ordem de nanômetros até poucos micrômetros, o caminho livre médio das moléculas do gás possui aproximadamente a mesma ordem de grandeza do diâmetro das fibras, e como efeito, o fenômeno de escorregamento é observado na superfície das fibras. O escorregamento tem relação direta com o atrito entre o gás e a superfície das fibras, e desempenha um papel muito importante na estimativa da queda de

pressão do meio filtrante, de forma que a condição de contorno deve ser cuidadosamente escolhida na etapa de modelagem matemática do escoamento.

Neste contexto, este trabalho visou a elaboração de um método para a construção de representações geométricas de meios filtrantes fibrosos a partir das características reais do meio filtrante, obtidas através de fotos de microscopia eletrônica de varredura; a estimativa da queda de pressão em meios filtrantes fibrosos, através da implementação da condição de contorno de escorregamento em um *software* de código livre; e a análise do tamanho do domínio computacional escolhido para ser utilizado nas simulações. O escoamento gasoso foi calculado pelo método de lattice Boltzmann, que utiliza uma abordagem mesoscópica baseado na teoria cinética dos gases.

Objetivos da tese

Esta tese teve como objetivo geral a simulação do escoamento gasoso, pelo método de lattice Boltzmann, em meios filtrantes fibrosos construídos com representações geométricas construídas a partir de características obtidas experimentalmente. Como objetivos específicos, tem-se:

- a geração de um domínio bidimensional para os meios filtrantes, através de dados obtidos pela análise de imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV), por duas abordagens diferentes para a distribuição das fibras;
- a implementação de uma condição de contorno de escorregamento ao redor das fibras, através de uma abordagem mesoscópica, na biblioteca OpenLB;
- verificação da condição de contorno através da comparação com dados numéricos obtidos pelo pacote comercial ANSYS Fluent e dados da literatura;
- aplicação das condições de contorno de escorregamento livre e não-escorregamento em três tipos de meios filtrantes diferentes e análise da influência do tamanho do domínio computacional e/ou quantidade de fibras.

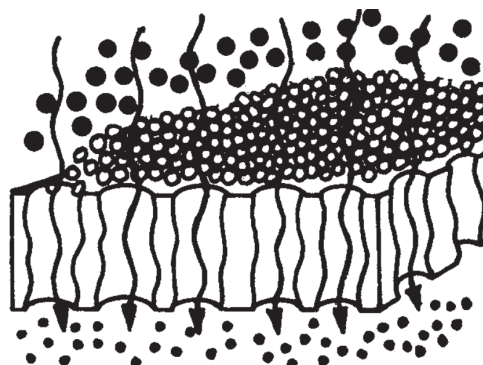
Revisão bibliográfica

Neste capítulo, serão apresentados aspectos gerais sobre a filtração de gases, os principais pontos do método de lattice Boltzmann, que foi utilizado para a simulação do escoamento de gás e, por fim, os principais estudos encontrados na literatura sobre a simulação e modelagem de escoamento em meios filtrantes.

3.1 Aspectos gerais da filtração

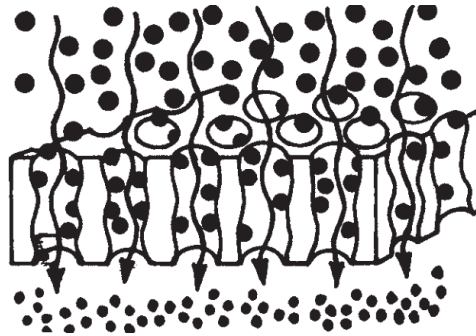
A filtração tem como objetivo a separação de materiais sólidos de um fluido (gás ou líquido), através da passagem de ambas as fases por um meio permeável, capaz de reter as partículas sólidas e permitir a passagem do fluido livre de impurezas. À medida que o material particulado vai sendo depositado na superfície do filtro, a torta de filtração vai sendo formada e também passa a atuar como meio filtrante (Figura 3.1). Em operações batelada, o processo de filtração deve ser interrompido para a remoção da torta quando a queda de pressão atinge um valor máximo determinado por condições técnicas e/ou econômicas (BROWN, 1993). Este processo é conhecido como filtração de superfície, no qual o meio poroso é considerado relativamente fino quando comparado ao tamanho das partículas a serem retidas (SUTHERLAND, 2008).

Figura 3.1 – Esquema do processo de filtração de superfície.



Fonte: Sutherland (2008).

Figura 3.2 – Esquema do processo de filtração de profundidade.



Fonte: Sutherland (2008).

Em sistemas de ventilação de ambientes internos e em salas de esterilização, por exemplo, visa-se a remoção de partículas da ordem de poucos micrômetros ou nanômetros. Nestes casos, as partículas suspensas no ar, que são da ordem de poucos micrômetros até alguns nanômetros, percorrem o interior do meio poroso e são capturadas quando encontram algum poro com tamanho inferior ao seu diâmetro. Caracteriza-se, então, a filtração de profundidade (Figura 3.2), na qual a espessura do meio filtrante é comparável ao tamanho das partículas a serem retidas (SUTHERLAND, 2008).

Para caracterizar o desempenho de um meio filtrante, duas principais variáveis são avaliadas: a queda de pressão e a eficiência de coleta de partículas. A primeira representa a resistência do meio filtrante ao escoamento, e está relacionada com a perda de energia que o fluido sofre ao passar pelo emaranhado de fibras e, ocasionalmente, pela torta, quando trata-se de uma filtração de superfície. A queda de pressão é diretamente proporcional à espessura do meio, de forma que se dois filtros forem acoplados em série, a queda de pressão será a soma das quedas de pressão individuais (HINDS, 1999). A queda de pressão, Δp , pode ser calculada como a diferença entre a pressão antes, p_1 , e após, p_2 , o meio filtrante:

$$\Delta p = p_1 - p_2. \quad (3.1)$$

A eficiência de coleta está relacionada com a capacidade do meio filtrante de capturar as partículas do fluido. A quantidade de sólidos que ficará retida no meio filtrante depende de características das partículas, como seu tamanho, forma e densidade; do meio filtrante, como a fração de sólidos, tamanho dos poros e das fibras; e operacionais, como a velocidade de filtração. Sejam G_1 a quantidade de partículas que entram no filtro, G_2 , a quantidade de partículas que atravessam o meio filtrante, e G_3 , aquelas que ficam retidas, a eficiência E pode ser calculada como (MATTESON; ORR, 1987):

$$E = \frac{G_3}{G_1} = \frac{G_1 - G_2}{G_1} = \frac{G_3}{G_3 + G_2}. \quad (3.2)$$

Os termos G_1 , G_2 e G_3 podem ser expressos em massa, concentração ou número de partículas, de forma que a eficiência de coleta varia entre 0 e 1 em todos os casos. Outro

conceito importante é o de penetração P , que se trata da capacidade do meio filtrante de permitir com que as partículas o atravessem, sendo calculada como:

$$P = \frac{G_2}{G_1} = \frac{G_1 - G_3}{G_1} = 1 - \frac{G_3}{G_1} = 1 - E. \quad (3.3)$$

A velocidade superficial influencia diretamente na eficiência de coleta do meio filtrante, e é definida como a velocidade de ar na superfície do filtro, antes que o ar penetre na estrutura do meio (HINDS, 1999):

$$u = \frac{Q}{A}, \quad (3.4)$$

onde Q é a vazão volumétrica de ar e A é a área da seção transversal exposta do meio filtrante. Uma vez no interior do meio, o volume para a passagem de ar é reduzido devido ao espaço ocupado pelas fibras, e a velocidade de ar é maior nesta porção, sendo calculada como (HINDS, 1999):

$$u_F = \frac{Q}{A(1 - \epsilon)}, \quad (3.5)$$

em que ϵ é a fração de sólidos, também chamada de densidade do empacotamento do meio filtrante, dada por:

$$\epsilon = \frac{\text{Volume ocupado pelas fibras}}{\text{Volume total}} = 1 - \text{porosidade}, \quad (3.6)$$

sendo que a porosidade é o oposto da fração de sólidos, e se refere à fração de vazios do meio filtrante.

A permeabilidade, que indica a facilidade do fluido à passagem através dos espaços vazios do meio filtrante, está relacionada não só com as características do meio poroso, mas também com propriedades do fluido que o atravessa. Um dos primeiros estudiosos a propor equações que relacionem estas características foi Henry Darcy, por volta de 1856, que originalmente trabalhou com meios granulares. Darcy obteve uma equação empírica para a modificação da energia do fluido quando atravessa um meio poroso, através de experimentos com água e um leito de grãos de areia, orientado na posição vertical (WAKEMAN; TARLETON, 1999; INNOCENTINI; PANDOLFELLI, 1999):

$$-\frac{dp}{dx} = \frac{\mu}{k_1} u_F, \quad (3.7)$$

onde k_1 é a constante de permeabilidade Darciana ou viscosa, que depende apenas de características do meio poroso, e μ é a viscosidade dinâmica. Considerando que o meio filtrante tenha uma espessura X , a Equação 3.7 pode ser integrada para fornecer:

$$\frac{\Delta p}{X} = \frac{\mu}{k_1} u_F, \quad (3.8)$$

que é conhecida como Lei de Darcy para a permeabilidade. Esta relação é largamente utilizada em testes experimentais para calcular a porosidade do meio filtrante. No entanto, em situações nas quais a velocidade de filtração é suficientemente alta, a Lei de Darcy não fornece resultados confiáveis, de forma que não é observada uma relação linear entre a velocidade e a queda de pressão. Foi observada uma relação parabólica entre estas duas variáveis, e uma segunda constante, k_2 , conhecida como constante de permeabilidade não-Darciana ou inercial, foi então adicionada à Equação 3.8, resultando em:

$$\frac{\Delta p}{X} = \frac{\mu}{k_1} u_F + \frac{\rho}{k_2} u_F^2, \quad (3.9)$$

que ficou conhecida como Equação de Forchheimer (FORCHHEIMER, 1901).

Assim como o cálculo da permeabilidade pode ser realizado através de equações empíricas, há também correlações que podem ser utilizadas para a estimativa da porosidade do meio filtrante. A correlação mais utilizada para este fim é a equação de Ergun (ERGUN; ORNING, 1952), dada, em termos da fração de sólidos ϵ :

$$\frac{\Delta p}{X} = \frac{150\mu\epsilon^2}{d_m^2(1-\epsilon)^3} u_F + \frac{1,75\rho\epsilon}{d_m(1-\epsilon)^3} u_F^2, \quad (3.10)$$

na qual os coeficientes de valores 150 e 1,75 representam a equação de Ergun na sua forma geral, sendo que outros valores podem ser obtidos para casos específicos (MACDONALD et al., 1979). Assim como a equação de Darcy, o segundo termo da Equação 3.10 pode ser desprezado para situações com baixas velocidades, dando origem a equação de Kozeny-Carman (CARMAN, 1937).

Ensaio com meios filtrantes podem ser realizados a fim de se obter sua permeabilidade e porosidade, através das Equações 3.8, 3.9 e 3.10, variando-se a velocidade de filtração (e então avaliando-se a queda de pressão).

Para que um meio filtrante desempenhe seu papel da melhor forma possível, é recomendável que a queda de pressão seja mínima e a eficiência de coleta seja máxima. Uma queda de pressão alta significa que há perda de energia em excesso no sistema. Ambos os fatores variam de acordo com a composição e propriedades físicas e químicas do material, a espessura do meio filtrante, as características das partículas a serem coletadas e as condições de operação (pressão, temperatura e umidade, por exemplo). Assim, torna-se difícil comparar filtros de tamanhos e materiais diferentes. Para contornar este problema, um parâmetro chamado fator de qualidade do filtro q_F é usualmente utilizado, e pode ser definido como (HINDS, 1999):

$$q_F = -\frac{\ln(P)}{\Delta p} = -\frac{\ln(1-E)}{\Delta p}. \quad (3.11)$$

Para uma mesma velocidade de filtração e tamanho de partícula, quanto maior o valor do fator de qualidade, melhor será o desempenho do meio filtrante.

3.2 Método de lattice Boltzmann

Geralmente, em Engenharia Química, as escalas nas quais os fenômenos são estudadas são definidas como macroscópica, microscópica e molecular. A nível macroscópico, os fenômenos são descritos por balanços que descrevem como a massa, o momento e a energia do sistema variam devido a introdução ou retirada destas grandezas, através de correntes de entrada e saída. Os detalhes do sistema não são cuidadosamente estudados. Na escala microscópica, avalia-se o que está acontecendo no interior do volume de controle em questão, através da análise de um pequeno elemento de fluido. As equações de balanços fornecem informações detalhadas de como as grandezas variam, no espaço ou no tempo, dentro do volume de controle. Por fim, a abordagem molecular consiste em avaliar os mecanismos de transferência (de massa, momento ou energia) com base na estrutura molecular e nas forças intermoleculares (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2002).

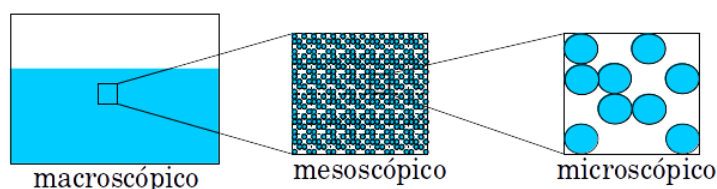
Apesar desta classificação ser amplamente empregada na engenharia, quando se trata de modelos matemáticos computacionais para a simulação de escoamentos, outras definições são frequentemente encontradas. Os termos de escalas macroscópica, mesoscópica e microscópica são observados na literatura, na maioria dos casos dos trabalhos envolvendo estudos numéricos dos fenômenos de transferência (SBRAGAGLIA; SUCCI, 2008; KRAUSE, 2010; MOHAMAD, 2011; GUO; SHU, 2013; HOUAT; BOUAYED, 2017; KRUEGER et al., 2017). A seguir, esta definição alternativa será detalhada.

As formas de se desenvolver modelos matemáticos capazes de descrever escoamentos são baseadas na escala considerada para o problema. Por exemplo: pode-se imaginar uma quantidade de fluido como um único meio e tem-se a abordagem macroscópica. Outra situação seria imaginar cada molécula que compõe o fluido, o que caracterizaria a abordagem microscópica. No primeiro caso, a informação de cada uma das moléculas do fluido não é importante e ele é tido como um meio contínuo, no qual propriedades como velocidade e pressão são calculados como uma média em todo o volume. Nessa escala, as equações clássicas de Navier-Stokes são utilizadas. Já a abordagem microscópica tem como objetivo o cálculo da trajetória de cada uma das moléculas que compõem o fluido, considerando a interação entre elas. Nesta escala, o movimento das moléculas é calculado pela dinâmica molecular, que consiste em resolver equações de Newton em um sistema de átomos ou moléculas, no qual as forças e as energias potenciais de cada componente são calculadas por métodos de dinâmica molecular. Como há a necessidade de se estimar a trajetória e a interação de cada átomo ou molécula, a simulação possui um alto custo computacional, sendo limitada a pequenos sistemas, com pouca aplicação na engenharia até o momento.

Nas últimas décadas, a abordagem mesoscópica vem sendo desenvolvida, com o objetivo de mesclar as vantagens de ambas escalas micro e macroscópica. Neste caso, a

evolução de funções de densidade de probabilidade é utilizada para descrever o escoamento de conjuntos de partículas. O método de lattice Boltzmann (LB) é utilizado para modelar escoamentos nesta escala, através de conceitos da teoria cinética dos gases. Ele é baseado na equação de Boltzmann, que descreve a dinâmica de um gás através de funções de distribuição das moléculas do fluido. Este método alia a vantagem de ser menos complexo que a dinâmica molecular ao fato de apresentar maior performance frente ao paralelismo e implementação do algoritmo, quando comparado aos métodos numéricos para resolução das equações de Navier-Stokes. Isto se deve ao fato de a equação discretizada de lattice Boltzmann utilizar informações locais e de nós vizinhos, e do método utilizar um *grid* estruturado e por resultar em uma formulação explícita, tornando a paralelização por subdivisões do domínio eficiente, uma vez que os custos de comunicação são baixos (HEUVELINE; KRAUSE; LATT, 2009). Além disso, no método de lattice Boltzmann não há necessidade do acoplamento pressão-velocidade, uma vez que a pressão é calculada através de uma equação de estado. O método de lattice Boltzmann tem a vantagem de ser computacionalmente mais viável do que a dinâmica molecular quando se trata de sistemas de tamanho considerável, já que ele não está condicionado ao número de moléculas do sistema, e sim à quantidade de divisões (nós) que se define na rede (LIM et al., 2002). A Figura 3.3 ilustra as diferentes escalas para modelagem de fluidos.

Figura 3.3 – Sistema em diferentes escalas.



Fonte: Acervo pessoal.

O método de lattice Boltzmann tem sua origem nos autômatos celulares, que consistem em conjuntos de células uniformes que possuem seus estados atualizados simultaneamente através de regras simples, levando em consideração a vizinhança entre as células. Por exemplo, pode-se usar variáveis booleanas para designar a presença ou não de partículas em uma determinada célula. Mais regras podem ser adicionadas, como a restrição de que duas partículas não podem ocupar o mesmo nó. As moléculas são permitidas a se deslocarem para os nós vizinhos, podendo ser dispostas em uma, duas ou três dimensões. Este movimento compreende as etapas de propagação, na qual as partículas se movem para os nós mais próximos considerando a direção e o sentido da velocidade, e colisão, quando as moléculas chegam aos sítios e suas velocidades são alteradas de acordo com regras de espalhamento. Entretanto, o autômato celular apresenta intenso ruído estatístico, devido à utilização de variáveis booleanas para a descrição de propriedades microscópicas. A fim de evitar estes problemas, o método de lattice Boltzmann foi criado e, assim como o autômato celular, utiliza regras semelhantes para representar o movimento das partículas

na rede (WOLF-GLADROW, 2005; WOLF, 2006; KOMORI, 2012). Além disso, pode ser demonstrado que a equação de lattice Boltzmann é uma forma especial discreta da equação de Boltzmann para gases diluídos e baixo número de Mach (HE; LUO, 1997; ABE, 1997; PHILIPPI et al., 2006).

3.2.1 Equação de Boltzmann

O estado de um gás pode ser descrito pela posição e velocidade de todas as moléculas, representado estatisticamente pela função de distribuição de partículas $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$, em que \mathbf{x} é a coordenada espacial, \mathbf{c} é a velocidade microscópica do gás e t é o tempo. Devido às colisões entre as partículas, há uma alteração no número de moléculas em um determinado volume. Assim, um balanço pode ser realizado, considerando que o número de moléculas que entram e que saem deste volume, devido às colisões, é igual a uma alteração na função de distribuição. Através deste balanço, chega-se à equação de Boltzmann (KREMER, 2005), como será detalhado a seguir.

Caso uma força externa (por unidade de massa) \mathbf{F} atue sobre um conjunto de partículas, sem que haja colisão entre as mesmas, não há alteração na quantidade de moléculas em um determinado volume. Ou seja:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} = f(\mathbf{x} + \mathbf{c} dt, \mathbf{c} + \mathbf{F} dt, t + dt) d\mathbf{x} d\mathbf{c}. \quad (3.12)$$

Se colisões entre as partículas forem consideradas, a taxa de mudança entre as funções de distribuição antes e depois das colisões é dado pelo operador de colisão Ω :

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{c} dt, \mathbf{c} + \mathbf{F} dt, t + dt) d\mathbf{x} d\mathbf{c} - f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c} = \Omega(f) d\mathbf{x} d\mathbf{c} dt. \quad (3.13)$$

Dividindo a Equação 3.13 por $d\mathbf{x} d\mathbf{c} dt$, considerando um intervalo de tempo infinitesimal $dt \rightarrow 0$, tem-se:

$$\frac{\mathcal{D}f}{dt} = \Omega(f), \quad (3.14)$$

que afirma que a taxa total na mudança da função de distribuição é igual à taxa de colisão, $(\frac{\partial f}{\partial t})_{col} = \Omega(f)$. Expandindo $\mathcal{D}f$, sabendo que $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$, chega-se a:

$$\mathcal{D}f = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} d\mathbf{x} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} d\mathbf{c} + \frac{\partial f}{\partial t} dt, \quad (3.15)$$

e dividindo por dt :

$$\frac{\mathcal{D}f}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \frac{d\mathbf{c}}{dt} + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (3.16)$$

em que $\frac{d\mathbf{x}}{dt}$ é a velocidade \mathbf{c} , e $\frac{d\mathbf{c}}{dt}$ representa a força por unidade de massa \mathbf{F} . Reescrevendo a Equação 3.16, chega-se a:

$$\frac{Df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{c} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} \mathbf{F} + \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (3.17)$$

que pode, finalmente, ser escrita em termos dos gradientes da função de distribuição:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{c}} f = \Omega(f), \quad (3.18)$$

que é a *equação de Boltzmann* (KRUEGER et al., 2017). O lado esquerdo da Equação 3.18 representa o balanço do número de partículas que entram e saem do volume, relacionado com a etapa de propagação das partículas. O termo do lado direito se refere à mudança líquida na função de distribuição, devido ao efeito de colisão entre as moléculas do gás, representado pelo operador de colisão Ω .

3.2.2 Equação de lattice Boltzmann

A equação de lattice Boltzmann pode ser teoricamente deduzida por duas abordagens diferentes. A primeira delas considera que o método de lattice Boltzmann tem sua origem dos autômatos celulares (WOLF-GLADROW, 2005). A segunda abordagem envolve a dedução da formulação de lattice Boltzmann a partir da equação contínua de Boltzmann. Mais detalhes sobre o procedimento de discretização da equação de Boltzmann podem ser encontrados em Abe (1997), He e Luo (1997) e Krause (2010).

Considerando que as forças externas são desprezíveis frente às forças existentes entre as partículas, a Equação 3.13 pode ser reescrita como, em sua forma discretizada (KRUEGER et al., 2017):

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i, \quad (3.19)$$

que é a *equação de lattice Boltzmann*, na qual i se refere a cada velocidade discreta, de cada nó da rede, e Δt se refere ao passo no tempo. A seguir, os modelos mais comuns de rede serão detalhados. A Equação 3.19 descreve um conjunto de moléculas $f_i(\mathbf{x}, t)$ se movendo com uma velocidade \mathbf{c}_i para o nó vizinho $(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t)$ em um tempo $(t + \Delta t)$, ao passo que as partículas são afetadas pelo operador de colisão Ω_i .

3.2.3 Operador de colisão BGK

O desafio na resolução da Equação 3.19 é o cálculo do operador de colisão. O modelo mais utilizado para a aproximação deste termo é o BGK, proposto por Bhatnagar, Gross e Krook (1954). Os autores levaram em consideração o fato de que a função de distribuição de partículas tende a uma distribuição de equilíbrio, na qual há isotropia das propriedades ao longo da rede. Neste modelo, todas as funções de distribuição são relaxadas até o

equilíbrio com o mesmo tempo, e por isso ele é chamado de modelo de único tempo de relaxação (SRT, do inglês *single time relaxation*). Assim, o operador de colisão BGK é definido como:

$$\Omega_i = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{eq}) \quad (3.20)$$

onde τ é o tempo de relaxação (sendo $\omega = \frac{1}{\tau}$ a frequência de relaxação) e f_i^{eq} é a função de equilíbrio local de partículas. Fisicamente, a Equação 3.20 indica a tendência de uma função de distribuição f_i se aproximar do seu estado de equilíbrio f_i^{eq} depois de um tempo τ (KRUEGER et al., 2017). Devido à sua simplicidade, fácil implementação e paralelização, e boa confiabilidade dos resultados, a aproximação BGK tornou-se a mais popular. A equação de lattice Boltzmann com modelo BGK (LBGK) assume a seguinte forma:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{eq}). \quad (3.21)$$

A função de distribuição de equilíbrio pode ser obtida a partir da distribuição de Maxwell (GUO; SHU, 2013):

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\|\mathbf{c} - \mathbf{u}\|^2}{2RT}\right), \quad (3.22)$$

em que ρ é a massa específica, T é a temperatura, \mathbf{u} é a velocidade macroscópica do gás e D é a dimensão no espaço. A Equação 3.22 pode ser reescrita como:

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(\frac{-\mathbf{c}^2}{2RT}\right) \exp\left(\frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})}{RT} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right), \quad (3.23)$$

e expandindo a segunda função exponencial em série de Taylor em termos da velocidade do fluido, tem-se:

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(\frac{-\mathbf{c}^2}{2RT}\right) \left[1 + \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{u}^2}{2RT} - \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})}{RT} \right)^2 + \dots \right], \quad (3.24)$$

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(\frac{-\mathbf{c}^2}{2RT}\right) \left[1 + \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{u}^4}{4R^2T^2} - \frac{2(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}^3)}{2R^2T^2} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{R^2T^2} + \dots \right) \right]. \quad (3.25)$$

Para que a Equação 3.25 corresponda as equações de Navier Stokes para baixos valores de número de Mach $|\mathbf{u}|/\sqrt{RT} = |\mathbf{u}|/c_s \ll 1$, em que c_s é a velocidade do som, despreza-se

os termos de ordem superior a $\mathcal{O}(\mathbf{u}^3)$ (GUO; SHU, 2013), mantendo apenas os termos de segunda ordem $\mathcal{O}(\mathbf{u}^2)$:

$$f_i^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(\frac{-\mathbf{c}^2}{2RT}\right) \left[1 + \frac{\mathbf{u}^2}{2RT} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})}{RT} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{2R^2T^2}\right], \quad (3.26)$$

inserindo pesos associados a cada direção da velocidade em cada nó w_i (cujos valores serão apresentados na sessão 3.2.5), e reescrevendo em termos da velocidade do som c_s (GUO; SHU, 2013):

$$f_i^{eq} = \rho w_i \left[1 + \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4}\right]. \quad (3.27)$$

Os pesos são inseridos no cálculo das funções de distribuição para garantir a isotropia na rede, no estado de equilíbrio. Esta função de distribuição descreve a velocidade das partículas de um gás ideal num espaço delimitado, no qual as partículas não interagem umas com as outras, a não ser por rápidas colisões, nas quais elas trocam momento e energia.

O operador de colisão é análogo ao termo viscoso na equação de Navier Stokes. Através da expansão de Chapman-Enskog (CHAPMAN; COWLING, 1970), é possível derivar a equação de Navier-Stokes a partir da equação de lattice Boltzmann, chegando-se a uma relação entre a viscosidade cinemática (ν) e o tempo de relaxação (WOLF, 2006):

$$\nu = \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) c_s^2 \quad (3.28)$$

onde ν é a viscosidade cinemática e c_s é a velocidade do som no fluido.

Além do modelo BGK para a estimativa do operador de colisão, há também um modelo que utiliza múltiplos tempos de relaxação (MRT, do inglês *multiple relaxation time*). Neste caso, uma matriz com diferentes valores de tempos de relaxação é utilizada para relaxar as funções de distribuição até a distribuição de equilíbrio, e a equação de lattice Boltzmann com múltiplos tempos de relaxação assume a seguinte forma (MRT-LBE) (GUO; SHU, 2013):

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\Lambda(f_i - f_i^{eq}), \quad (3.29)$$

em que Λ é a matriz de colisão, que contém diversos valores para os tempos de relaxação. Assim como o modelo BGK, que possui os pesos associados a cada arranjo de rede, a matriz Λ também é diferente para cada um dos arranjos dos *lattices*.

Este método surgiu devido a certas instabilidades numéricas apresentadas pelo BGK quando, por exemplo, o valor do tempo de relaxação é próximo de 0.5 (DU; SHI; CHEN, 2006). Além disso, o modelo BGK é utilizado com número de Prandtl (Pr) fixo, igual a unidade, enquanto o MRT é capaz de incorporar propriedades físicas e térmicas com número de Prandtl ajustável (D'HUMIÈRES et al., 2002; PREMANATH; ABRAHAM,

2007). No caso particular deste trabalho, como trata-se de um escoamento estável, no qual a transferência de calor não foi incluída na modelagem matemática, já que o escoamento através de um meio filtrante pode ser considerado um processo isotérmico, o modelo BGK foi utilizado.

3.2.4 Propriedades macroscópicas

Diferentemente dos modelos que consideram o fluido como um meio contínuo, as propriedades macroscópicas são calculadas a partir dos valores microscópicos das funções de distribuição. A massa específica (ρ), a velocidade (\mathbf{u}) e a pressão (p) são calculadas pelas relações (SUCCI, 2001; GUO; SHU, 2013; KRUEGER et al., 2017):

$$\rho = \sum f_i, \quad (3.30)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum f_i \mathbf{c}_i, \quad (3.31)$$

$$p = c_s^2 \rho. \quad (3.32)$$

3.2.5 Tipos de arranjos da rede

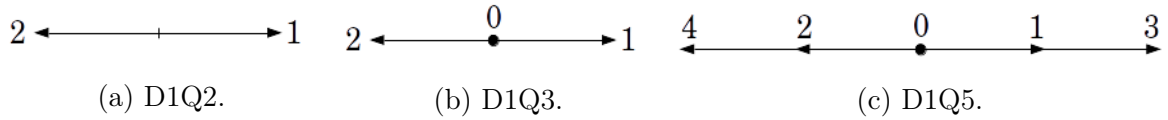
Quando se trabalha com métodos numéricos para resolver equações diferenciais, como o método dos volumes finitos (MVF), é necessário discretizar o domínio construindo uma malha sobre a geometria a ser simulada. Esta malha pode ser composta por elementos tetraédricos, hexaédricos ou poliédricos, podendo ser uniforme ou não. Estima-se que a maior parte do tempo gasto em análises de fluidodinâmica computacional (CFD) é dedicado à geração de malhas (TU; YEOH; LIU, 2008). Mesmo quando pacotes comerciais automáticos são utilizados, é necessário que o usuário faça ajustes finos, especialmente quando as geometrias são complexas, a fim de garantir boa qualidade da malha e evitar problemas de instabilidade numérica. No caso do método de lattice Boltzmann, a malha é facilmente construída pela definição do espaçamento entre os nós. A criação de um *grid* uniforme apenas pela definição de um parâmetro é uma das grandes vantagens da utilização do método de lattice Boltzmann.

Em cada nó (ou *lattice*) existem diferentes velocidades discretas. A terminologia utilizada para se definir o arranjo da rede é dada como $DdQq$, em que d se refere ao número de dimensões do problema, e q à quantidade de velocidades discretas em cada nó.

Para problemas unidimensionais, os arranjos mais comuns são D1Q2, D1Q3 e D1Q5 (Figura 3.4). Para duas dimensões, os arranjos D2Q4, D2Q5 e D2Q9 podem ser encontrados (Figura 3.5). Em geometrias tridimensionais, os arranjos D3Q15 e D3Q19

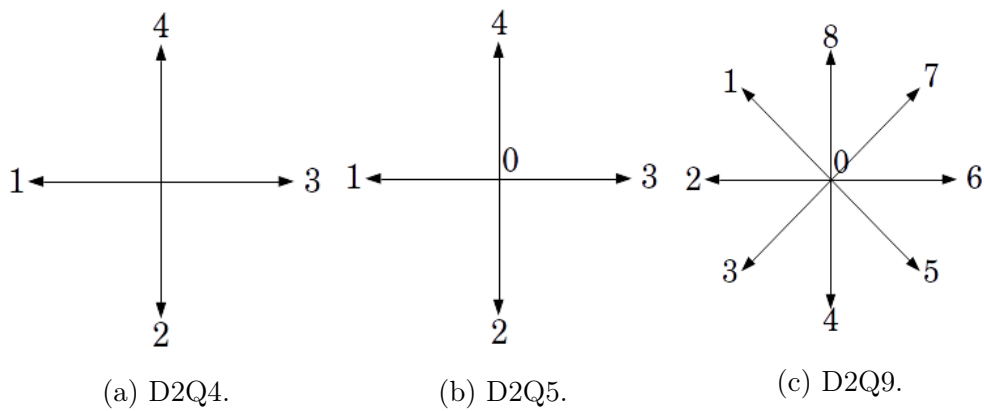
são utilizados (Figura 3.6), além de D3Q13 e D2Q27, que não estão representados na imagem.

Figura 3.4 – Arranjos em uma dimensão.



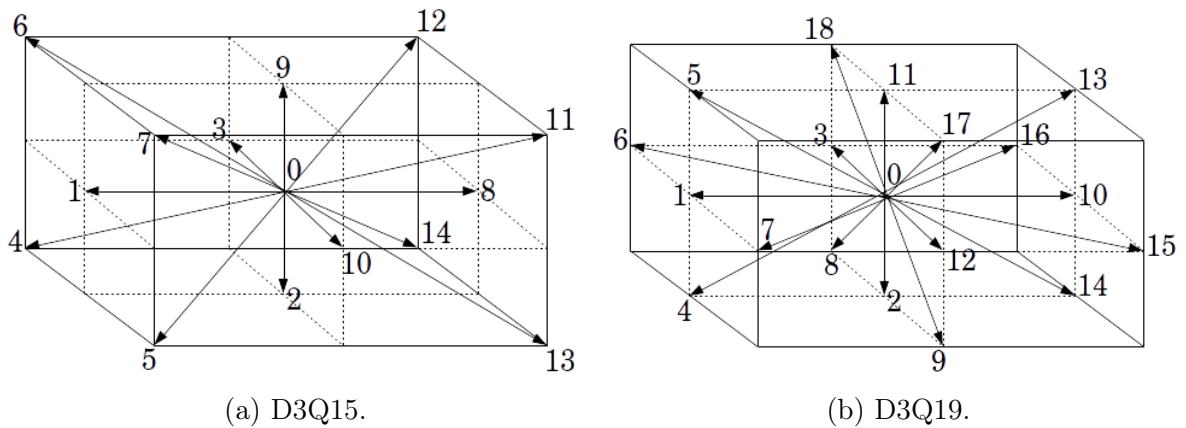
Fonte: Acervo pessoal.

Figura 3.5 – Arranjos em duas dimensões.



Fonte: Acervo pessoal.

Figura 3.6 – Arranjos em três dimensões.



Fonte: Acervo pessoal.

Para cada um dos arranjos, existem os pesos associados a cada uma das direções das velocidades discretas (w_i) e um valor para a velocidade do som na rede (c_s). Estes parâmetros estão resumidos na Tabela 3.1 (MOHAMAD, 2011; GUO; SHU, 2013). Os pesos e a velocidade do som na rede são calculadas através de equações matemáticas que relacionam as equações de lattice Boltzmann e de Navier-Stokes. Estas relações são obtidas considerando as leis de conservação de massa e momento e a isotropia da rede.

Tabela 3.1 – Parâmetros para diferentes arranjos de rede.

Arranjo	Direções da velocidade	Pesos (w_i)	Velocidade do som (c_s)
D1Q2	w_0	$1/2$	$1/\sqrt{2}$
	w_1	$1/2$	
D1Q3	w_0	0	$1/\sqrt{3}$
	w_1	1	
	w_2	-1	
D1Q5	w_0	$6/12$	$1/\sqrt{3}$
	w_1, w_2	$1/6$	
	w_3	$1/12$	
D2Q4	w_0, w_1, w_2, w_3	$1/4$	$1/\sqrt{2}$
D2Q5	w_0	$1/3$	1
	w_1, w_2, w_3, w_4	$1/6$	
D2Q9	w_0	$4/9$	$1/\sqrt{3}$
	w_1, w_3, w_5, w_7	$1/36$	
	w_2, w_4, w_6, w_8	$1/9$	
D3Q15	w_0	$4/9$	$1/\sqrt{3}$
	$w_1, w_2, w_3, w_8, w_9, w_{10}$	$1/9$	
	$w_4, w_5, w_6, w_7,$ $w_{11}, w_{12}, w_{13}, w_{14}$	$1/72$	
D3Q19	w_0	$1/3$	$1/\sqrt{3}$
	$w_1, w_2, w_3, w_{10}, w_{11}, w_{12}$	$1/18$	
	$w_4, w_5, w_6, w_7, w_8, w_9,$ $w_{13}, w_{14}, w_{15}, w_{16}, w_{17}, w_{18}$	$1/36$	

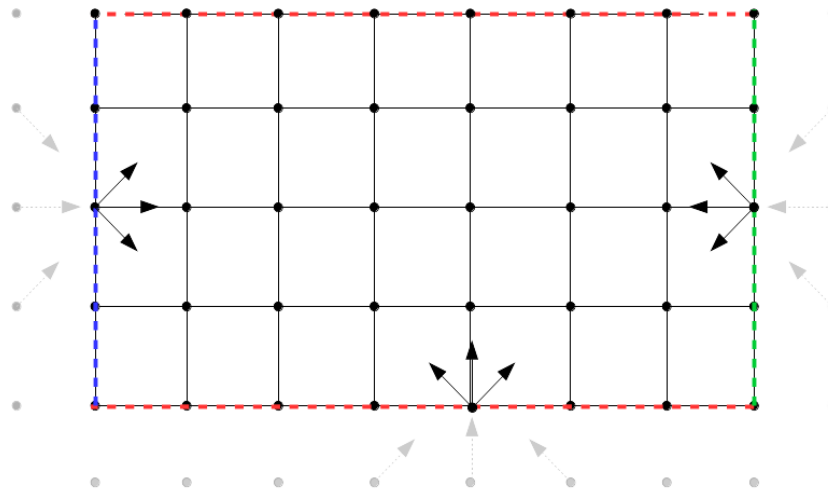
Fonte: Guo e Shu (2013).

3.2.6 Condições iniciais e de contorno

Para o processo de atualização das funções de distribuição, é necessário estabelecer uma condição inicial das partículas. Para tal, pode-se definir os valores das funções f como os valores da função de equilíbrio, com velocidade macroscópica e massa específica para algum valor fixo.

As condições de contorno utilizadas nas fronteiras da geometria a ser simulada também devem ser definidas. Estas condições surgem da necessidade de se estimar os valores das funções de distribuição a partir de valores físicos, como velocidade e pressão nas fronteiras. A Figura 3.7 ilustra uma geometria simples, em que o arranjo D2Q9 é considerado, na qual as linhas pontilhadas em azul, verde e vermelho representam as fronteiras com a entrada, a saída de fluido e a parede sólida, respectivamente. Os nós assinalados em cinza deveriam fornecer os valores para as funções de distribuição marcadas em preto, durante a etapa de propagação. Nesta etapa, as funções de distribuição marcadas em cinza deveriam ser transportadas para os nós vizinhos e assim teríamos os valores para as funções de distribuição em preto. Porém, como estes nós em cinzas não existem, as funções de distribuição em preto são desconhecidas após a etapa de propagação. Dessa forma, é necessário se estabelecer regras para os valores das funções de distribuição desconhecidas.

Figura 3.7 – Funções de distribuição desconhecidas nas fronteiras.

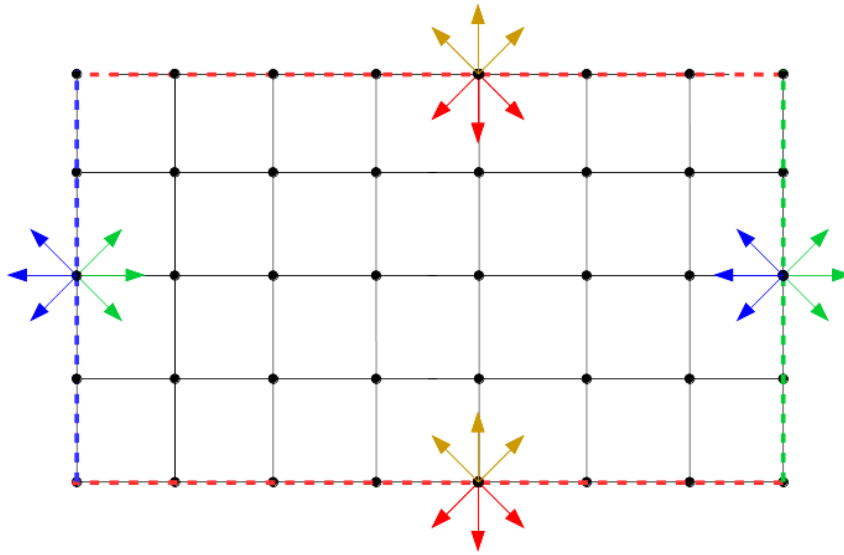


Fonte: Acervo pessoal.

Nas fronteiras abertas, é comum se fixar um fluxo de entrada e uma condição de zero gradiente na saída. Para o primeiro caso, as funções de distribuição com valores desconhecidos (em preto na Figura 3.7) são definidas como as respectivas funções no estado de equilíbrio, dada uma densidade e velocidade macroscópica fixa. No caso de problemas de escoamento, é comum prescrever a velocidade ou o perfil de escoamento de entrada de um fluido em um sistema. Para uma fronteira aberta na qual deseja-se fixar a pressão, um valor para a massa específica do fluido pode ser especificado, já que no método de lattice Boltzmann a pressão é proporcional à densidade do fluido. Esta é uma condição de contorno bastante utilizada para saída de um sistema fechado no qual o fluido escoar (NEUMANN, 2013). Outra condição de contorno aberta bastante utilizada é a periódica. Ela é caracterizada pela conectividade entre duas fronteiras do domínio computacional, e é utilizada quando se tem a intenção de isolar o fenômeno de fronteiras reais, sendo adequada quando os efeitos de superfície são desprezíveis. Como resultado, tem-se um sistema infinito, composto apenas por repetições do mesmo domínio (SUCCI, 2001). Na Figura 3.8, observa-se que as funções de distribuição em verde são conhecidas na fronteira do lado direito, uma vez que há nós à esquerda. Estas funções são, então, projetadas para a fronteira da esquerda (setas em verde). Analogamente, as funções de distribuição em azul, do lado esquerdo da figura, são conhecidas e, por sua vez, são transportadas para o lado direito. Seguindo o mesmo raciocínio, as funções de distribuição são copiadas entre as fronteiras horizontais superior e inferior.

Além das condições de contorno abertas, existem também as fronteiras fechadas, nas quais o fluido está em contato com uma superfície sólida. Como já mencionado, são necessárias regras de reflexão para que as funções de distribuição com valores desconhecidos (em preto na Figura 3.7) sejam estimadas. A condição mais utilizada é a situação quando a velocidade da camada de fluido em contato com a parede é nula em relação à fronteira, ou seja, o atrito entre o fluido e a parede é máximo. Esta é a

Figura 3.8 – Condição de contorno periódica.



Fonte: Acervo pessoal.

condição de não-escorregamento nos modelos macroscópicos, que é reproduzida em escala mesoscópica através da inversão das distribuições de partículas na direção exatamente contrária à superfície de contato, e é conhecida como *bounce back* nos modelos de lattice Boltzmann. Na Figura 3.9, a distribuição f_i é transportada do nó \mathbf{x}_f para o nó \mathbf{x}_s . De acordo com a reflexão característica do *bounce back*, a função seria projetada novamente para o nó de origem (\mathbf{x}_f) como f_{bb} . A regra de reflexão das distribuições para a condição de não-escorregamento pode ser computada como (GUO; SHU, 2013):

$$f_{bb}(\mathbf{x}_s, t) = f_i(\mathbf{x}_f, t), \quad (3.33)$$

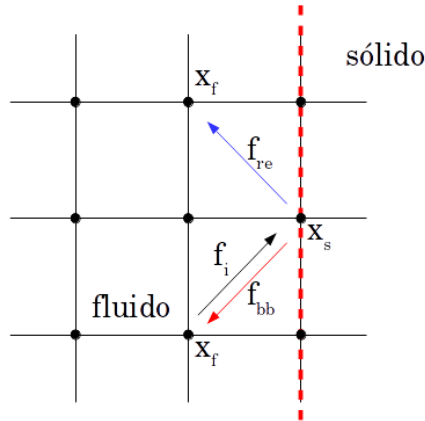
$$\mathbf{c}_{bb} = -\mathbf{c}_i, \quad (3.34)$$

em que \mathbf{c}_{bb} é a velocidade discreta referente à f_{bb} . Neste caso, ambas velocidades tangencial e normal à superfície sólida são nulas.

Outra condição utilizada em sistemas fechados é o oposto do *bounce back*, na qual não existe atrito entre a camada de fluido e a superfície sólida, e a velocidade não é nula. Em escala mesoscópica, esta condição de contorno pode ser reproduzida através da reflexão especular das funções de distribuição. Neste caso, de acordo com a Figura 3.9, a função de distribuição f_i que chega ao nó \mathbf{x}_s é refletida de forma especular, ao nó \mathbf{x}_f (mais ao norte na Figura 3.9), como f_{re} . A regra de reflexão especular pode ser computada da seguinte forma (GUO; SHU, 2013):

$$f_{re}(\mathbf{x}_s, t) = f_i(\mathbf{x}_f, t), \quad (3.35)$$

$$\mathbf{c}_{re} = -\mathbf{c}_i - 2(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}, \quad (3.36)$$

Figura 3.9 – Condições de contorno *bounce back* e reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

onde \mathbf{c}_{re} é a velocidade discreta referente à função de distribuição f_{re} e \mathbf{n} é o vetor normal à superfície sólida. Esta condição de contorno é caracterizada por ter o gradiente da velocidade tangencial e a componente normal da velocidade nulos.

Uma terceira condição de contorno para superfícies sólidas é o escorregamento parcial. Trata-se de uma combinação entre as duas condições de contorno anteriormente descritas. O fenômeno de escorregamento surge porque o equilíbrio termodinâmico local de momento e temperatura não é atingido, sendo observado em casos de escoamentos a baixa pressão ou quando as dimensões geométricas são muito pequenas, da ordem do caminho livre médio das moléculas. Assim, o impacto entre as moléculas do gás e as fronteiras é menos frequente, e o equilíbrio não é atingido (TRONVILLE; ZHOU; RIVERS, 2013). Esta condição pode ser reproduzida através de uma combinação entre a reflexão especular e o *bounce back*, com um coeficiente de reflexão ou coeficiente de escorregamento r , que assume valores de 0 a 1, ajustando a “intensidade” do escorregamento (SUCCI, 2002):

$$r f_{bb}(\mathbf{x}_s, t) + (1 - r) f_{re}(\mathbf{x}_s, t) = f_i(\mathbf{x}_f, t). \quad (3.37)$$

Pela Equação 3.37, pode-se observar que quando $r = 1$, a condição de *bounce back* é recuperada, e quando $r = 0$, tem-se a condição de reflexão especular.

Além de representar a condição de escorregamento, a reflexão especular também pode ser utilizada para implementação da condição de simetria, que impõe um “espelho” na fronteira desejada. Esta condição é bastante útil quando o fenômeno é simétrico a algum plano e tem-se a opção de simular apenas metade do domínio, poupando custo computacional.

3.2.7 Algoritmo básico da biblioteca OpenLB

Neste trabalho, a biblioteca OpenLB foi utilizada para resolver as simulações pelo método de lattice Boltzmann. Trata-se de um código aberto em linguagem C++, utilizado

para simular fenômenos físicos de diversas naturezas. O código permite a paralelização dos processos de forma bastante eficiente, permitindo a utilização de vários núcleos de processamento para que menos tempo de simulação seja gasto (HEUVELINE; KRAUSE; LATT, 2009). O projeto teve seu início em 2006, e é coordenado pelo Dr. Mathias Krause, do Instituto de Tecnologia de Karlsruhe (KIT), na Alemanha. Hoje conta com a colaboração de desenvolvedores de outras instituições, como a Universidade Tecnológica de Munique (Alemanha), Universidade (Hochschule) de Mannheim (Alemanha), a Universidade de Tunis El Manar (Tunísia), entre outras instituições e empresas.

Os passos seguidos para a implementação do método de lattice Boltzmann no código OpenLB consistem em:

- escolha do arranjo da rede ($DqQq$);
- escolha das propriedades do fluido, como densidade (ρ) e viscosidade (μ);
- definição do parâmetro de discretização ou espaçamento entre os nós ($latticeL$);
- escolha dos parâmetros característicos da simulação, como comprimento ($charL$) e velocidade ($charU$);
- conversão entre unidades físicas e de rede;
- *input* da geometria, voxelização e atribuição dos materiais;
- definição das condições iniciais e de contorno;
- cálculo da frequência de relaxação ω , que é recomendável ser menor que 2, ou $0 < \tau < 0.5$ já que $\omega = \frac{1}{\tau}$, para garantir estabilidade numérica no modelo LBGK, como mencionado anteriormente;
- atualização das funções de distribuição, pela Equação 3.21;
- cálculo das grandezas de interesse, pelas Equações 3.30, 3.31 e 3.32;
- *output* dos resultados.

As propriedades do fluido e os parâmetros de discretização são definidos pelo usuário em unidades físicas (geralmente no S.I., sistema internacional de unidades). Entretanto, o método trabalha com unidades de rede e, portanto, uma conversão deve ser realizada antes do início da simulação. Na biblioteca OpenLB, esta conversão é realizada pela classe **LBconverter**, que permite converter unidades métricas em unidades de rede, e *vice versa*. Como entrada, o usuário deve fornecer o comprimento característico ($charL$), que está relacionado com as dimensões da geometria, e a velocidade característica ($charU$), que pode ter relação com o fluxo de entrada de fluido no sistema, ambos em unidades físicas. Além disso, o parâmetro $latticeL$ também deve ser definido pelo usuário, o qual

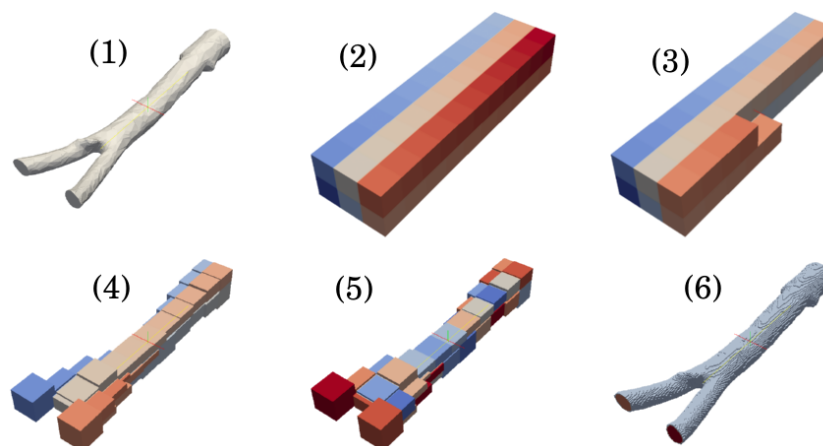
corresponde à distância entre os nós, em unidades físicas. A partir deste último, o parâmetro de discretização espacial adimensional (δx) é calculado como:

$$\delta x = \frac{latticeL}{charL}. \quad (3.38)$$

Para calcular o parâmetro de discretização temporal adimensional (δt), é necessário fornecer também mais um parâmetro de entrada, chamado *latticeU*. Este último é proporcional ao número de Mach (adimensional entre a velocidade do escoamento e a velocidade do som no meio) e, por este motivo, *latticeU* é utilizado para se controlar os efeitos de compressibilidade do escoamento e é tido como entrada da simulação, ao invés de fornecer diretamente o parâmetro de discretização temporal adimensional (KRAUSE, 2016).

Após a escolha das propriedades e parâmetros da simulação, é necessário definir a geometria do problema. Isto pode ser realizado de duas formas: utilizando as funções **Indicator**, já implementadas no código, para construir geometrias bi ou tridimensionais a partir de formas geométricas simples, como linhas, círculos, retângulos e elipses, ou importando um arquivo em formato STL. A seguir, é necessário transformar a geometria em diversos *voxels*, que são os pequenos cubos cujos vértices são os nós onde as funções de distribuição são definidas. Este processo é chamado voxelização, como ilustrado na Figura 3.10. A etapa (1) mostra uma geometria em formato STL, utilizada como *input* na simulação. O passo (2) consiste em criar sub-domínios menores que compreendam toda a geometria importada, (3) sendo que aqueles *voxels* que não fazem parte da geometria são removidos. Os sub-domínios remanescentes são reduzidos em tamanho (4), e em seguida são atribuídos a funções que tem como objetivo a comunicação entre cada sub-domínio (5). Por fim, o domínio computacional é obtido (6), constituindo a estrutura **superGeometry** associada ao código OpenLB.

Figura 3.10 – Processo de criação da geometria e voxelização.



Fonte: Krause (2016).

Cada nó é nomeado como **Cell** no código OpenLB, sendo que um conjunto de nós é

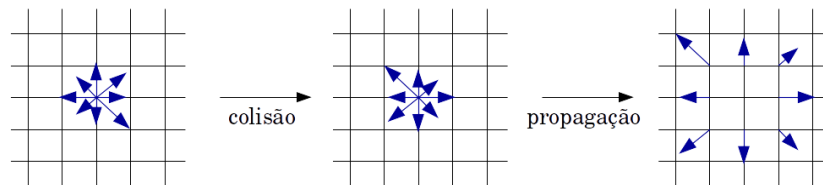
A atualização das funções de distribuição é realizada através das etapas de colisão e propagação (Figura 3.13). Durante o processo de colisão, a magnitude da função f_i é alterada, e durante a etapa de propagação as distribuições f_i se movem para os nós vizinhos, de acordo com as direções das velocidades discretas \mathbf{c}_i . A Equação 3.21 pode ser dividida nestas duas etapas, para fins de implementação:

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{eq}), \quad (3.39)$$

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, t + \Delta t) = \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t), \quad (3.40)$$

em que \tilde{f}_i é um valor intermediário. A Equação 3.39 representa a etapa de colisão, que é um processo local, e acontece em cada nó do domínio computacional. Este passo consiste basicamente no cálculo das grandezas macroscópicas densidade ρ e velocidade macroscópica v , para que seja possível encontrar as funções de distribuição no equilíbrio, e então os valores intermediários pós-colisão \tilde{f}_i . A Equação 3.40 se refere à etapa de propagação, que não é local, e depende dos nós vizinhos. Neste processo, as funções de distribuição intermediárias \tilde{f}_i são propagadas aos nós vizinhos.

Figura 3.13 – Etapas de colisão e propagação.



Fonte: Acervo pessoal.

O algoritmo básico para cálculos envolvendo o método de lattice Boltzmann pode ser resumido da seguinte forma:

Algoritmo 1: esquema LBM

Entrada dos parâmetros da simulação e conversão entre unidades físicas e de rede

Definição da geometria (arquivos STL ou **Indicators**)

Definição da distribuição inicial de equilíbrio

Definição das condições de contorno

for $t < t_{máx}$ **do**

 Etapa de colisão;

 Etapa de propagação;

 Pós-processamento;

end

Output dos resultados

3.3 O efeito de escorregamento

Na grande parte dos trabalhos envolvendo fluidodinâmica computacional com aplicações em engenharia, a condição de não-escorregamento é bastante utilizada. A razão para isto é que a maioria dos processos ocorre na faixa em que o fluido pode ser considerado um meio contínuo, na qual o comprimento característico do domínio computacional é muito maior quando comparado ao caminho livre médio das partículas. O que ocorre nestes casos é que a força de atração entre as moléculas do gás e da superfície sólida (adesão) é maior do que a força observada entre as moléculas do gás (coesão), fazendo com que as moléculas do gás que estão em contato com a superfície não se movam. Logo, a velocidade relativa entre o fluido e a fronteira sólida é nula. O critério para determinação da continuidade do fluido é o número adimensional de Knudsen (Kn), definido como:

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (3.41)$$

onde λ é o caminho livre médio das moléculas e L é o comprimento característico do domínio a ser simulado. Este número adimensional é responsável por definir as faixas de regimes de escoamentos. O comprimento característico depende do tipo de modelo geométrico utilizado nas simulações. Por exemplo, para um meio filtrante, o diâmetro médio das fibras pode ser definido como comprimento característico; para um duto fechado, o diâmetro do mesmo pode ser utilizado; para uma placa, o comprimento pode ser considerado. De acordo com Gad-el-Hak (2003), Barber e Emerson (2006) e Zhang, Meng e Wei (2012), a seguinte divisão pode ser estabelecida para as faixas de Knudsen:

- $Kn < 10^{-2}$: a aproximação do fluido de um meio contínuo é válida, e as equações de Navier-Stokes podem ser resolvidas com as condições de contorno de não-escorregamento. Neste caso, as propriedades do fluido como densidade, pressão, velocidade e tensão de cisalhamento podem ser definidas como uma média de todos os elementos do fluido, de forma que estes elementos são suficientemente grandes quando comparados com a estrutura microscópica do fluido, porém pequenos o suficiente em relação aos gradientes macroscópicos, a fim de garantir boa aproximação das variações das propriedades do fluido. Neste regime de escoamento, o equilíbrio termodinâmico local é atingido, o que significa que as propriedades macroscópicas do fluido possuem tempo suficiente para se ajustarem às fronteiras. O equilíbrio termodinâmico depende do tempo entre as colisões moleculares e, caso as escalas temporal e de comprimento das colisões moleculares sejam pequenas quando comparadas às variações do escoamento, o fluido se ajusta rapidamente, atingindo o equilíbrio. Estima-se que as moléculas do ar, em condições padrões (288 K e 1 atm), colidem uma média de 10 vezes a cada nanosegundo e percorre uma distância de aproximadamente 1 μm neste mesmo intervalo de tempo (GAD-EL-HAK,

2003). A escala de comprimento é representada pelo caminho livre médio das moléculas e, quando este parâmetro é muito menor que o comprimento característico da geometria, as propriedades macroscópicas variam de modo aproximadamente linear no espaço. Assim, no equilíbrio, a tensão de cisalhamento é linearmente dependente da taxa de deformação (lei de Newton da viscosidade) e o fluxo de calor é linearmente proporcional ao gradiente de temperatura (lei de Fourier). Estas relações podem ser representadas na modelagem matemática pela condição de contorno de não-escorregamento na interface gás-sólido e pela igualdade de temperaturas entre fluido e a parede;

- $10^{-2} < Kn < 10^{-1}$: nesta faixa, tem-se o regime de escorregamento, sendo que os efeitos de não-equilíbrio dominam próximo à superfície sólida, e a condição de não-escorregamento não se apresenta mais como uma boa aproximação. Neste regime de escoamento, a noção de equilíbrio termodinâmico local torna-se inválida, ocorrendo uma descontinuidade na velocidade e na temperatura próximo à superfície sólida, dando origem ao escorregamento;
- $10^{-1} < Kn < 10$: conhecido como regime de transição, a hipótese de que o fluido pode ser considerado um meio contínuo começa a falhar. Neste caso, a equação de Boltzmann pode ser utilizada, juntamente com as aproximações para os efeitos de escorregamento entre a camada de fluido e a superfície sólida;
- $Kn > 10$: as colisões entre pares de moléculas do gás são desprezíveis quando comparadas às colisões entre as moléculas do gás e as fronteiras, e a dinâmica molecular deve ser utilizada para se estimar o escoamento.

Como descrito anteriormente, alguns cuidados devem ser tomados quando o número de Knudsen assume um valor considerável, como é o caso da escolha da condição de contorno na superfície dos corpos com dimensão reduzida. Este comportamento é observado, também, em situações de sistemas operando a pressão baixas, nas quais o gás é rarefeito e os choques entre as moléculas do gás e as fronteiras sólidas ocorrem com menos frequência.

3.4 Estudos relacionados: escoamento em meios filtrantes

As simulações de escoamentos através de meios filtrantes fibrosos requerem simplificações inevitáveis da geometria real do meio filtrante, que é um emaranhado complexo de fibras. Antes do desenvolvimento da fluidodinâmica computacional (CFD), foram realizados vários estudos analíticos com o objetivo de estimar a queda de pressão e a eficiência de coleta de partículas utilizando geometrias relativamente simples. Happel (1959) e Kuwabara (1959) utilizaram uma geometria bidimensional contendo uma única fibra com seção transversal circular; Spielman e Goren (1968), Yeh e Liu (1974),

Sangani e Acrivos (1982), Brown (1984) e Ingham, Hildyard e Heggs (1989) utilizaram arranjos regulares de fibras com diâmetros uniformes. Kirsch, Stechkina e Fuchs (1973) desenvolveram modelos analíticos capazes de prever a queda de pressão em meios filtrantes com seção circular, de mesmo diâmetro, e posicionadas não uniformemente. Kirsch, Stechkina e Fuchs (1974) desenvolveram estudos semelhantes, porém consideraram um arranjo de fibras com diferentes tamanhos. Lee e Liu (1982) desenvolveram expressões capazes de descrever a eficiência de deposição pelos mecanismos de interceptação direta e de difusão, para meios filtrantes fibrosos. Moelter et al. (1993) ampliaram o conceito da análise do desempenho de um meio filtrante através de uma única fibra para uma distribuição de diâmetros. Basicamente, nos estudos analíticos a queda de pressão e a penetração do meio filtrante são calculados em função de características das fibras, do meio filtrante e do fluido.

Entretanto, os estudos analíticos não são capazes de fornecer resultados dos campos de pressão e velocidade ponto-a-ponto do domínio computacional, e nem a trajetória das partículas ao longo do meio filtrante. O desenvolvimento da fluidodinâmica computacional permitiu que isso fosse possível, além de ter viabilizado o uso de geometrias mais complexas e condições de contorno mais precisas. Fardi e Liu (1992) calcularam o escoamento ao redor de fibras retangulares e circulares, enquanto Liu e Wang (1996) e Rao e Faghri (1988) consideraram apenas fibras de mesmo diâmetro com seção transversal circular, e Pedras e Lemos (2003) utilizaram elipses para representar as fibras. Jordan e Fissan (1997) determinaram a trajetória de partículas ao redor de uma única fibra cilíndrica sob a ação dos mecanismos de impactação inercial, interceptação, difusão, e forças elétricas, utilizando uma abordagem Lagrangeana. Analogamente, Wang et al. (2012) e Ilias e Douglas (1989) também estimaram a trajetória e eficiência de coleta de partículas sobre uma única fibra de seção circular, utilizando a fluidodinâmica computacional. Luecke et al. (1993) resolveram as equações de Navier-Stokes iterativamente a fim de calcular o escoamento ao redor de fibras posicionadas aleatoriamente, em um sistema bidimensional. Tronville e Rivers (2005), Tronville e Rivers (2006) e Herman, Lehmann e Velu (2006) utilizaram arranjos de fibras circulares localizadas randomicamente para a estimativa do desempenho de meios filtrantes através do cálculo do escoamento ao redor das fibras. Qian, Zhang e Huang (2009), Hosseini e Tafreshi (2010a), Wang et al. (2013) e Rabiee et al. (2015) geraram um domínio computacional composto por fibras circulares de mesmo diâmetro, e diferentes frações de sólido.

Além dos modelos bidimensionais empregados nas simulações em CFD, alguns trabalhos utilizaram geometrias tridimensionais para representar o meio filtrante. Filippova e Haenel (1996) calcularam o escoamento gás-sólido ao redor de fibras com formato cilíndrico; Bergman e Corey (1999) realizaram estudo semelhante, porém os cilindros foram dispostos perpendicularmente e paralelamente entre si. Wang et al. (2006),

Maze et al. (2007), Hosseini e Tafreshi (2010b) e Hosseini e Tafreshi (2010c) também consideraram as fibras com formato cilíndrico, diâmetro uniforme e posicionadas de forma não-organizada. A quantidade de fibras foi variada a fim de se considerar diferentes frações de sólido. A técnica utilizada por Sambaer, Zatloukal e Kimmer (2011) e Sambaer, Zatloukal e Kimmer (2012) para construir um modelo computacional do meio filtrante inclui mais detalhes que aquelas apresentadas até o momento. Os autores construíram as geometrias utilizadas nas simulações através de análise de imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) dos meios filtrantes. A estratégia utilizada pelos autores é baseada na técnica de esqueletonização, na qual linhas centrais são traçadas em todas as fibras, através da análise dos *pixels*. Em seguida, cada *pixel* central é considerado como uma esfera de raio zero, o qual vai sendo aumentado gradativamente, até que um *pixel* de cor diferente (que representa os limites das fibras) é atingido. Com exceção dos dois últimos trabalhos citados e em Tronville e Rivers (2005) e Tronville e Rivers (2006), todos os demais apontados anteriormente consideram modelos simplistas de meios filtrantes constituídos por seções transversais circulares ou retangulares que não foram baseadas em meios filtrantes existentes. As geometrias apenas se assemelham a um emaranhado de fibras, sem quaisquer características como distribuição de diâmetros ou fração de sólidos baseadas em meios filtrantes reais. Apesar de os estudos fornecerem relações úteis para queda de pressão, força de arraste ou deposição de partículas, por exemplo, nem sempre elas podem ser aplicadas a qualquer meio filtrante, devido às particularidades e a complexidade que cada um apresenta. Além disso, a maioria das abordagens não é capaz de fornecer grandezas discretas no tempo e no espaço ao longo do meio filtrante, e sim estimativas globais de arranjos ordenados ou não-ordenados, circulares, elípticos ou retangulares. Assim, um dos pontos de investigação deste trabalho foi fornecer um método para a geração de modelos geométricos de meios filtrantes fibrosos baseados em características do mesmo, como a distribuição de diâmetros e a fração de sólidos. Ainda que simplificado, o método apresentado aqui permite a utilização de geometrias de meios filtrantes reais em simulações numéricas que levam a uma investigação mais detalhada do escoamento no interior do elemento filtrante.

O número adimensional de Knudsen, definido anteriormente, geralmente assume valores consideravelmente altos quando a dimensão da geometria do sistema é da mesma ordem de grandeza que o caminho livre médio das moléculas, ou em sistemas de baixa pressão. No caso particular dos meios filtrantes fibrosos, as fibras possuem diâmetros variando de poucos nanômetros até maiores que $50 \mu m$. O interesse em nanotecnologia é devido ao fato de que quando os materiais são compostos por partículas em nanoescala, há uma melhoria significativa nas propriedades mecânicas, ópticas e eletromagnéticas (CHEN et al., 1998). Nas últimas décadas, o interesse em escoamentos na escala micro e nanométrica vem crescendo devido ao desenvolvimento dos sistemas microeletrônicos, que envolvem dispositivos de tamanho bastante reduzido (LIM et al., 2002; GUO; ZHAO;

SHI, 2006; GUO et al., 2007; SUGA, 2013; YUAN; RAHMAN, 2016; ZHOU et al., 2017b). Além dos microdispositivos, tem-se observado a aplicação de escoamentos em escala reduzida na produção de gás de xisto, que é encontrado em meio a estruturas rochosas com poros da ordem de micrômetros ou nanômetros (ZHANG et al., 2014; LI et al., 2015; WANG et al., 2016). No âmbito da filtração, há relatos de que as nanofibras são capazes de aumentar a eficiência de coleta dos meios filtrantes, por apresentarem maior área superficial (GRAHAM et al., 2002; PODGÓRSKI; BALAZY; GRADOŃ, 2006). Sendo assim, em alguns casos, a escolha das equações governantes e das condições de contorno deve ser feita cuidadosamente.

A grande parte dos estudos envolvendo simulações numéricas em meios filtrantes utilizou as equações de Navier-Stokes para obter o escoamento do gás (RAO; FAGHRI, 1988; ILIAS; DOUGLAS, 1989; FARIDI; LIU, 1992; LIU; WANG, 1996; BERGMAN; COREY, 1999; PEDRAS; LEMOS, 2003; TRONVILLE; RIVERS, 2005; TRONVILLE; RIVERS, 2006; HERMAN; LEHMANN; VELU, 2006; WANG et al., 2006; WANG; KIM; PUI, 2008; QIAN; ZHANG; HUANG, 2009; HOSSEINI; TAFRESHI, 2010a; HOSSEINI; TAFRESHI, 2010b; HOSSEINI; TAFRESHI, 2010c). Dentre estes trabalhos, alguns apenas avaliaram o comportamento da eficiência de coleta (Rao e Faghri (1988)), que observaram a forte dependência da eficiência de coleta com fatores como o tamanho das partículas, a fração de sólidos do meio filtrante e as propriedades do fluido, e (Qian, Zhang e Huang (2009)), que verificaram que a queda de pressão varia linearmente com a velocidade superficial, e que a eficiência de coleta diminui com o aumento da velocidade superficial para partículas submicrométricas, e apresenta comportamento oposto para partículas maiores que um micrômetro. Outros, avaliaram o comportamento da força de arraste (Fardi e Liu (1992)) de acordo com a disposição dos obstáculos que representam as fibras. Outros, escolheram o diâmetro dos círculos e cilindros de forma a eliminar o problema da não-continuidade, ou seja, adotaram um tamanho aleatório de fibras maior do que o limite para o regime de escorregamento (Bergman e Corey (1999)). Alguns autores (Ilias e Douglas (1989), Liu e Wang (1996) e Pedras e Lemos (2003)) adimensionalizam o problema, também descartando a possibilidade de valores altos para o número de Knudsen. Na modelagem de Wang, Kim e Pui (2008), a fração de sólidos do modelo matemático foi ajustada a fim de se obter um valor próximo da queda de pressão determinada experimentalmente e, então, o modelo ajustado foi utilizado para se estimar a eficiência de coleta. Os autores observaram que a eficiência de coleta do meio filtrante varia exponencialmente com a espessura, com fração de sólidos do meio filtrante e com o diâmetro das fibras; para a queda de pressão, observou-se uma relação linear com a espessura e exponencial com a fração de sólidos e com o tamanho das fibras. Por outro lado, em outros estudos, os autores levaram em conta as características reais do meio filtrante, para avaliação da disposição das fibras (Herman, Lehmann e Velu (2006)) ou para a análise da condição de contorno de escorregamento (Tronville e Rivers

(2005), Tronville e Rivers (2006), Hosseini e Tafreshi (2010a), Hosseini e Tafreshi (2010b) e Hosseini e Tafreshi (2010c)). Nestes últimos estudos, observou-se a importância da consideração da condição de contorno de escorregamento quando se utiliza as equações de Navier-Stokes para o cálculo do escoamento do gás.

Karniadakis, Beskok e Aluru (2005) mostraram que as equações de Navier-Stokes podem ser resolvidas para escoamentos compressíveis no regime de escorregamento. Entretanto, de acordo com os autores, a implementação das equações e das condições de contorno são complexas e o processamento pode ser instável para altos valores do adimensional de Knudsen. Apesar de a equação de lattice Boltzmann convergir para as equações de Navier-Stokes (SAINT-RAYMOND, 2009), alguns estudos mostram que o método de lattice Boltzmann é mais indicado para aplicações de micro-escoamentos, quando se considera a relação adequada entre o número adimensional de Knudsen e o tempo de relaxação (NIU; SHU; CHEW, 2004; GUO; ZHAO; SHI, 2006). Alguns trabalhos, mais recentes do que aqueles que utilizaram as equações de Navier-Stokes, empregaram o método de lattice Boltzmann na modelagem do escoamento em meios filtrantes para fins semelhantes aos anteriores (FILIPPOVA; HAENEL, 1996; WANG et al., 2012; FEUCHTER et al., 2013; WANG et al., 2013; RABIEE et al., 2015; CAI; ZHANG, 2016; ZHOU et al., 2017a). Wang et al. (2012) e Cai e Zhang (2016) avaliaram a formação de dendritos em fibras circulares, e Filippova e Haenel (1996) verificou a necessidade de modificação da geometria do meio filtrante após a deposição, enquanto Wang et al. (2013) e Rabiee et al. (2015) avaliaram como a disposição das fibras influencia na queda de pressão e na eficiência de coleta, em modelos bidimensionais, todos utilizando o método de lattice Boltzmann na modelagem do escoamento. Feuchter et al. (2013) estimou a queda de pressão em meios filtrantes compostos por nanofibras através da incorporação da condição de contorno de escorregamento nas superfícies das fibras, pela abordagem macroscópica; já Zhou et al. (2017a) realizou a modelagem para o mesmo fim, de forma semelhante, porém empregou a abordagem microscópica na implementação da condição de contorno de escorregamento. Entretanto, o autor considerou apenas quatro pontos de reflexão das funções de distribuições, mesmo considerando que a fibra é circular. Esta simplificação pode ocasionar em uma alteração na fração de sólidos do elemento filtrante quando a rede de nós é gerada.

A estratégia mais simplificada para a modelagem do escoamento de gás encontrada na literatura envolve a consideração de que as linhas de corrente do fluido não sofrem desvio quando escoam ao redor das fibras. Assim, os autores inferiram que o escorregamento nas superfícies das fibras seria grande o suficiente para tal consideração (MAZE et al., 2007). Em outros estudos, encontra-se ainda a suposição de que o escoamento assume um perfil de Poiseuille entre duas fibras (SAMBAER; ZATLOUKAL; KIMMER, 2011; SAMBAER; ZATLOUKAL; KIMMER, 2012). Nestas duas últimas situações, o escoamento não é calculado ponto a ponto, através de equações governantes.

Observa-se, então, que a maioria dos trabalhos envolve a resolução das equações de Navier-Stokes, com ou sem a consideração da condição de contorno de escorregamento. Dos poucos e recentes trabalhos encontrados na literatura que envolvem a aplicação do método de lattice Boltzmann em meios filtrantes, a grande maioria não considera os efeitos do escorregamento e não consideram a relação entre o número adimensional de Knudsen e o tempo de relaxação, como forma de adequação do método de lattice Boltzmann a situações envolvendo número de Knudsen considerável, como será detalhado a seguir.

Para que o método de lattice Boltzmann seja aplicado a sistemas de dimensões geométricas da ordem do caminho livre médio das moléculas, as estratégias iniciais assumiram que as etapas de colisão e propagação acontecem simultaneamente (LIM et al., 2002). Posteriormente, estudos mostraram que uma relação entre o parâmetro de relaxação e o número de Knudsen (Kn) pode ser deduzida a partir da teoria cinética dos gases, possibilitando a aplicação do método de lattice Boltzmann em regimes de escorregamento e de transição. Nie, Doolen e Chen (2002) foram os primeiros a desenvolverem uma relação entre Kn e τ . Os autores utilizaram um parâmetro artificial a , porém, de acordo com Niu, Shu e Chew (2004), esta relação dificilmente pode ser utilizada diretamente em diversas situações, pois este parâmetro é determinado através da comparação de dados das simulações com dados experimentais. Para contornar esta limitação, outros autores desenvolveram expressões baseadas em conceitos da teoria cinética dos gases, com diferentes equações para o cálculo das velocidades microscópicas (NIU; SHU; CHEW, 2004; LEE; LIN, 2005; TANG; TAO; HE, 2004; ZHANG et al., 2005). Mais recentemente, Guo, Zhao e Shi (2006) determinaram qual seria a velocidade microscópica que atenderia todos os requisitos da teoria cinética dos gases e, assim, uma relação entre o número adimensional de Knudsen e o tempo de relaxação, que pode ser utilizada em diversas situações. Para o modelo de esferas rígidas da teoria cinética dos gases, o caminho livre médio das moléculas λ é dado por (GUO; SHU, 2013):

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}n_{mol}\pi d_{mol}^2}, \quad (3.42)$$

em que n_{mol} é o número de moléculas e d_{mol} é o diâmetro da molécula. A análise de Chapman-Enskog (CHAPMAN; COWLING, 1970) mostra que a viscosidade de um gás, segundo o modelo de esferas rígidas, pode ser dada por:

$$\mu = 1,016 \frac{5}{16} \frac{M}{d_{mol}^2} \sqrt{\frac{RT}{\pi}}, \quad (3.43)$$

onde M é a massa molecular, R é a constante dos gases ideais e T é a temperatura. De acordo com Guo e Shu (2013), o caminho livre médio das moléculas e a viscosidade estão relacionados por:

$$\lambda = \frac{\mu}{p} \sqrt{\frac{\pi RT}{2}}, \quad (3.44)$$

sendo que a pressão é dada por $p = \rho RT$ e $R = k_B/M$, onde k_B é a constante de Boltzmann. Pode-se observar que as variáveis do lado direito da Equação 3.44 podem ser medidas experimentalmente, de forma que é possível calcular o valor do caminho livre médio das moléculas. Do modelo de Bhatnagar, Gross e Krook (BGK) (BHATNAGAR; GROSS; KROOK, 1954), sabe-se que o tempo de relaxação está relacionado com a viscosidade dinâmica como (GUO; SHU, 2013):

$$\mu = p(\tau - 0,5)\delta t, \quad (3.45)$$

sendo δt o parâmetro de discretização temporal. Substituindo a Equação 3.45 na Equação 3.44, chega-se a:

$$\lambda = \sqrt{\frac{\pi RT}{2}}(\tau - 0,5)\delta t. \quad (3.46)$$

Segundo o método de lattice Boltzmann, a velocidade na rede c é dada por $c = \delta x/\delta t = \mathcal{X}RT$, sendo \mathcal{X} uma constante associada ao modelo. Para os arranjos D1Q3, D2Q9, D3Q15 e D3Q19, $\mathcal{X} = 3$ (GUO; SHU, 2013). Reescrevendo a Equação 3.46 em função do parâmetro de discretização espacial, e rearranjando:

$$\tau = \frac{\lambda}{\delta x} \sqrt{\frac{6}{\pi}} + 0,5. \quad (3.47)$$

Por fim, sabendo que $Kn = \lambda/L$, sendo L o comprimento característico do domínio computacional, é possível escrever a Equação 3.47 em função do número adimensional de Knudsen:

$$\tau = \frac{KnL}{\delta x} \sqrt{\frac{6}{\pi}} + 0,5. \quad (3.48)$$

Segundo Guo e Shu (2013), esta relação é válida para o modelo BGK, e também para a abordagem que utiliza vários tempos de relaxação. Nie, Doolen e Chen (2002), Shen et al. (2004), Guo et al. (2007), Zhang et al. (2005), Liu e Guo (2013) apresentaram resultados promissores da utilização do método de lattice Boltzmann em situações cujo número de Knudsen (Kn) é considerável.

Além da relação entre o parâmetro de relaxação e o número de Knudsen, a condição de contorno na superfície das fibras também deve ser adequadamente escolhida para que o método de lattice Boltzmann represente os fenômenos em escala nano e micrométrica. Quando o equilíbrio termodinâmico entre a interface fluido-sólido é atingido, a velocidade relativa entre o fluido e a superfície sólida deve ser nula (assim como a temperatura do fluido deve ser igual à temperatura da fronteira, caso haja transferência de energia no sistema), e a condição de contorno de não-escorregamento resulta em boas aproximações. Entretanto, o equilíbrio termodinâmico só é atingido quando a frequência das colisões entre as moléculas do fluido e a fronteira é muito alta. Quando o número de Knudsen

assume um valor considerável, esta suposição passa a não ser tão precisa, uma vez que a frequência de colisão nestes casos não é suficiente para que o equilíbrio seja atingido, e as condições de contorno de escorregamento se fazem necessárias (GAD-EL-HAK, 1999).

O primeiro conceito de escorregamento foi introduzido por Navier, em 1823 (SŤEC; SKOŤEK, 2013), utilizando uma condição de contorno linear que estimava empiricamente a velocidade macroscópica de escorregamento na superfície, para gases e líquidos. De acordo com esta condição de contorno, a velocidade tangencial de escorregamento na superfície $\Delta u|_s$ é proporcional à tensão de cisalhamento na parede (GAD-EL-HAK, 1999):

$$\Delta u|_s = u_{fluido} - u_{superfície} = \mathcal{L} \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_w, \quad (3.49)$$

onde \mathcal{L} é o comprimento de escorregamento, u_{fluido} é a velocidade do fluido e $u_{superfície}$ é a velocidade da superfície. Em casos nos quais o número de Knudsen é baixo, \mathcal{L} é suficientemente pequeno, podendo ser desprezado, e então $u_{fluido} = u_{superfície}$. Em casos nos quais a superfície encontra-se em repouso, $u_{superfície} = 0$, e logo $u_{fluido} = 0$. Thompson e Troian (1997) realizaram simulações através da dinâmica molecular e compararam com resultados obtidos utilizando a condição de contorno de escorregamento proposta por Navier. Os autores concluíram que, para altos valores de tensão de cisalhamento, a condição de contorno de Navier falha ao representar o escorregamento.

Para gases monoatômicos, em condições isotérmicas, a velocidade de escorregamento pode ser expressa em termos do caminho livre médio das moléculas λ (GAD-EL-HAK, 1999):

$$u_{fluido} - u_{superfície} = \lambda \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_w. \quad (3.50)$$

O lado direito da Equação 3.50 representa o primeiro termo da série de Taylor. Quando o caminho livre médio das moléculas é pequeno o suficiente, apenas o primeiro termo da série infinita pode ser considerado.

Em superfícies reais (nem perfeitamente lisas e nem extremamente rugosas), as moléculas incidentes perdem momento para a parede, e uma parte deste momento é retida pelas moléculas refletidas. Neste caso, algumas moléculas são refletidas de forma especular, na qual o momento tangencial das moléculas é conservado, e nenhum atrito é exercido sobre a superfície; ou de forma difusa, na qual o momento tangencial das moléculas refletidas é nulo e, logo, há troca de momento e, portanto, atrito entre o fluido e a superfície. Neste contexto, o coeficiente de acomodação tangencial σ_v é utilizado para representar a troca de momento tangencial entre as moléculas incidentes e a superfície, e a condição de contorno de Maxwell de primeira ordem para superfícies isotermas pode ser expressa por (GAD-EL-HAK, 1999; ZHANG; MENG; WEI, 2012):

$$u_{fluido} - u_{superfície} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \lambda \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_w. \quad (3.51)$$

O coeficiente de acomodação tangencial σ_v , depende das características do fluido e da superfície, e pode ser definido como (GAD-EL-HAK, 1999):

$$\sigma_v = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i - \tau_w}, \quad (3.52)$$

onde i , r e w se referem às moléculas incidentes, refletidas e à parede, respectivamente, e τ é o momento na direção tangencial. Os limites das Equações 3.51 e 3.52 podem ser explorados: quando $\sigma_v = 1$, as Equações 3.50 e 3.51 são iguais. Além disso, considerando uma superfície estacionária, $\tau_r = 0$ e as moléculas são refletidas com velocidade tangencial nula, logo, há uma troca de momento entre o fluido e a superfície e, conseqüentemente, atrito. Caso $\sigma_v = 0$, a situação de uma superfície perfeitamente lisa estaria representada, sendo que não há limite para o valor da velocidade de escorregamento, e $\tau_i = \tau_r$, indicando que a velocidade tangencial das moléculas refletidas é inalterada. Neste caso não há troca de momento tangencial entre a superfície e o fluido e, portanto, não há atrito (KARNIADAKIS; BESKOK; ALURU, 2005). Valores para o coeficiente de acomodação tangencial foram obtidos experimentalmente e podem ser encontrados na literatura (PORODNOV et al., 1974; THOMAS; LORD, 1975; LORD, 1977; ARKILIC; BREUER; SCHMIDT, 2001; MAURER et al., 2003; BLANCHARD; LIGRANI, 2007; EWART et al., 2007; GRAUR et al., 2009; YAMAGUCHI et al., 2011; MOGHADDAN; JAMIOLAHMADY, 2016).

Utilizando um comprimento e uma velocidade de referência, a Equação 3.51 pode ser reescrita em termos adimensionais, como o número de Knudsen (Kn) e o componente normal (n):

$$U_{fluido} - U_{superfície} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn \left. \frac{\partial U}{\partial n} \right|_w. \quad (3.53)$$

Maxwell obteve, também, a equação de segunda ordem para o cálculo da velocidade de escoamento, mantendo o segundo termo da série de Taylor:

$$U_{fluido} - U_{superfície} = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left(Kn \left. \frac{\partial U}{\partial n} \right|_w + \frac{Kn^2}{2} \left. \frac{\partial^2 U}{\partial n^2} \right|_w \right). \quad (3.54)$$

a qual pode ser reescrita, de forma geral, em termos dos coeficientes de escorregamento C_1 e C_2 (MOGHADDAN; JAMIOLAHMADY, 2016):

$$U_{fluido} - U_{superfície} = C_1 Kn \left. \frac{\partial U}{\partial n} \right|_w + C_2 Kn^2 \left. \frac{\partial^2 U}{\partial n^2} \right|_w. \quad (3.55)$$

Valores para os coeficientes C_1 e C_2 podem ser encontrados na literatura (HSIA; DOMOTO, 1983; GAD-EL-HAK, 1999; HADJICONSTANTINO, 2003; COLIN, 2005; KARNIADAKIS; BESKOK; ALURU, 2005; BARBER; EMERSON, 2006; DONGARI; AGRAWAL; AGRAWAL, 2007; MOGHADDAN; JAMIOLAHMADY, 2016).

O primeiro estudo envolvendo a velocidade de escorregamento em lattice Boltzmann foi realizado por Cornubert, d'Humières e Levermore (1991). Os autores calcularam

a velocidade de escorregamento analiticamente e numericamente. A grande parte dos trabalhos combinando o método de lattice Boltzmann e a teoria de escorregamento envolve aplicações em dutos de escala micro ou nanométrica e em escoamento entre duas placas (TANG; TAO; HE, 2004; KIM; PITSCH, 2008; VERHAEGHE; LUO; BLANPAIN, 2009; LI et al., 2011; LIU; YANG; NI, 2011; NEUMANN; ROHRMANN, 2012; LIU; GUO, 2013; ZHUO; ZHONG, 2013). Alguns autores calcularam o escoamento numericamente utilizando combinações entre diferentes condições de contorno, como *bounce back*, difusiva e reflexão especular, através do ajuste de um coeficiente de reflexão. A escolha do valor deste coeficiente ainda não está bem definida na literatura. Tang, Tao e He (2004) e Liu, Yang e Ni (2011) escolheram um coeficiente que fornecia resultados com melhor concordância com os dados experimentais e com outros modelos. Li et al. (2011), Neumann e Rohrmann (2012), Liu e Guo (2013) e Zhuo e Zhong (2013) utilizaram relações em função do número de Knudsen (Kn) e em coeficientes de escorregamento para estimar o coeficiente de reflexão. Além destes estudos, Chen e Tian (2009) e Chen e Tian (2010) implementaram o modelo Langmuir para considerar o efeito do escorregamento. De acordo com esta abordagem, as moléculas residem por uma fração de tempo na superfície sólida antes de serem refletidas. Este fenômeno é responsável por gerar a velocidade de escorregamento. Observa-se que nestes trabalhos a geometria é simples, consistindo apenas de duas fronteiras inferior e superior, as quais confinam o fluido em escoamento.

Em geral, observou-se que a grande parte dos trabalhos encontrados na literatura não levou em conta a análise de um meio filtrante real, considerando características importantes como uma distribuição de diâmetros de fibras e a fração de sólidos medida experimentalmente. Além disso, muitos trabalhos não consideram a relação apropriada entre o tempo de relaxação e o número de Knudsen, a fim de se calcular o escoamento gasoso a altos números de Knudsen, e nem as condições de contorno apropriadas na superfície das fibras, como é o caso do escorregamento. Assim, esta tese tem como pontos de investigação a construção de um código capaz de gerar modelos geométricos a partir de propriedades estruturais do meio filtrante, como diâmetros das fibras, espessura e fração de sólidos, que podem ser obtidas através da análise de imagens de microscopia; a implementação da condição de contorno de escorregamento em um código livre que utiliza o método de lattice Boltzmann, juntamente com a relação entre o número adimensional de Knudsen e o tempo de relaxação; e por fim a aplicação desta modelagem na simulação de meios filtrantes reais.

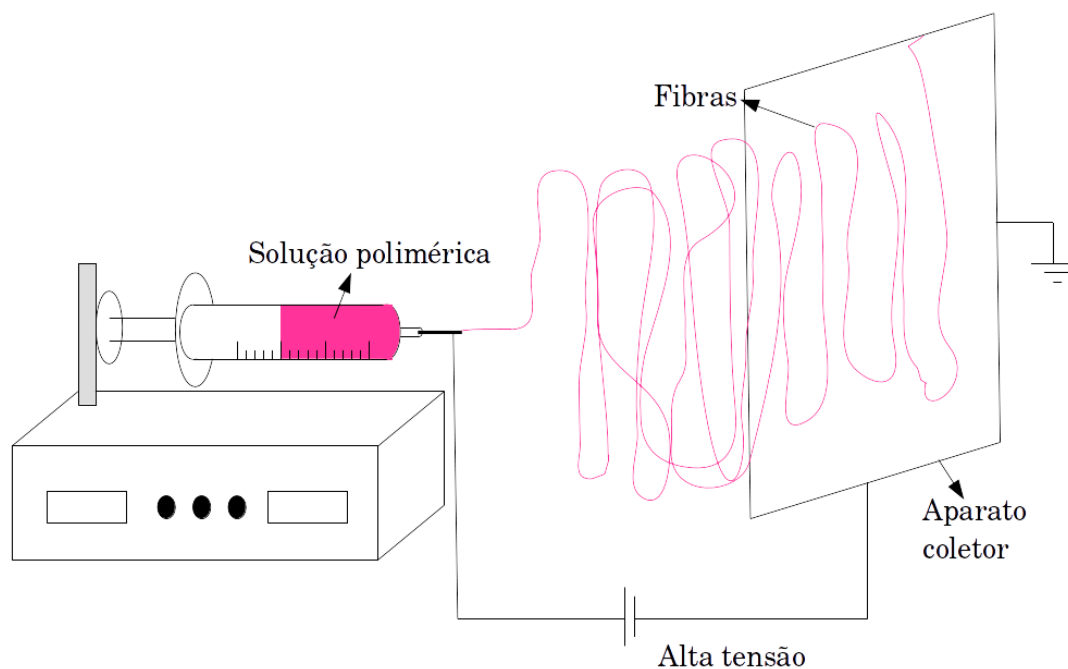
Implementação dos códigos computacionais

Nesta seção, serão detalhados os aspectos da implementação dos códigos para a geração de uma geometria virtual para o meio filtrante, no qual duas abordagens diferentes foram empregadas para a alocação das fibras, além do código para a condição de contorno de escorregamento no *software* livre OpenLB.

4.1 Geração de um domínio computacional para o meio filtrante

Para que um meio filtrante possa ser utilizado em simulações numéricas, com o objetivo de determinar seu desempenho, é necessário gerar um modelo geométrico computacional. A estratégia utilizada neste trabalho foi considerar uma geometria bidimensional, na qual as fibras são representadas pelos seus cortes transversais que, por sua vez, podem ser representados por círculos, se considerarmos que as fibras possuem formato cilíndrico. Com um modelo bidimensional, há uma redução significativa no custo computacional da simulação. Entretanto, mesmo sendo uma simplificação, se as principais características do material forem incluídas, espera-se que o modelo seja capaz de reproduzir numericamente com fidelidade o desempenho do elemento filtrante.

Durante o processo de fabricação dos meios filtrantes, as fibras tendem a se posicionar paralelamente no plano do meio filtrante. Um exemplo de técnica utilizada para a fabricação de filtros é o *electrospinning* (Figura 4.1), na qual soluções poliméricas são projetadas sobre um aparato coletor através de forças elétricas. Esta técnica vem sendo bastante utilizada para a produção de filtros contendo nanofibras. Existem vários parâmetros do processo que podem ser especificados a fim de se controlar o tamanho das fibras e também a sua disposição sobre o suporte (HUANG et al., 2002; BHARDWAJ; KUNDU, 2010). Na Figura 4.1, pode-se observar que as fibras tendem a se posicionar paralelamente sobre o coletor. Levando-se esta informação em conta, o modelo bidimensional foi gerado considerando que as fibras são paralelas, e que elas são representadas por suas seções transversais.

Figura 4.1 – Técnica de *electrospinning* para fabricação de meios filtrantes.

Fonte: Acervo pessoal, baseada em Bhardwaj e Kundu (2010).

4.1.1 Obtenção das imagens e análise estatística

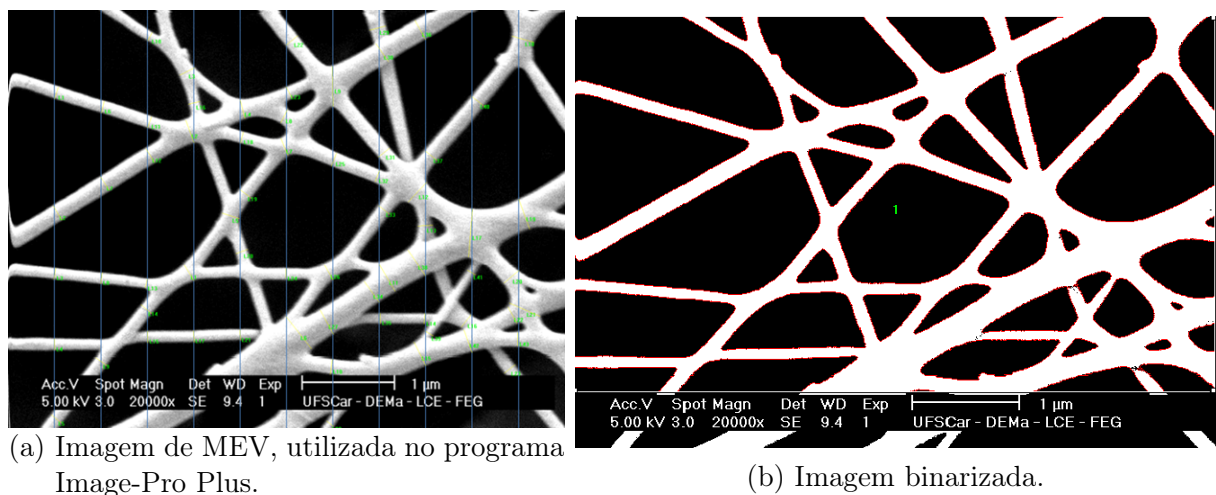
Para representar o meio filtrante em um modelo computacional, é necessário se considerar algumas de suas características que mais influenciam na estimativa da queda de pressão, como:

- fração de sólidos;
- espessura do meio filtrante;
- distribuição de diâmetros (diâmetros mínimo, médio e máximo, e desvio padrão).

O procedimento proposto se baseia em analisar imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV), a fim de se estimar os parâmetros listados anteriormente. O meio filtrante utilizado para obtenção das imagens é composto por uma camada de nanofibras e uma camada suporte, de fibras maiores da ordem de micrômetros. As imagens de MEV da camada de nanofibras foram obtidas no Laboratório de Caracterização Estrutural (LCE), do departamento de Engenharia de Materiais (DEMa) na Universidade Federal de São Carlos (UFSCar). As imagens foram cedidas pelo grupo de pesquisa da Professora Mônica Lopes Aguiar, também do departamento de Engenharia Química (DEQ), da UFSCar, para análise estatística da distribuição de diâmetros. A partir destas imagens, foi possível obter os diâmetros médios das fibras, a área ocupada pelas mesmas, a área total das imagens e, conseqüentemente, a fração de sólidos do meio filtrante, com o auxílio do *software* Image-Pro Plus. A espessura do meio filtrante também foi obtida através da análise das imagens geradas por MEV, com o auxílio de ferramentas do próprio microscópio.

A técnica para obtenção dos diâmetros de fibras foi utilizada por Bortolassi et al. (2014). Mais detalhes sobre esta técnica e a análise dos diâmetros podem ser encontrados em Bortolassi (2015). O procedimento para obtenção dos diâmetros das fibras consiste em dividir a foto em partes iguais, através de linhas verticais (marcadas pela cor azul na imagem da Figura 4.2a), e avaliar o diâmetro das fibras que são interceptadas por estas linhas verticais. Para isto, traça-se uma linha reta perpendicular à fibra e que intercepte também a linha vertical em azul (linha amarela na imagem da Figura 4.2a). Com estas informações, o programa calcula automaticamente o diâmetro médio da fibra (marcado em verde na Figura 4.2a). Vale ressaltar que uma mesma linha vertical pode cruzar a mesma fibra em vários locais, fazendo com o que a mesma fibra seja medida mais de uma vez. Neste caso, não há interferência no estimativa do diâmetro médio; pelo contrário, a medição de uma mesma fibra em mais de um ponto garante mais precisão para o método, uma vez que estas não são uniformes.

Figura 4.2 – Imagens para análise dos diâmetros das fibras.



(a) Imagem de MEV, utilizada no programa Image-Pro Plus.

(b) Imagem binarizada.

Fonte: Bortolassi et al. (2014).

Para a estimativa da fração de sólidos, é necessário que a figura obtida por MEV seja convertida em uma imagem binarizada (apenas com *pixels* pretos ou brancos), de forma que as fibras e os poros tenham cores opostas, como mostra a Figura 4.2b. Assim, o programa Image-Pro Plus é capaz de medir a área ocupada pelas fibras (em branco, na Figura 4.2b) em relação à área total da imagem analisada. A fração de sólidos é definida como a razão entre o volume ocupado pelo sólido (fibras) e o volume total do meio filtrante, dada pela Equação 3.6. O volume ocupado pelas fibras pode ser calculado a partir da área correspondente observada na imagem, fornecida pelo *software* Image-Pro Plus e do diâmetro médio das fibras (d_m), ambos obtidos através da análise da imagem de MEV:

$$\text{Volume ocupado pelas fibras} = \text{Área observada} \times d_m. \quad (4.1)$$

ou pode ser calculado também em função da soma dos comprimentos de todas as fibras (m), como segue:

$$\text{Volume ocupado pelas fibras} = d_m^2 m. \quad (4.2)$$

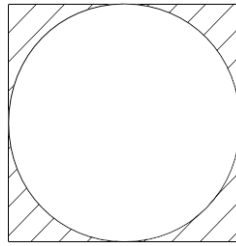
Igualando as Equações 4.1 e 4.2, a soma dos comprimentos de todas as fibras pode ser escrita em função da área observada e do diâmetro médio das fibras:

$$m = \frac{\text{Área observada}}{d_m}. \quad (4.3)$$

Porém, as Equações 4.1 e 4.2 calculam o volume das fibras considerando que elas são retangulares. Um fator de correção pode, então, ser calculado a fim de descontar o volume em excesso (área hachurada da Figura 4.3), através da subtração de uma área retangular por uma área circular, considerando também a soma dos comprimentos de todas as fibras (m):

$$\text{Fator de correção} = \left(d_m^2 - \frac{d_m^2 \pi}{4} \right) m. \quad (4.4)$$

Figura 4.3 – Volume em excesso, descontado no cálculo da fração de sólidos.



Fonte: Acervo pessoal.

Substituindo a Equação 4.3 na Equação 4.4, tem-se:

$$\begin{aligned} \text{Fator de correção} &= \left(d_m^2 - \frac{d_m^2 \pi}{4} \right) \frac{\text{Área observada}}{d_m} \\ &= d_m \left(1 - \frac{\pi}{4} \right) \text{Área observada}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Assim, o volume ocupado pelas fibras pode ser calculado como:

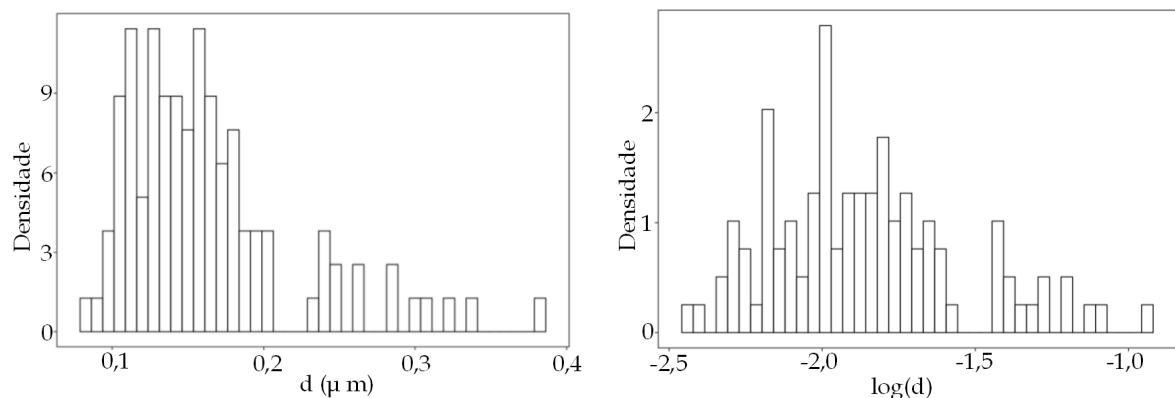
$$\begin{aligned} \text{Volume ocupado pelas fibras} &= \text{Área observada} \times d_m - d_m \left(1 - \frac{\pi}{4} \right) \text{Área observada} \\ &= \text{Área observada} \times \frac{\pi}{4} \times d_m. \end{aligned} \quad (4.6)$$

O volume total referente à imagem do meio filtrante selecionada para análise no *software* Image-Pro Plus pode ser dado como a multiplicação da área total da imagem pelo diâmetro médio das fibras. Considerando as Equações 3.6 e 4.6, a fração de sólidos pode ser calculada como:

$$\epsilon = \frac{\text{Área observada}}{\text{Área total}} \times \frac{\pi}{4}. \quad (4.7)$$

De posse de um elenco de diâmetros médios de fibras, estimados como explicado anteriormente, foi possível realizar uma análise estatística para determinar a distribuição de diâmetros, com o auxílio do programa R. Na Figura 4.4a, que mostra o histograma dos diâmetros medidos através das imagens de MEV, pode-se observar uma longa extremidade para as fibras maiores. Esta característica pode ser um indicativo de que o conjunto de dados não pertence a uma população normalmente distribuída. A Figura 4.4b mostra o histograma dos logaritmos dos diâmetros medidos, indicando que o conjunto de dados tem grande semelhança com a distribuição log-normal.

Figura 4.4 – Histogramas dos conjuntos de diâmetros de fibras.



(a) Diâmetros médios de fibras.

(b) Logaritmo dos diâmetros de fibras.

Fonte: Acervo pessoal.

O método da verossimilhança foi utilizado para estimar os parâmetros descritivos de acordo com as funções de densidade de probabilidade (PDF, do inglês *probability density function*) para as distribuições normal, log-normal e beta através dos diâmetros medidos a partir das fotos. Os valores obtidos são apresentados na Tabela 4.1. Com os parâmetros descritivos calculados, pôde-se obter o gráfico da função de densidade de probabilidade para cada distribuição e comparar com a densidade obtida através dos dados experimentais. Pela Figura 4.5, pode-se observar a semelhança entre os dados da distribuição de diâmetros e a distribuição log-normal.

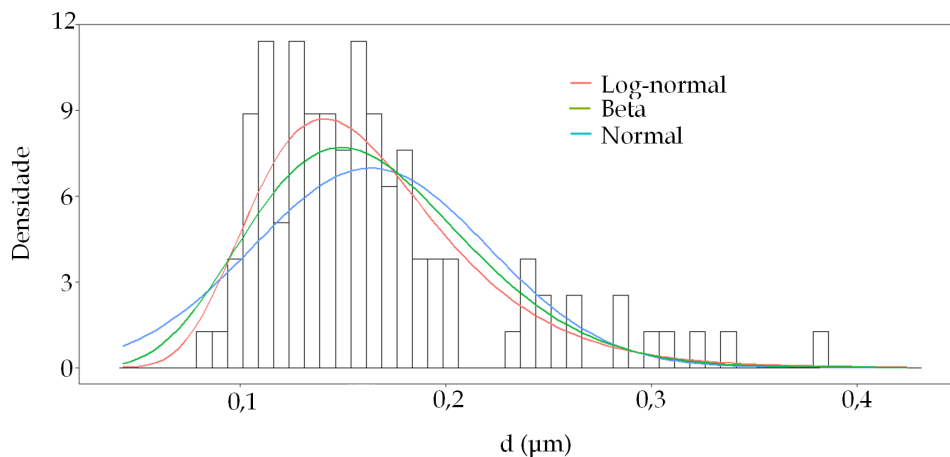
Gráficos Q-Q (ou quantil-quantil) foram construídos para avaliar como é a distribuição dos diâmetros das fibras. Trata-se de um método gráfico para comparação entre dados aleatórios e uma função de probabilidade conhecida, de forma que os dados teóricos se localizam no eixo das ordenadas e os valores amostrais se referem ao eixo das abscissas.

Tabela 4.1 – Parâmetros estimados para cada PDF, pelo método da verossimilhança.

PDF	Parâmetros	
Normal	μ_g 0,163	σ_g 0,0571
Log-normal	μ_0 0,155	σ_0 1,36
Beta	α 7,94	β 40,6

Fonte: Acervo pessoal.

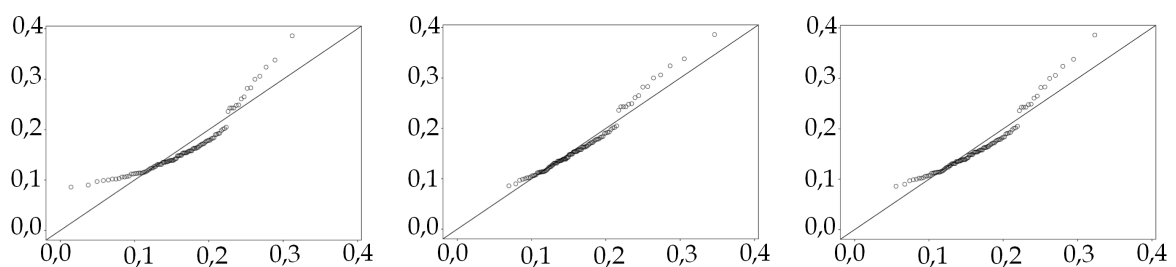
Figura 4.5 – Testes das distribuições para os dados experimentais.



Fonte: Acervo pessoal.

Assim, caso os pontos amostrais se alinhem à reta de inclinação unitária, as distribuições podem ser consideradas iguais. A análise dos gráficos Q-Q apresentados na Figura 4.6 reforçam a semelhança entre os dados amostrais e a distribuição log-normal.

Figura 4.6 – Gráficos quantil-quantil para as três distribuições.



(a) Distribuição normal.

(b) Distribuição log-normal.

(c) Distribuição beta.

Fonte: Acervo pessoal.

A técnica apresentada anteriormente, utilizada por Bortolassi (2015), para a qual o programa Image-Pro Plus foi empregado na estimativa dos diâmetros de fibras, consiste em um método manual, que depende exclusivamente do operador. Salussoglia (2016) apresentou um procedimento diferente, que consiste em utilizar o *software* ImageJ, além do

método manual. Neste caso, o programa gera automaticamente um conjunto de diâmetros, medidos em quantidade de *pixels*. A autora realizou a análise de várias fotos, tiradas de diferentes regiões de um meio filtrante composto por duas camadas, semelhante ao utilizado por Bortolassi (2015). Para cada imagem, foram realizadas análises estatísticas, para determinar qual distribuição se adequaria melhor. Foram testadas as distribuições de Gauss, Gauss ampliado, log-normal e Lorentz. Em todos os casos, tanto para o método manual, quanto para o método automatizado, o coeficiente de determinação foi maior para a distribuição log-normal.

Assim, de acordo com os testes estatísticos realizados com os dados obtidos a partir das fotos de MEV, de acordo com Bortolassi (2015), pode-se considerar que os diâmetros médios das fibras seguem uma distribuição log-normal. Ainda, as análises realizadas por Salussoglia (2016), tanto pelo método manual quanto para o método automatizado, reforçam esta hipótese. Esta característica foi, então, utilizada para discretizar o intervalo de diâmetros de fibras, com o objetivo de gerar uma geometria do meio filtrante, como será descrito a seguir.

4.1.2 Algoritmo para geração de um domínio bidimensional

A fração de sólidos e os parâmetros estatísticos dos diâmetros das fibras (distribuição, valores mínimo, máximo e médio dos diâmetros e desvio padrão) foram, então, utilizados para gerar domínios computacionais dos meios filtrantes para serem empregados em simulações numéricas. O objetivo do código computacional é, de posse das informações necessárias sobre o meio filtrante, criar uma geometria virtual de qualquer meio filtrante. Adiante, serão detalhados os passos percorridos para a construção de um código em linguagem computacional C++ capaz de fornecer a distribuição discreta de diâmetros e a localização de todas as fibras que compõem um meio filtrante, representado em duas dimensões. Serão descritas duas abordagens para a alocação das fibras no espaço do domínio computacional do meio filtrante. A primeira delas considera uma alocação totalmente randômica, enquanto a segunda se baseia em um algoritmo que consiste na alocação de fibras que obedecem a certos critérios.

O primeiro passo envolve a divisão do intervalo de diâmetro em valores discretos, considerando os diâmetros mínimo (D_{min}) e máximo (D_{max}), obtidos através de análises das imagens de MEV. Para isso, foi escolhido um intervalo igual a 30. Este valor foi selecionado de forma que se tivesse uma quantidade razoável de diâmetros diferentes, para que a discretização da curva contínua da distribuição log-normal não sofresse grandes alterações. Esta quantidade de intervalos pode ser definida pelo usuário durante o código para a geração de fibras e, caso o meio filtrante utilizado possua uma faixa muito extensa de diâmetros, um valor maior pode ser utilizado para a discretização. A distribuição ao longo da faixa foi obtida baseando-se numa série geométrica, sendo que o menor diâmetro é o primeiro termo e o maior, o último termo da série. Caso uma progressão aritmética fosse

utilizada, o número de fibras com diâmetro pequeno seria desproporcional à quantidade de fibras maiores, e por isso optou-se por uma série geométrica. A razão da série é obtida por:

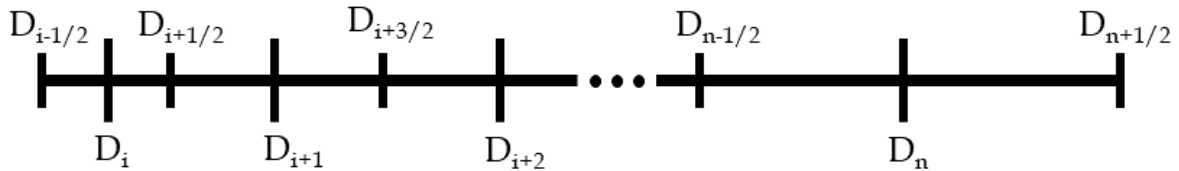
$$q = \left(\frac{D_{máx}}{D_{mín}} \right)^{\left(\frac{1}{\text{Int} - 1} \right)}, \quad (4.8)$$

onde ‘Int’ se refere ao número de intervalos da série, sendo este igual a 30. Com os valores de diâmetros discretos obtidos a partir da série geométrica, foram calculados termos intermediários inferiores ($D_{i-1/2}$) e superiores ($D_{i+1/2}$) em relação ao termo central da série geométrica (D_i), como ilustrado na Figura 4.7. No caso deste trabalho, como foram considerados 30 intervalos, $i=1$ e $n=30$. O termo intermediário posterior ($D_{i+1/2}$) é calculado como a distância entre o termo intermediário anterior e o termo central, acrescido do termo central em questão, ou seja, a distância entre D_i e $D_{i-1/2}$ é projetada para o intervalo seguinte:

$$D_{i+1/2} = D_i + (D_i - D_{i-1/2}). \quad (4.9)$$

sendo i variando de 1 a 30.

Figura 4.7 – Esquema de discretização do intervalo de diâmetros de fibras.



Fonte: Acervo pessoal.

O termo intermediário anterior ($D_{i-1/2}$) é igual ao termo intermediário posterior do intervalo precedente. Como exemplo, pode-se observar novamente a Figura 4.7: $D_{i+1/2}$ é o termo intermediário posterior em relação ao D_i e, ao mesmo tempo, é o termo intermediário anterior em relação a D_{i+1} :

$$D_{i-1/2} = D_{(i-1)+1/2}. \quad (4.10)$$

Porém, a relação da Equação 4.10 só pode ser utilizada a partir do segundo intervalo, uma vez que, para o primeiro não há nenhum termo intermediário precedente. Assim, a estratégia utilizada foi de calcular o primeiro termo intermediário anterior em relação ao termo central dos intervalos 1 e 2. Para isto, considerou-se que a distância entre o termo

central e o ponto médio posterior (referente ao termo entre parênteses da Equação 4.11) é igual à distância entre o termo central e o ponto médio anterior:

$$D_{i-1/2} = D_i - \left(\frac{D_i + D_{i+1}}{2} - D_i \right). \quad (4.11)$$

Com os diâmetros centrais e intermediários definidos, calcula-se a fração de fibras com diâmetros entre D e dD para cada intervalo $[n_i(frac)]$, considerando uma distribuição log-normal, sendo que $dD_i = D_{i+1/2} - D_{i-1/2}$, através da relação:

$$n_i(frac) = f_i(D)dD_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_0} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\ln D_i - \mu_0}{\sigma_0} \right)^2 \right] \frac{dD_i}{D_i}, \quad (4.12)$$

em que μ_0 e σ_0 são a média e o desvio padrão dos logaritmos naturais dos diâmetros, respectivamente.

O somatório de todas as frações de fibras calculadas pela Equação 4.12 deve ser igual a unidade. Porém, como a distribuição log-normal é truncada, a soma não é exatamente igual a 1. Logo, os valores obtidos pela Equação 4.12 devem ser normalizados, através da divisão de cada um destes valores pela soma das frações de fibras ($\overline{n_i(frac)}$). Em seguida, a área ocupada pelas fibras de cada fração é calculada através da multiplicação da área de uma única fibra, cuja seção transversal é considerada circular, e da fração de fibras normalizada de cada intervalo:

$$\text{Área fracionada} = \overline{n_i(frac)} \times \frac{\pi D_i^2}{4}. \quad (4.13)$$

As áreas fracionadas calculadas pela Equação 4.13 podem ser somadas para obter a área total ocupada pelas fibras. Entretanto, esta área total deve ser ponderada com a fração de sólidos característica do meio filtrante (ϵ_{exp}), que pode ser calculada através das fotos de MEV, como explicado na Seção 4.1.1. Para isto, um multiplicador é calculado através da relação:

$$\text{Multiplicador} = \epsilon_{exp} \times \frac{\text{Área do domínio}}{\sum \text{Área fracionada}}, \quad (4.14)$$

onde a área total do domínio é calculada pela multiplicação das dimensões horizontal e vertical. Estes dados devem ser fornecidos pelo usuário como *input* do código. Com o multiplicador, é possível calcular a quantidade de fibras em cada intervalo especificado (n_i), como segue:

$$n_i = \overline{n_i(frac)} \times \text{Multiplicador}. \quad (4.15)$$

Esta equação deve retornar valores inteiros, já que representam a quantidade de fibras em cada intervalo. Para isso, foi somado 0,5 em cada valor obtido pela Equação 4.15 e os

valores foram convertidos para inteiros. Esta estratégia garante que todos os valores com parte fracionária maior que 0,5 fossem arredondados para um número inteiro superior e, aqueles com parte fracionária menor que 0,5 fossem arredondados para um número inteiro inferior. Em seguida, a fração de sólidos do modelo foi estimada (ϵ_{mod}), através da relação entre a soma das áreas ocupadas por todas as fibras e a área total do domínio:

$$\epsilon_{mod} = \frac{\sum \left(\frac{n_i \pi D_i^2}{4} \right)}{\text{Área do domínio}}. \quad (4.16)$$

A função de densidade de probabilidade calculada a partir das frações de fibras para cada intervalo $[n_i(frac)]$, obtida pela Equação 4.17, pode ser comparada com a PDF calculada a partir do número real de fibras de cada intervalo (n_i), obtida a partir da Equação 4.18. A primeira PDF representa a fração das fibras para cada intervalo uma vez imposta a condição de distribuição log-normal; já a segunda representa a fração das fibras para cada intervalo considerando a fração de sólidos estimada experimentalmente pelas imagens de MEV.

$$PDF_{ideal} = \frac{n_i(frac)}{dD_i} = \frac{f_i(D)dD_i}{dD_i}. \quad (4.17)$$

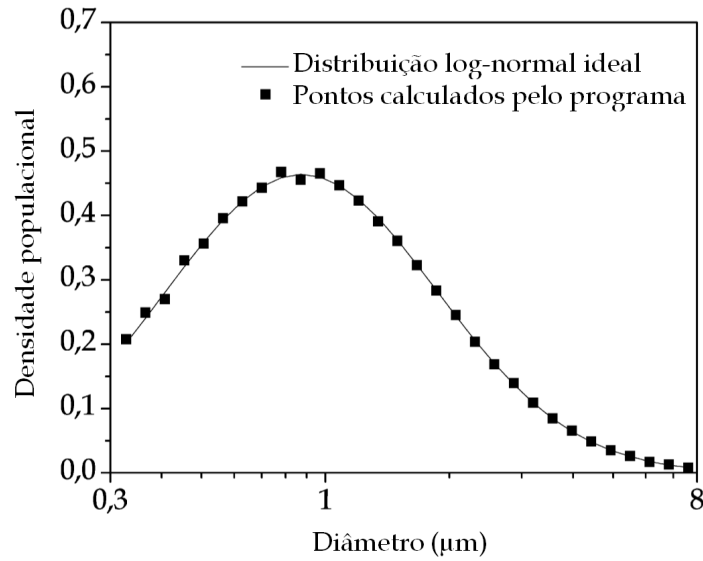
$$PDF_{real} = \frac{n_i}{\text{Multiplicador}} \times \frac{1}{dD_i}. \quad (4.18)$$

Utilizando o código construído em C++ e dados medidos experimentalmente (diâmetros mínimo e máximo, e fração de sólidos), duas PDF's foram construídas a título de comparação (Figura 4.8), como explicado anteriormente. Observa-se que os pontos gerados pelo código para distribuição dos diâmetros e a curva log-normal ideal possuem grande concordância entre si, validando as considerações e os cálculos realizados.

O Algoritmo 2 resume as etapas envolvidas na construção do código computacional para geração de um domínio bidimensional de um meio filtrante:

A segunda parte do código consiste em definir um par de coordenadas (x,y) para cada fibra, cujo diâmetro foi previamente calculado. A área que limita os valores (x,y) é dada pelas dimensões do domínio fornecidas pelo usuário como entrada do programa construído nesta seção. Para esta parte do código, foram consideradas duas abordagens diferentes para a alocação das fibras. A primeira consiste em adotar as coordenadas de forma completamente aleatória. Já a segunda, utiliza a lógica de um algoritmo desenvolvido por Mitchell (1991), conhecido como “melhor candidato”. Neste algoritmo, um número fixo de possíveis localizações (candidatos) para uma determinada fibra é gerado, de forma que a melhor coordenada, segundo algum critério previamente definido, é então escolhida e armazenada para a fibra em questão.

Figura 4.8 – PDF's calculadas a partir do código computacional.



Fonte: Acervo pessoal.

Algoritmo 2: Cálculo dos diâmetros das fibras

Entrada dos dados experimentais ϵ_{exp} , $D_{mín}$, $D_{máx}$, d_m e σ , e das dimensões (x,y) do modelo geométrico desejado

Cálculo de q (Equação 4.8)

for $i < 30$ **do**

 Cálculo de D_i , D_{i-1} e D_{i+1} (Equações 4.9, 4.10 e 4.11)

 Cálculo de $n_i(frac)$ (Equação 4.12)

end

Normalização de $n_i(frac)$ **for** $i < 30$ **do**

 Cálculo da área fracionada (Equação 4.13)

end

Cálculo do multiplicador (Equação 4.14)

for $i < 30$ **do**

 Cálculo de n_i (Equação 4.15)

end

Cálculo de ϵ_{mod} (Equação 4.16)

for $i < 30$ **do**

 Cálculo das $PDF's$ real e ideal (Equações 4.18 e 4.17)

end

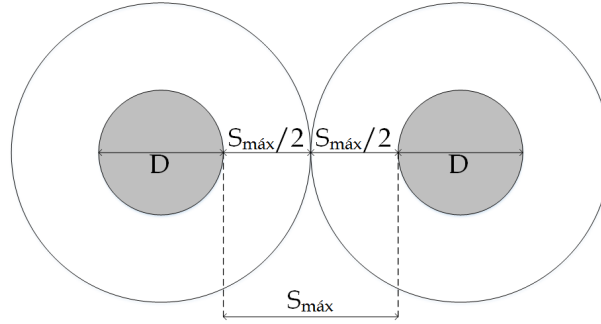
Armazenamento dos dados no arquivo de saída

Para a abordagem cuja localização das fibras é totalmente aleatória, o código estima, inicialmente, a distância máxima que pode existir entre as fibras, considerando a fração de sólidos, o número total das fibras e o diâmetro das mesmas. Este valor é mostrado no terminal do programa e, em seguida, o usuário deve escolher qual o menor valor de distância entre as fibras desejado (S). Isto garante que, caso o domínio computacional seja utilizado para gerar uma malha numérica, os elementos que a compõem não tenham baixa qualidade devido ao pequeno espaço entre duas fibras. Para o cálculo da distância máxima

permitida entre duas fibras, foi feita uma suposição que estas tenham um tamanho igual ao diâmetro real da fibra acrescido da distância entre duas fibras ($S_{m\acute{a}x}$), como ilustrado na Figura 4.9. Com esta consideração, e sabendo que a fração de vazios do meio filtrante é dada por $(1 - \epsilon_{mod})$, a seguinte relação pode ser estabelecida:

$$1 - \epsilon_{mod} = 1 - \frac{\text{Área ocupada pelas fibras}}{\text{Área do domínio}}. \quad (4.19)$$

Figura 4.9 – Esquema para o cálculo da distância máxima entre duas fibras.



Fonte: Acervo pessoal.

A área ocupada pelas fibras pode ser calculada pela soma das áreas individuais de cada fibra, considerando o diâmetro acrescido da distância máxima permitida entre dois elementos do meio filtrante:

$$\begin{aligned} 1 - \epsilon_{mod} &= 1 - \frac{N_{fibras} (S_{m\acute{a}x} + D_i)^2 \frac{\pi}{4}}{\text{Área do domínio}} \\ &= 1 - \frac{\frac{\pi}{4} N_{fibras} S_{m\acute{a}x}^2}{\text{Área do domínio}} + \frac{2\frac{\pi}{4} N_{fibras} D_i S_{m\acute{a}x}}{\text{Área do domínio}} + \frac{\frac{\pi}{4} N_{fibras} D_i^2}{\text{Área do domínio}}, \quad (4.20) \end{aligned}$$

em que N_{fibras} é o número total de fibras. Pode-se observar que, no segundo termo da Equação 4.20, a multiplicação entre o número total de fibras e os diâmetros de cada intervalo pode ser dada pela soma dos diâmetros de todos os intervalos. Já o último termo representa a fração de sólidos ocupada pelas fibras considerando o tamanho real D_i . Foi estabelecido, então, que o valor máximo para este termo fosse 0,5, o que significa que as fibras poderiam ocupar, no máximo, metade do domínio computacional. Incluindo estas considerações e rearranjando os termos da Equação 4.20, obtém-se a seguinte expressão que fornece a distância máxima permitida entre duas fibras:

$$\frac{\frac{\pi}{4} N_{fibras} S_{m\acute{a}x}^2 + 2\frac{\pi}{4} (\sum D_i) S_{m\acute{a}x}}{\text{Área do domínio}} - (\epsilon + 0,5) = 0. \quad (4.21)$$

O passo seguinte consiste em gerar coordenadas aleatórias para a localização de cada fibra. A restrição para a geração dos valores aleatórios é que eles estejam compreendidos

entre as coordenadas limites do meio filtrante. No código, o valor da coordenada do limite horizontal inferior e à esquerda foi definido como zero. Assim, o par (x_{ale}, y_{ale}) pode ser calculado como:

$$x_{ale} = f_x \left[\left(x_{direita} - \frac{D_i}{2} \right) - \left(x_{esquerda} + \frac{D_i}{2} \right) \right] + \left(x_{esquerda} + \frac{D_i}{2} \right), \quad (4.22)$$

$$y_{ale} = f_y \left[\left(y_{superior} - \frac{D_i}{2} \right) - \left(y_{inferior} + \frac{D_i}{2} \right) \right] + \left(y_{inferior} + \frac{D_i}{2} \right). \quad (4.23)$$

Com os valores das coordenadas aleatórias (x_{ale}, y_{ale}) , é realizada uma comparação entre as localizações de todas as fibras já alocadas e da próxima fibra a ser calculada, com a finalidade de verificar se elas serão sobrepostas. Considerando duas fibras com centros localizados em (x_1, y_1) e (x_2, y_2) e raios r_1 e r_2 , elas são sobrepostas quando a distância entre seus centros é menor que a soma dos raios, acrescida da distância mínima entre estas duas fibras, previamente escolhida pelo usuário (S):

$$(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 = (raio_1 + raio_2 + S)^2. \quad (4.24)$$

Caso as fibras estejam sobrepostas, novos valores as coordenadas do centro da fibras (x_{ale}, y_{ale}) são calculados, e a verificação de superposição é realizada novamente até que todas as fibras sejam alocadas. O Algoritmo 3 resume os passos percorridos durante o código de alocação das fibras.

Algoritmo 3: Alocação das fibras - Método aleatório

Cálculo da distância máxima entre duas fibras (Equações 4.19 a 4.21)

for $i < 30$ **do**

for $j < (\text{Número de fibras no intervalo})$ **do**

 Cálculo de x_{ale} e y_{ale} (Equações 4.22 e 4.23)

if fibras sobrepostas (Equação 4.24) **do**

 Cálculo de novos x_{ale} e y_{ale} (Equações 4.22 e 4.23)

else Armazena coordenadas x_{ale} e y_{ale}

end

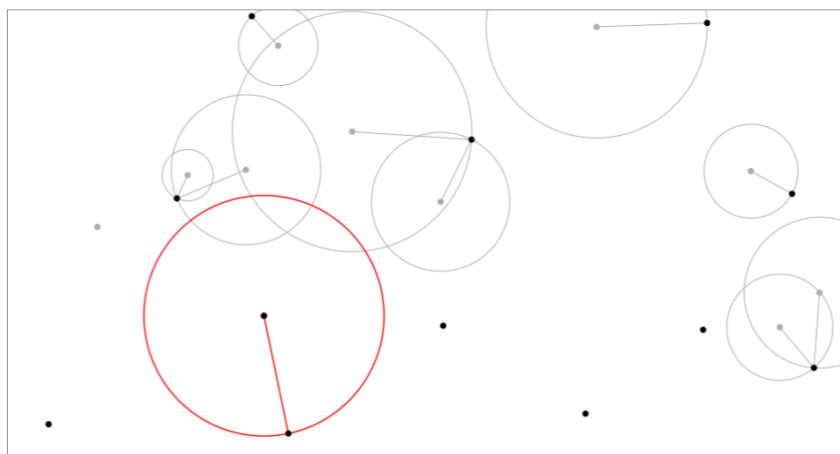
end

end

Armazenamento dos dados no arquivo de saída

A segunda abordagem segue o algoritmo de Mitchell (1991), que tem como objetivo gerar amostras bem distribuídas em um espaço limitado. Esta lógica é bastante utilizada na geração de conjuntos de dados ou na amostragem de imagens digitais. Na aplicação da alocação das fibras de um meio filtrante, inicialmente, uma primeira fibra é alocada, de forma randômica, obedecendo os limites do domínio computacional. Da segunda fibra

Figura 4.10 – Geração e escolha do melhor candidato no algoritmo de Mitchell (1991)



Fonte: Bostock (2014).

em diante, é gerado um número fixo de candidatos, com alocação também aleatória. A quantidade de candidatos gerados para cada fibra é uma escolha do usuário do código. No caso deste trabalho, foram escolhidas 50000 possíveis alocações, a fim de garantir que o meio filtrante gerado fosse bastante uniforme, uma vez que, quanto maior o número de candidatos, maior a chance de se obter uma uniformidade na distribuição das fibras. Assim, foi escolhido um valor alto, muito maior do que o número total de fibras alocadas ao fim do processo. Para cada um dos candidatos, a distância entre este e a fibra já alocada mais próxima é calculada. A localização armazenada para a fibra em questão é aquela cuja distância da fibra mais próxima já alocada é a maior possível. Na Figura 4.10, observa-se que o melhor candidato possui uma maior distância da fibra mais próxima (representada em vermelho) em relação aos demais (representados em cinza). Assim como na abordagem aleatória, a etapa de verificação de sobreposição é incluída e, caso as fibras seja sobrepostas, ocorre a rejeição da fibra em questão, e um novo cálculo é iniciado. O Algoritmo 4 apresenta as etapas envolvidas na alocação das fibras segundo a lógica do melhor candidato de Mitchell (1991). Esta técnica de amostragem garante uma distribuição mais uniforme das fibras dentro dos limites do meio filtrante do que uma distribuição totalmente aleatória. Adiante, serão apresentados alguns testes que comparam a influência do padrão de distribuição das fibras no cálculo do escoamento e queda de pressão.

Os arquivos de saída do programa mostram as informações sobre o meio filtrante, como espessura e altura, os diâmetros mínimo, máximo e médio das fibras, o desvio padrão que caracteriza a distribuição log-normal, as frações de sólidos medidas experimentalmente e calculada pelo modelo e o número total das fibras (Figura 4.11). Além disso, para cada intervalo são mostrados os diâmetros e os respectivos valores das PDF's considerando a distribuição log-normal ideal e aqueles calculados pelo código. Em um segundo arquivo são salvos os valores de diâmetro e as coordenadas (x,y) de cada uma das fibras. Este arquivo

 Algoritmo 4: Alocação das fibras - Melhor candidato de Mitchell (1991)

```

for  $i < 30$  do
  for  $j < (\text{Número de fibras no intervalo})$  do
    for  $k < (\text{Número de candidatos})$  do
      Cálculo de  $x_{ale}$  e  $y_{ale}$  (Equações 4.22 e 4.23)
      Encontra fibra já alocada mais próxima do candidato
      if (distância da fibra mais próxima)  $>$  distância dos outros candidatos da
      k-ésima fibra do
        Armazena as coordenadas e define como melhor candidato
      end
      if fibras sobrepostas (Equação 4.24) do
        Cálculo de novos  $x_{ale}$  e  $y_{ale}$  (Equações 4.22 e 4.23)
      else Armazena coordenadas do melhor candidato
      end
    end
  end
end
  Armazenamento dos dados no arquivo de saída

```

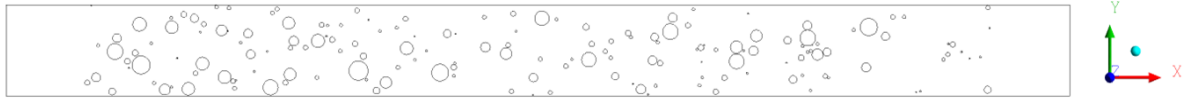
pode ser utilizado em *softwares* próprios para a confecção do modelo bidimensional do meio filtrante. A Figura 4.12 mostra uma geometria de um meio filtrante construída com o auxílio do código apresentado nesta seção, considerando uma alocação aleatória das fibras. Uma distância foi adicionada antes e depois da região que compreende as fibras, a fim de evitar efeitos de borda e garantir um escoamento já uniforme ao atingir as regiões compostas pelas fibras.

Figura 4.11 – Saída do código computacional para geração da geometria do meio filtrante.

Filter name: F8	n	Di (microns)	PDF_lognormal	PDF_real
Filter thickness: 350 microns	1	0.3600	0.1824	0.1834
	2	0.4019	0.2159	0.1834
	3	0.4488	0.2504	0.2231
Filter height: 60 microns	4	0.5011	0.2848	0.2910
	5	0.5595	0.3175	0.3009
Minimum fiber diameter: 0.3600 microns	6	0.6247	0.3469	0.3472
	7	0.6974	0.3716	0.3890
Maximum fiber diameter: 8.8000 microns	8	0.7787	0.3901	0.4149
	9	0.8695	0.4015	0.3923
Mean diameter (log-normal distribution): 1.7730 microns	10	0.9708	0.4051	0.4045
	11	1.0839	0.4006	0.4110
Standard deviation (log-normal distribution): 2.1820	12	1.2102	0.3883	0.3818
	13	1.3512	0.3690	0.3818
Fiber fraction experimental: 0.0810	14	1.5087	0.3437	0.3522
	15	1.6845	0.3138	0.3072
Fiber fraction model: 0.0794	16	1.8807	0.2808	0.2817
	17	2.0999	0.2464	0.2470
Total number of fibers: 260	18	2.3446	0.2119	0.2105
	19	2.6178	0.1786	0.1853
	20	2.9228	0.1476	0.1444
	21	3.2634	0.1196	0.1170
	22	3.6436	0.0949	0.0964
	23	4.0682	0.0739	0.0769
	24	4.5423	0.0564	0.0541
	25	5.0716	0.0422	0.0412
	26	5.6625	0.0309	0.0310
	27	6.3223	0.0222	0.0220
	28	7.0590	0.0156	0.0149
	29	7.8816	0.0108	0.0088
	30	8.8000	0.0073	0.0080

Fonte: Acervo pessoal.

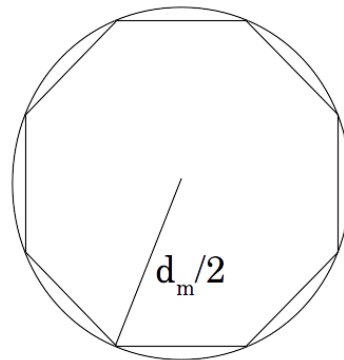
Figura 4.12 – Modelo do meio filtrante gerado com o auxílio do código computacional.



Fonte: Acervo pessoal.

A implementação das condições de contorno a serem aplicadas na superfície da fibra será explorada na Seção 4.2. Como será explicado, por simplificações na implementação, foram utilizados octógonos, ao invés de círculos, para representar as fibras. Assim, a segunda parte do código foi alterada, a fim de considerar a área de um octógono regular e ponderá-la com a fração de sólidos do meio filtrante. Para tal, foi considerado um octógono inscrito em um círculo, de forma que o raio médio da fibra $\frac{d_m}{2}$ é igual à maior distância entre o centro do octógono e sua borda, como mostra a Figura 4.13.

Figura 4.13 – Fibras octogonal e circular.



Fonte: Acervo pessoal.

A área da fibra em formato octogonal pode ser calculada por:

$$\text{Área do octógono} = 2 \operatorname{sen} \left(\frac{\pi}{8} \right) \cos \left(\frac{\pi}{8} \right) d_m^2 \quad (4.25)$$

Os dados apresentados na Seção 4.2 mostram que a utilização de octógonos para representar a seção transversal das fibras não traz perdas em termos dos fenômenos físicos, já que os resultados numéricos se aproximam dos dados experimentais.

4.2 Implementação da condição de contorno de escorregamento

Na superfície das fibras foram testadas as regras de *bounce back* e reflexão especular para as distribuições de partículas, descritas na Seção 3.2.6, para representar as condições de contorno de não-escorregamento e escorregamento livre, respectivamente.

No biblioteca OpenLB, todas as condições de contorno aplicadas nas superfícies são implementadas em uma escala mesoscópica, através de regras de reflexão e modificação

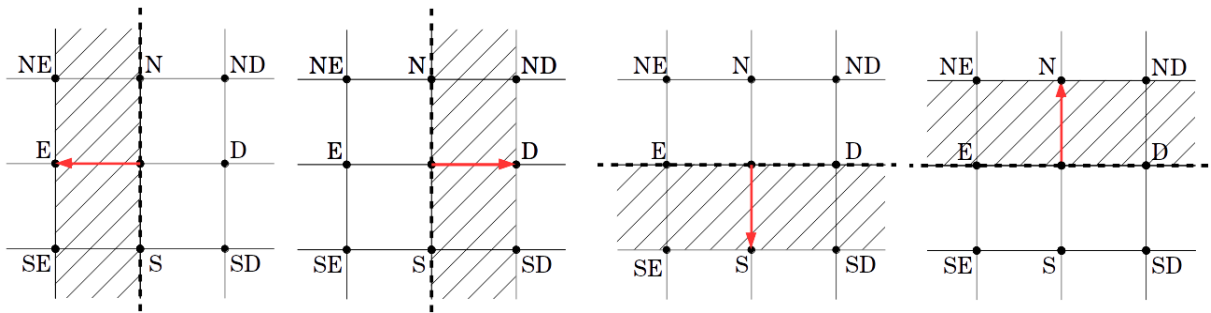
das funções de distribuição, diferentemente do que ocorre em técnicas de simulação, como o método dos volumes finitos. Neste último caso, uma abordagem macroscópica é geralmente utilizada, na qual são definidas as velocidades ou tensões entre o fluido e a fronteira. A condição de contorno *bounce back* já se encontrava implementada na biblioteca para utilização, através da Equação 3.33. Trata-se da formulação padrão para a representação do não-escorregamento através de uma abordagem mesoscópica. Entretanto, a condição de contorno de escorregamento livre não fazia parte da biblioteca até o momento e sua implementação foi, então, necessária. Para tal, a regra da reflexão especular foi utilizada, segundo a Equação 3.35. A implementação desta condição de contorno não é tão direta quanto a de *bounce back*, pois envolve o cálculo do vetor normal à superfície, e não só a simples reflexão das funções de distribuição. Para este cálculo, foi utilizado um vetor que já encontrava-se disponível na biblioteca OpenLB, chamado **discreteNormal**. Este vetor é discreto, ou seja, ele está relacionado a cada nó do domínio computacional. Logo, um vetor é calculado para cada nó, dependendo do tipo de fronteira correspondente. Tomando um arranjo D2Q9 como exemplo, pode-se encontrar três diferentes tipos de fronteira: o caso de nós alinhados, que dá origem uma fronteira reta (Figura 4.14a); o caso de vértices, que dá origem a dois tipos de cantos, internos ou externos, como mostrado nas Figuras 4.14b e 4.14c, respectivamente. Para cada tipo de fronteira, há quatro possibilidades de orientações diferentes, como pode-se observar na Figura 4.14, na qual a área hachurada representa a superfície sólida. Dessa forma, o vetor **discreteNormal** possui três argumentos, sendo o primeiro para identificar o tipo de fronteira, e outros dois que indicam a direção e sentido do vetor unitário normal. O método para identificar o tipo de fronteira é baseado na análise do tipo de material dos nós (como exposto na Seção 3.2.7), e posterior atribuição dos valores dos argumentos do vetor.

Inicialmente, há uma restrição de que a normal discreta só é calculada sobre um nó caso o material seja diferente de 0 ou 1. De acordo com a Seção 3.2.7, isso significa que sobre o nó em questão será aplicada uma condição de superfície, entrada ou saída. Em seguida, fixa-se um nó e analisa-se os nós vizinhos. As regras de análise dos nós vizinhos são definidas de acordo com o tipo de fronteira. Assim, em cada caso inicialmente o tipo de fronteira é definida (primeiro argumento do vetor **discreteNormal**) e, em seguida, as regras para o cálculo do vetor normal são definidas. A seguir, a lógica para o cálculo deste vetor é detalhada para cada tipo de fronteira.

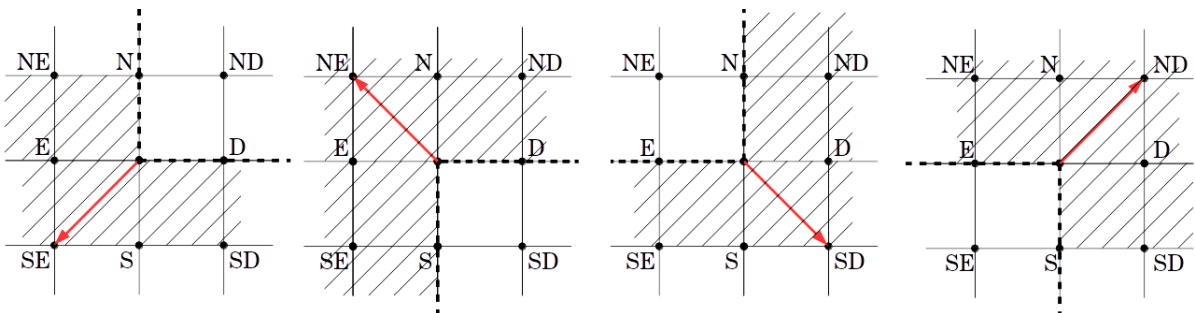
Fronteiras retas

Fixando o nó central dos esquemas da Figura 4.14a, se a condição de que os nós N e S tenham materiais diferentes de 0 ou 1 for satisfeita, identifica-se uma fronteira reta, e o valor 0 é atribuído ao primeiro argumento do vetor **discreteNormal**. Caso D possua material número 1 (fluido), temos a primeira situação da Figura 4.14a, e a

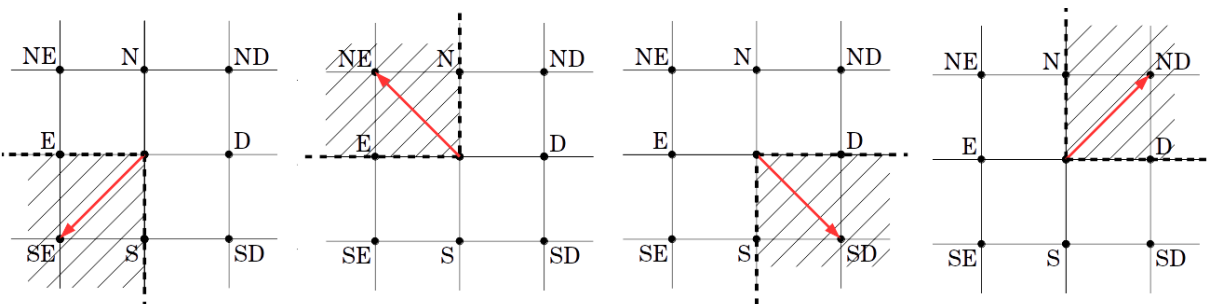
Figura 4.14 – Tipos de fronteiras.



(a) Fronteira reta.



(b) Cantos internos.



(c) Cantos externos.

Fonte: Acervo pessoal.

normal tem a direção $(-1,0)$. Logo, o vetor **discreteNormal** tem como argumento $[0,-1,0]$. Analogamente, caso E seja identificado como material número 1, a superfície sólida é localizada de acordo com a área hachurada da segunda situação, e o vetor tem valor $[0,1,0]$.

Por outro lado, caso D ou E assumam valores diferentes de 0 ou 1, a superfície é localizada horizontalmente. Se N for preenchido com fluido (número 1), a terceira situação é caracterizada. Neste caso, o vetor **discreteNormal** tem valor $[0,0,-1]$. Caso S seja identificado pelo número 1, tem-se uma fronteira reta do último tipo da Figura 4.14a, e o vetor assume valor $[0,0,1]$.

Cantos internos

Avaliando agora a Figura 4.14b, sempre fixando o nó central como referência, caso o nó D seja diferente de 0 ou de 1, significa que não há fluido nesta região, e ele faz parte da fronteira. Se o nó N assumir número também diferente de 0 ou 1, e ND for preenchido por fluido (número 1), tem-se a primeira situação da Figura 4.14b. Neste caso, o primeiro argumento é atribuído como 1, para indicar que trata-se de uma fronteira do tipo canto interno, e a normal tem direção $(-1,-1)$, o que faz o vetor **discreteNormal** ter como valor $[1,-1,-1]$. Por outro lado, se o nó S possuir número diferente de 0 ou 1, e SD for marcado como 1, tem-se a segunda situação, e o argumento do vetor **discreteNormal** é $[1,-1,1]$.

Se avaliarmos o nó E e ele for identificado por número diferente de 0 ou 1, sabe-se que ele faz parte da fronteira. Caso o nó N for diferente de 0 ou 1, e NE for preenchido por fluido (número 1), tem-se a terceira situação, e o argumento do vetor **discreteNormal** é $[1,1,-1]$. Se o nó S for diferente de 0 ou 1, e SE for igual a 1, caracteriza-se a última situação, na qual o vetor **discreteNormal** é dado por $[1,1,1]$.

Cantos externos

Marcando-se o nó central da Figura 4.14c como referência, fixa-se a condição de que o nó E seja diferente de 0 ou 1. Caso S também esteja na fronteira e SE assuma valor de sólido (número 0), o primeiro caso é caracterizado, e a normal tem direção $(-1,-1)$. O vetor **discreteNormal** possui os argumentos $[2,-1,-1]$, sendo que o primeiro argumento é fixado como 2, para identificar as fronteiras do tipo canto externo. Outra condição seria a de que N assumisse valores diferentes de 0 ou 1, e NE fosse marcado como material número 0. Neste caso, teríamos a segunda situação, identificada pelo vetor $[2,-1,1]$.

Analisando o nó D, caso ele seja identificado por valores diferentes de 0 ou 1, observa-se que ele está na fronteira da superfície sólida. Caso S siga a mesma regra, e SD esteja marcado pelo número 0, temos a terceira situação, na qual o vetor **discreteNormal** tem valor $[2,1,-1]$. Por fim, se N possuir valor diferente de 0 ou 1, e ND igual a 0, tem-se a última situação, e o vetor tem como argumentos $[2,1,1]$.

As três situações apresentadas anteriormente podem ser resumidas nos seguintes Algoritmos 5, 6 e 7.

Como pôde ser observado, a normal sempre assume angulações iguais a 0, 45 ou 180°, já que todos os nós dos arranjos em lattice Boltzmann estão localizados ortogonalmente entre si. Isso traz uma limitação para a aplicação desta condição de contorno: fronteiras regulares devem ser utilizadas. Por exemplo, caso um duto posicionado a 30° seja utilizado nas simulações, a regra da reflexão especular não ocorre de forma correta. Isso acontece porque, nas fronteiras, os nós não estão dispostos de forma organizada, como em degraus de mesmo tamanho. Assim, o número de vetores normais em cada direção será diferente, e a resultante de todas estas normais é diferente de 0, 45 ou 90°. Caso uma fronteira

Algoritmo 5: Fronteiras retas

```

if  $N \neq 0,1$  &&  $S \neq 0,1$  do
  if  $D = 1$  do
    discreteNormal = [0,-1,0]
  end
  if  $E = 1$  do
    discreteNormal = [0,1,0]
  end
end

if  $D \neq 0,1$  &&  $E \neq 0,1$  do
  if  $N = 1$  do
    discreteNormal = [0,0,-1]
  end
  if  $S = 1$  do
    discreteNormal = [0,0,1]
  end
end

```

Algoritmo 6: Cantos internos

```

if  $D \neq 0,1$  do
  if  $N \neq 0,1$  &&  $ND = 1$  do
    discreteNormal = [1,-1,-1]
  end
  if  $S \neq 0,1$ , &&  $SD = 1$  do
    discreteNormal = [1,-1,1]
  end
end

if  $E \neq 0,1$  do
  if  $N \neq 0,1$  &&  $NE = 1$  do
    discreteNormal = [1,1,-1]
  end
  if  $S \neq 0,1$  &&  $SE = 1$  do
    discreteNormal = [1,1,1]
  end
end

```

Algoritmo 7: Cantos externos

```

if  $E \neq 0,1$  do
  if  $S \neq 0,1$  &&  $SE = 0$  do
    discreteNormal = [2,-1,-1]
  end
  if  $N \neq 0,1$ , &&  $NE = 0$  do
    discreteNormal = [2,-1,1]
  end
end

if  $D \neq 0,1$  do
  if  $S \neq 0,1$  &&  $SD = 0$  do
    discreteNormal = [2,1,-1]
  end
  if  $N \neq 0,1$  &&  $ND = 0$  do
    discreteNormal = [2,1,1]
  end
end

```

em que os nós estejam organizados em degraus perfeitos, como um duto posicionado a 45° , a resultante da normal será 45° . O mesmo duto posicionado a 0 ou 90° fornece um vetor resultante para a normal discreta de mesma angulação, permitindo a utilização da condição de contorno de forma correta.

Por este motivo, na segunda parte do código para alocação das fibras do domínio computacional, apresentada na Seção 4.1.2, o código foi adaptado a fim de considerar a seção transversal de corte da fibra como um octógono regular. Neste caso, apenas fronteiras retas são empregadas, excluindo a limitação com a condição de contorno de

escorregamento. Para tal finalidade, o diâmetro da fibra circular foi considerado igual à maior distância entre o centro do octógono inscrito no círculo e sua borda. Pode-se observar, também, pela Figura 4.13, que as áreas do círculo e o octógono são bem próximas. Isto garante que a frequência das fibras se mantenha, segundo a distribuição log-normal. Mesmo que o escoamento local (perfis de velocidade ao redor das fibras e coeficiente de arraste, por exemplo) ao redor do octógono e do cilindro seja ligeiramente diferente entre si, espera-se que variáveis globais não sofram alterações significativas, como a queda de pressão, que é a variável de interesse do trabalho. Nas próximas seções, serão apresentados experimentos numéricos de verificação e aplicação da condição de contorno de reflexão especular.

Experimentos Numéricos e Resultados das Simulações

Neste capítulo, serão apresentados os resultados da etapa de verificação da condição de contorno de escorregamento em escoamentos confinados e ao redor de obstáculos, além da aplicação das condições de contorno em meios filtrantes reais. A comparação entre as duas abordagens utilizadas para a alocação das fibras também será apresentada, incluindo uma análise do tamanho do domínio necessário para se obter uma representação fidedigna do meio filtrante.

5.1 Verificação da condição de contorno

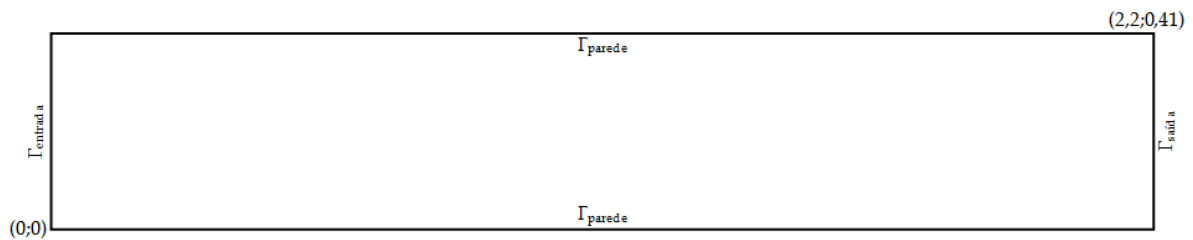
O objetivo desta seção é verificar a condição de contorno de reflexão especular implementada neste trabalho, conforme a Seção 4.2. A comparação também foi realizada para a regra *bounce back*, para garantir que não havia problemas no código da configuração da simulação. Para esta finalidade, foram considerados dois diferentes casos: o escoamento entre duas placas planas paralelas, e ao redor de obstáculos (cilindro e octógono), também entre placas planas paralelas. As geometrias utilizadas estão ilustradas na Figura 5.1. A seguir, os detalhes e os resultados de cada simulação serão apresentados.

5.1.1 Escoamento entre placas planas paralelas

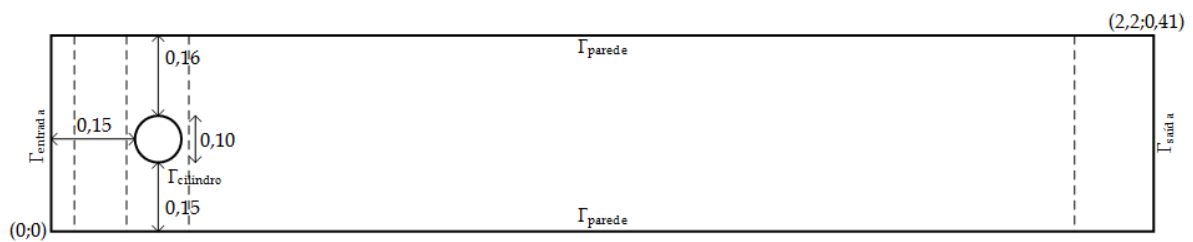
As duas placas planas paralelas (Figura 5.1a) foram utilizadas em duas orientações diferentes: 0 e 45°, a fim de testar o limite com nós alinhados (fronteira reta) e com nós em degraus (cantos internos e externos), respectivamente. Na Figura 5.2a, observa-se que a orientação “lado-a-lado” dos nós do *grid* quando se tem uma parede orientada a 0°, leva a uma situação composta apenas por fronteiras retas. Já a orientação em 45° (Figura 5.2b), os nós da parede estão organizados em degraus, de forma que esta orientação foi utilizada, então, para garantir que a condição de contorno está corretamente implementada nos cantos internos e externos. Em ambas as figuras, o a região mais escura representada o

interior do domínio computacional, sendo a região que compreende o fluido. Espera-se o mesmo escoamento para ambas as orientações em 0° e 45° . Nos limites Γ_{parede} foram testadas as regras *bounce back* e reflexão especular, separadamente. Nas fronteiras $\Gamma_{entrada}$ e $\Gamma_{saída}$, foram definidas velocidades fixas, o que faz com que as fronteiras se tornem periódicas. Na simulação em que a condição de não-escorregamento foi aplicada, um perfil de Poiseuille de velocidade foi definido em $\Gamma_{entrada}$; já no caso da reflexão especular, uma velocidade uniforme foi utilizada. Tal escolha foi baseada no fato de que espera-se que o perfil de velocidade parabólico se mantenha no caso da condição de não-escorregamento, uma vez que há atrito entre a superfície e a camada de fluido. No caso da condição de contorno de escorregamento, espera-se que o perfil uniforme também se mantenha, uma vez que neste caso o atrito entre o fluido e o sólido seria desprezível. Os valores da viscosidade e da velocidade do fluido garantem que o escoamento seja laminar. No centro das duas placas, a velocidade foi medida e o erro relativo entre a medição e o perfil de entrada foi calculado. O mesmo procedimento foi realizado tanto para as placas orientadas a 0 quanto a 45° .

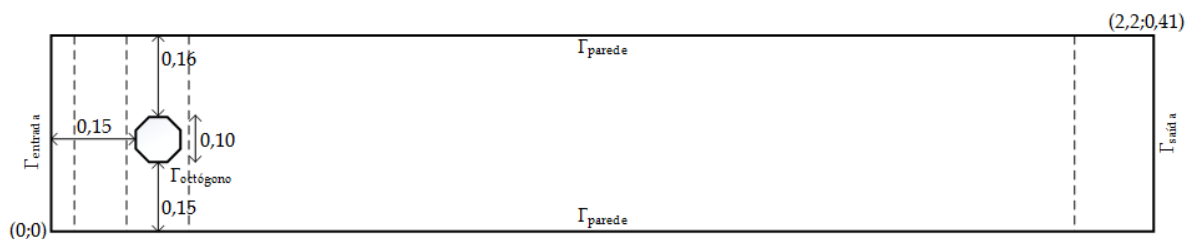
Figura 5.1 – Geometrias utilizadas para verificação da condição de contorno, unidades em metros.



(a) Placas planas paralelas.

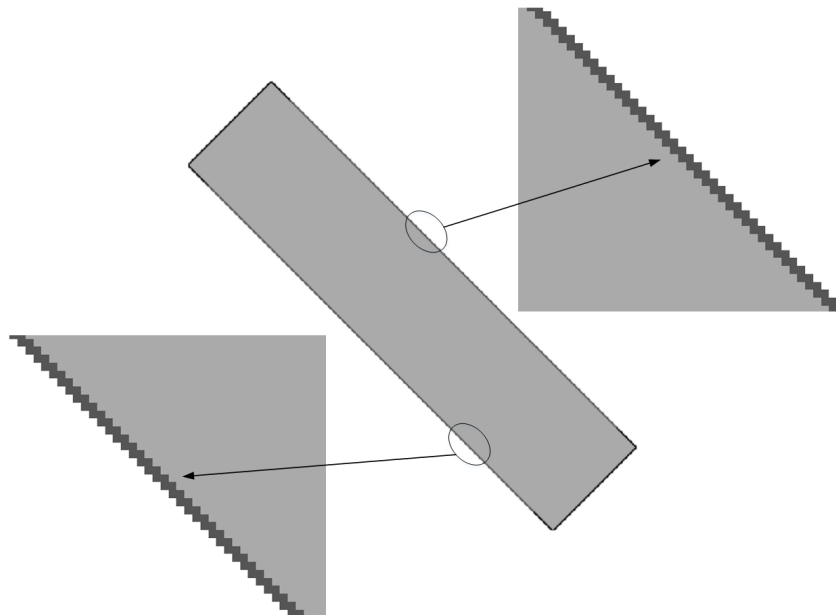
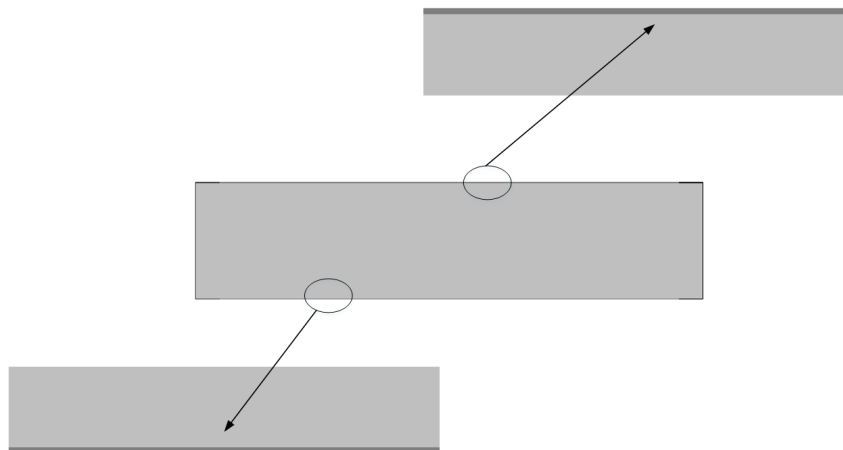


(b) Cilindro bidimensional, entre placas planas paralelas, baseado em Schaefer et al. (1996).



(c) Octógono bidimensional, entre placas planas paralelas.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.2 – Detalhes do *grid* das placas planas paralelas.(a) Detalhes das fronteiras retas superior e inferior, com as placas alinhadas a 0° .(b) Detalhes dos cantos internos e externos, com as placas alinhadas a 45° .

Fonte: Acervo pessoal.

Para verificar o comportamento do erro com o espaçamento entre os nós h , várias simulações foram realizadas para diferentes resoluções N , gerando uma série f^h para cada condição de contorno, sendo $h = \frac{1}{10N}$, e N variando de 1 a 16. A verificação do comportamento do erro com o espaçamento entre nós pode ser realizado de duas formas: segundo a escala difusiva ou de acordo com a escala acústica. No primeiro caso, a razão $\frac{\Delta t}{h^2}$ é constante para toda f^h , e a frequência de relaxação ω também permanece constante, melhorando a precisão, quando a resolução aumenta. Já na segunda estratégia, $\frac{\Delta t}{h}$ é constante para toda f^h , e só há melhora na precisão caso a relação seja pequena. Geralmente, a escala acústica é utilizada quando se trabalha com escoamentos

compressíveis ou em acústica, quando a velocidade do som é um parâmetro importante. Em termos dos números adimensionais, a escala difusiva faz com que o número de Mach seja próximo de zero e o adimensional de Reynolds seja fixo, enquanto a escala acústica trabalha com o adimensional de Mach fixo e valores muito altos do número de Reynolds (DELLAR, 2013; WEISBROD, 2015). Como no escoamento em questão os efeitos de compressibilidade são desprezíveis, a escala difusiva foi utilizada para se avaliar o comportamento dos resultados com a variação do espaçamento entre os nós. Para tal, o erro relativo ($e_{\mathbf{u},h}$) entre os erros relativos estimados no centro das duas placas (e_{placas,f^h}) foi calculado em relação à solução obtida com melhor resolução (e_{placas}^*), como segue:

$$e_{\mathbf{u},h} := \frac{\|e_{placas,f^h} - e_{placas}^*\|}{\|e_{placas}^*\|}. \quad (5.1)$$

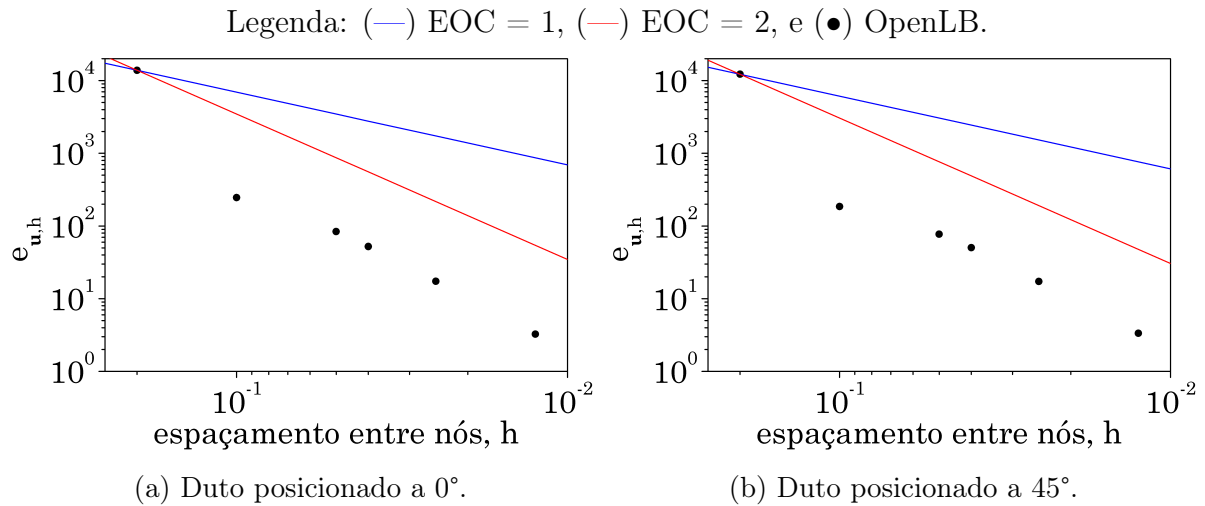
A evolução do erro em função da resolução N é mostrada na Figura 5.3, para ambas as condições de contorno aplicadas nas paredes horizontais Γ_{parede} . Observa-se que com a redução do valor do parâmetro de discretização h , o erro rapidamente tende a zero, indicando a baixa influência da discretização espacial nos resultados. Através da evolução do erro, a ordem de convergência experimental (EOC, do inglês *experimental order of convergence*) pode ser calculada. Trata-se de uma relação entre os erros relativos entre as soluções, para diferentes resoluções, ($e_{\mathbf{u},h}$) e o parâmetro de discretização h , definido como (REIDER; STERLING, 1995):

$$EOC_{i,k} := \frac{\ln(e_{\mathbf{u},h_i}/e_{\mathbf{u},h_k})}{\ln(h_i/h_k)}. \quad (5.2)$$

Se um gráfico do erro relativo ($e_{\mathbf{u},h}$) em função do espaçamento entre os nós h for construído, o EOC será exatamente a inclinação da reta. Dessa forma, nas Figuras 5.3a e 5.3b, foram traçadas duas retas teóricas considerando EOC iguais a 1 e 2, que são retas com coeficiente angular iguais a 1 e 2, passando pelo primeiro ponto do conjunto de dados. Na prática, estes dois valores de EOC significam que, quando o espaçamento entre os nós é duplicado, o erro diminui pela metade ($EOC = 1$), ou o erro diminui em um quarto ($EOC = 2$). Krause (2010) observou resultados semelhantes ao utilizar o método de lattice Boltzmann em um escoamento incompressível, com ordem de convergência de aproximadamente 2 para a velocidade ao utilizar o método de lattice Boltzmann em escoamentos incompressíveis. As Figuras 5.3a e 5.3b mostram que, para ambas as condições de contorno, a ordem de convergência experimental é, de fato, aproximadamente 2, estando de acordo com o desenvolvimento teórico da equação de lattice Boltzmann e com os resultados encontrados por Krause (2010). Como espera-se que o método de lattice Boltzmann seja de segunda ordem em relação à discretização espacial, um valor para a ordem de convergência experimental próximo a 2 garante que os erros relacionados aos efeitos da compressibilidade são baixos. Como trata-se de um método que não é capaz de

simular um escoamento completamente incompressível, é importante verificar se os efeitos de compressibilidade são mantidos baixos.

Figura 5.3 – EOC para o escoamento entre duas placas planas paralelas, com esquema *bounce back*.



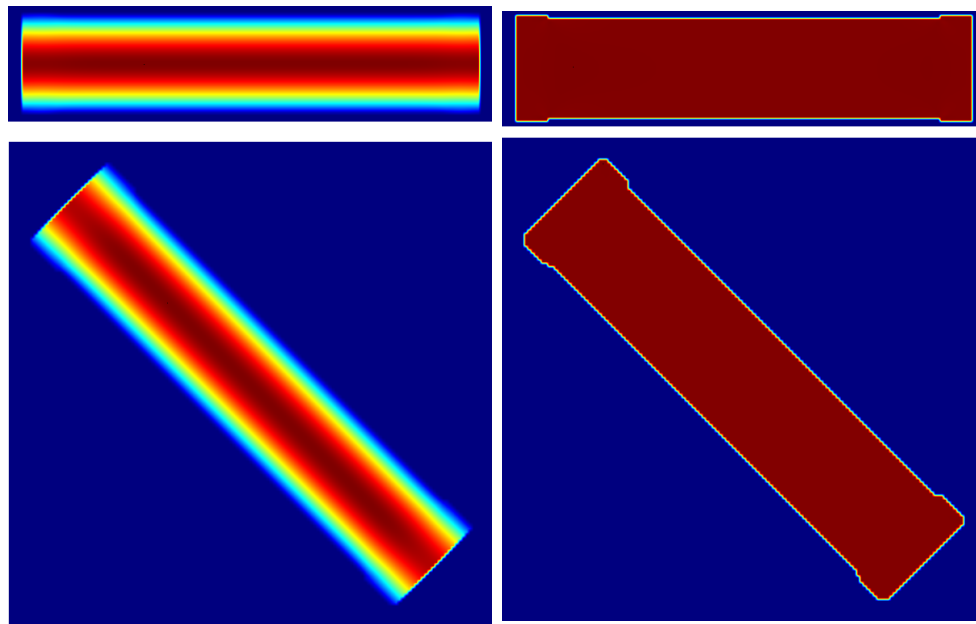
Fonte: Acervo pessoal.

Os mesmos testes foram realizados aplicando a regra da reflexão especular nas superfícies das duas placas planas paralelas Γ_{parede} . Os erros relativos entre as diferentes soluções apresentaram valores da ordem da precisão da máquina (10^{-16}), e por isso os resultados da evolução do erro e da ordem de convergência não são apresentados. Este resultado comprova que a regra de reflexão especular recupera os efeitos de escorregamento, uma vez que não foi observado nenhum perfil de velocidade parabólico ao longo do comprimento da placa. O perfil se manteve uniforme, tanto para 0 e 45° , o que era esperado uma vez que não há atrito, ou perda de energia, entre a superfície sólida e a camada de fluido. Isso confirma que ambas as condições de contorno estão corretamente implementadas e recuperam os efeitos macroscópicos, para nós posicionados de forma alinhada e em degraus regulares.

As Figuras 5.4a e 5.4b mostram os contornos de velocidade obtidos com as condições de contorno *bounce back* e reflexão especular aplicadas nas paredes internas das placas. Pode-se observar que para ambos os casos (0 e 45°), o resultado é como esperado: para o esquema *bounce back*, o perfil de velocidade parabólico se mantém, devido ao atrito entre o fluido e a superfície sólida, e para a reflexão especular, a velocidade permanece uniforme, uma vez que para este caso o atrito é desprezível, não havendo formação de um perfil parabólico de velocidade.

Com os resultados desta seção, pode-se concluir que as condições de contorno de *bounce back* e reflexão especular recuperam os efeitos macroscópicos de não-escorregamento e escorregamento livre, respectivamente, tanto para arranjos de lattice alinhados ou em degraus.

Figura 5.4 – Contornos de velocidade obtidos para o escoamento entre placas planas paralelas.



(a) Esquema *bounce back* utilizado nas paredes internas. (b) Reflexão especular utilizada nas paredes internas.

Fonte: Acervo pessoal.

5.1.2 Escoamento ao redor de obstáculos

O segundo conjunto de testes para verificação compreende o escoamento ao redor de seções transversais circular e octogonal, como ilustrado nas Figuras 5.1b e 5.1c. As dimensões do círculo foram escolhidas de acordo com Schaefer et al. (1996). O autor reuniu resultados de simulações do mesmo caso (o escoamento incompressível ao redor de um cilindro bi e tridimensional), obtidos por pesquisadores de diversas instituições, a fim de comparar diferentes métodos numéricos. As dimensões do octógono foram semelhantes às do cilindro, de forma que a distância entre o centro do octógono e suas arestas é igual ao raio do cilindro (Figura 4.13).

Para ambos os casos (cilindro e octógono), foram obtidos dados para a queda de pressão entre pontos antes e após o obstáculo, e dados para o coeficiente de arraste. No caso do cilindro, os dados foram, então, comparados com os resultados sumarizados por Schaefer et al. (1996) e também com dados obtidos por simulações no pacote comercial ANSYS Fluent, que utiliza o método dos volumes finitos para resolver diretamente as equações de Navier-Stokes. Para o octógono, como não foram encontrados dados da literatura para comparação, os resultados da queda de pressão e do coeficiente de arraste foram comparados apenas com os dados obtidos pelas equações de Navier-Stokes.

Para ambas as situações (Figuras 5.1b e 5.1c), na entrada do domínio $\Gamma_{entrada}$, foi imposto um perfil de Poiseuille, com velocidade máxima igual a $0,3 \text{ m/s}$, e na saída Γ_{saida} , foi considerada pressão relativa igual a zero. Nas paredes horizontais Γ_{parede} , o

esquema *bounce back* foi fixado também para os dois casos. Na superfície dos obstáculos, em $\Gamma_{cilindro}$, apenas o esquema *bounce back* foi aplicado, e em $\Gamma_{octógono}$ foram testadas as condições de *bounce back* e de reflexão especular, uma vez que neste caso tem-se apenas fronteiras retas e degraus regulares. Para estes tipos de arranjos de nós, sabe-se que a condição de reflexão especular recupera os efeitos do escorregamento, como mostrado na Seção 5.1.1.

A configuração da simulação foi realizada de acordo com os detalhes apresentados por Schaefer et al. (1996). O número de Reynolds do escoamento é igual a 20, sendo que a viscosidade cinemática do fluido ν é $10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$. O comprimento característico $charL$ foi escolhido como 0,10 m, que é igual ao diâmetro do cilindro e à distância do centro do octógono até suas arestas. Para o cálculo da queda de pressão, foram selecionados dois pontos antes e depois do obstáculo, em (0,15;0,20) e (0,25;0,20), respectivamente. O coeficiente de arraste foi calculado pela seguinte relação (ÇENGEL; CIMBALA, 2007):

$$C_D = \frac{2F_D}{\rho u_{fluido}^2 A_{frontal}} \quad (5.3)$$

em que $A_{frontal}$ é a área frontal, projetada num plano normal à direção do escoamento, e F_D é a força de arraste, sendo a força que age sobre o obstáculo na mesma direção do escoamento. Vale lembrar que a força que age na direção normal ao escoamento é conhecida como força de sustentação. Ambos os códigos OpenLB e ANSYS Fluent são capazes de fornecer as componentes da força que age sobre o objeto sólido e a área de atuação da mesma, sendo, então, possível de se estimar o coeficiente de arraste para cada caso.

Da mesma forma que para o escoamento confinado entre duas placas planas, foram realizadas várias simulações com diferentes resoluções N , sendo o espaçamento entre nós $h = \frac{1}{10N}$, para o cilindro e para o octógono. Novamente, a escala difusiva foi utilizada na análise de convergência para todo o conjunto f^h . De forma análoga, o erro relativo entre cada solução de f^h ($p_{obstáculo,f^h}$ e $C_{Dobstáculo,f^h}$) e o resultado da simulação de melhor resolução ($p_{obstáculo}^*$ e $C_{Dobstáculo}^*$) foi calculado, para a queda de pressão ($e_{p,h}$) e para o coeficiente de arraste ($e_{C_D,h}$), como segue, respectivamente:

$$e_{p,h} := \frac{\|p_{obstáculo,f^h} - p_{obstáculo}^*\|}{\|p_{obstáculo}^*\|} \quad (5.4)$$

$$e_{C_D,h} := \frac{\|C_{Dobstáculo,f^h} - C_{Dobstáculo}^*\|}{\|C_{Dobstáculo}^*\|} \quad (5.5)$$

A ordem de convergência foi calculada com base nos erros relativos $e_{p,h}$ e $e_{C_D,h}$, de forma similar ao cálculo realizado para as placas planas paralelas, como, respectivamente:

$$EOC_{i,k} := \frac{\ln(e_{p,h_i}/e_{p,h_k})}{\ln(h_i/h_k)} \quad (5.6)$$

$$EOC_{i,k} := \frac{\ln(e_{C_D,h_i}/e_{C_D,h_k})}{\ln(h_i/h_k)}. \quad (5.7)$$

O gráfico da evolução do erro em função do espaçamento entre os nós foi construído também da mesma forma que mostrado na Seção 5.1.1, com as retas teóricas de inclinações fixas, iguais a 1 e 2, como mostrado nas Figuras 5.5 e 5.6. Novamente, o erro tende a zero quando a resolução aumenta, evidenciando a baixa influência do parâmetro de discretização h nos resultados da simulação. Além disso, para todos os casos, o EOC encontra-se entre 1 e 2, ou mais, mostrando que o erro diminui de forma mais rápida do que a resolução aumenta. Os resultados encontram-se de acordo com os dados apresentados por Krause (2010) ao utilizar o método de lattice Boltzmann para escoamentos incompressíveis, de aproximadamente 1,5 para a ordem de convergência em relação à pressão. Para a ordem de convergência do coeficiente de arraste, os valores também encontram-se entre os dados apresentados por Krause et al. (2017), de aproximadamente 1,0 e por Bouzidi, Firdaouss e Lallemand (2001), de aproximadamente 2,0 para o coeficiente de arraste.

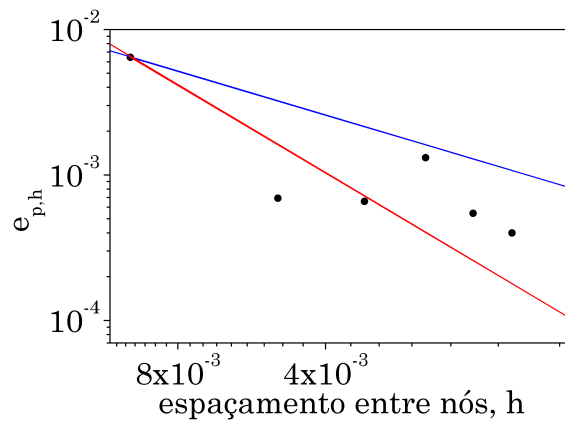
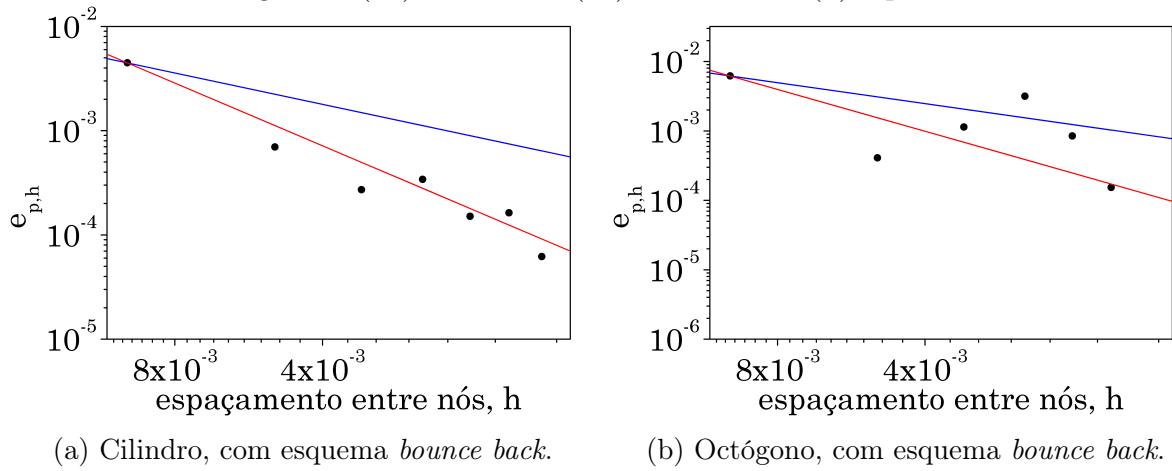
Analisada a ordem de convergência, passa-se à verificação de fato, que consiste na comparação com dados de Schaefer et al. (1996) e os resultados obtidos pelo método dos volumes finitos e as equações de Navier-Stokes. Domínios computacionais com dimensões idênticas àquelas das Figuras 5.1b e 5.1c foram construídos no pacote comercial ANSYS Fluent. Sobre as geometrias virtuais, foram construídas malhas numéricas com elementos quadriláteros, de forma que o tamanho dos mesmo foi, aproximadamente, o mesmo do espaçamento entre os nós h , a fim de manter a mesma escala espacial de resolução em ambos o método lattice Boltzmann e equações de Navier-Stokes. Assim, foram obtidas oito malhas numéricas correspondentes às resoluções consideradas no código OpenLB. As configurações de condições de contorno e propriedades do escoamento (viscosidade e velocidade do fluido) e as condições de contorno foram as mesmas utilizadas no método lattice Boltzmann, tanto para o cilindro quanto para o octógono. A pressão foi medida exatamente no mesmo local para ambos os códigos, antes e depois dos obstáculos, para se obter a queda de pressão.

Os resultados da quedas de pressão e do coeficiente de arraste obtidos por ambos os códigos e também os valores mínimo e máximo sumarizados por Schaefer et al. (1996) para o escoamento ao redor do cilindro estão apresentados na Figura 5.7a e 5.8a, para todas as resoluções do modelo. Pode-se observar que com o aumento da resolução, a queda de pressão e o coeficiente de arraste tendem a um valor constante, para ambos os códigos, que estão próximos dos valores encontrados por diversos pesquisadores, segundo Schaefer et al. (1996). Esta tendência mostra que os resultados da simulação são independentes do espaçamento entre nós (ou da resolução).

A concordância observada entre os valores obtidos pelos dois métodos e os dados apresentados em Schaefer et al. (1996) indica que a configuração da simulação está

Figura 5.5 – EOC para o escoamento ao redor de obstáculos, para a queda de pressão.

Legenda: (—) EOC = 1, (—) EOC = 2, e (●) OpenLB.



(c) Octógono, com esquema de reflexão especular.

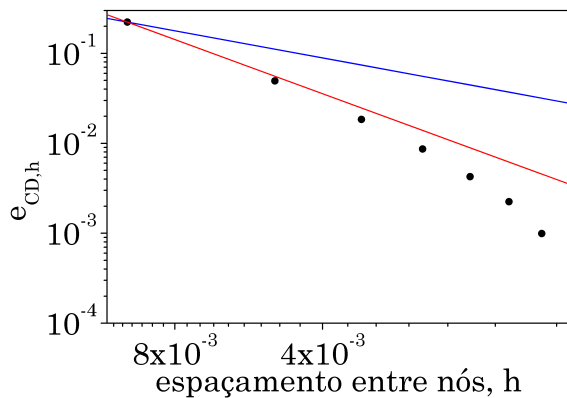
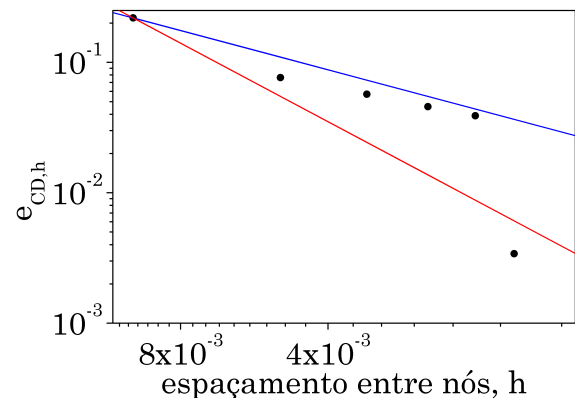
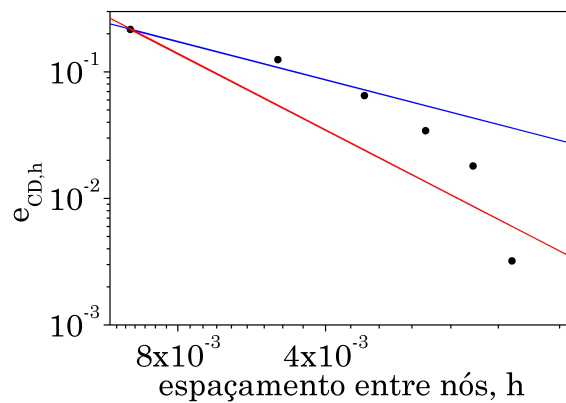
Fonte: Acervo pessoal.

de acordo com o caso de referência apresentado pelos autores. Portanto, a mesma configuração foi utilizada para o escoamento ao redor de um octógono regular, agora com as duas condições de contorno de *bounce back* e reflexão especular. Como não há resultados de referência, como no caso do cilindro, os dados foram comparados apenas entre os dois métodos (lattice Boltzmann e Navier Stokes). As Figuras 5.7b e 5.7c mostram que há uma tendência de estabilização dos valores da queda de pressão para ambos os casos, além de excelente concordância entre os valores de queda de pressão obtidos pelos dois métodos. A mesma tendência pode ser observada para o coeficiente de arraste ao redor do octógono, como mostram as Figuras 5.8b e 5.8c.

Os perfis de velocidade em quatro pontos do domínio computacional foram plotados, ao longo de linhas verticais, para ambos os códigos OpenLB e ANSYS Fluent. As linhas verticais foram posicionadas a 0,05 m da entrada (linha 1), 0,01 m antes (linha 2) e 0,01 m depois do cilindro (linha 3), e a 2 m da entrada do domínio (linha 4), indicadas em linhas pontilhadas, da esquerda para a direita, nas Figuras 5.1b e 5.1c. Pode-se observar que os perfis de velocidade são muito semelhantes para os dois códigos, como mostra a

Figura 5.6 – EOC para o escoamento ao redor de obstáculos, para o coeficiente de arraste.

Legenda: (—) EOC = 1, (—) EOC = 2, e (●) OpenLB.

(a) Cilindro, com esquema *bounce back*.(b) Octógono, com esquema *bounce back*.

(c) Octógono, com esquema de reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

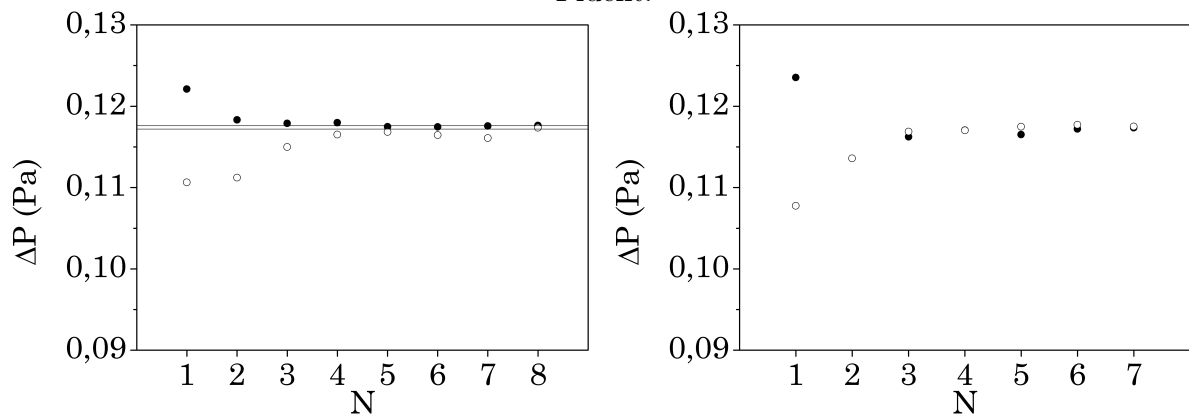
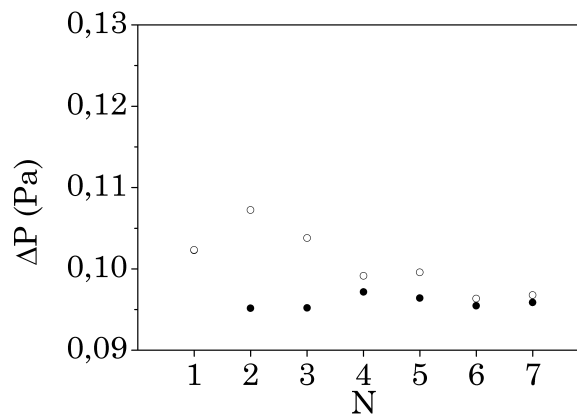
Figura 5.9, confirmando que a configuração da simulação está de acordo com a referência (SCHAEFER et al., 1996).

Análise semelhante foi realizada para o caso do escoamento ao redor do octógono regular. As linhas verticais de 1 a 4 foram traçadas nas mesmas posições que citado anteriormente, para o caso do cilindro. Para ambas as condições de contorno de escorregamento livre e não-escorregamento, pode-se observar, nas Figuras 5.10 e 5.11, boa concordância entre os resultados, para o método de lattice Boltzmann e as equações de Navier-Stokes.

Juntamente com os resultados apresentados anteriormente, esta concordância verifica a condição de contorno de escorregamento implementada através da regra de reflexão especular, na biblioteca OpenLB. Dessa forma, esta condição de contorno pode ser utilizada em outras aplicações. A seguir, a utilização desta condição de contorno será aplicada em meios filtrantes, cujas fibras são da ordem micrométrica, sendo importante a consideração dos efeitos do escorregamento na superfície das mesmas.

Figura 5.7 – Quedas de pressão para o escoamento ao redor de obstáculos.

Legenda: (—) valores apresentados por Schaefer et al. (1996), (●) OpenLB e (○) ANSYS Fluent.

(a) Cilindro, com esquema *bounce back*.(b) Octógono, com esquema *bounce back*.

(c) Octógono, com esquema de reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

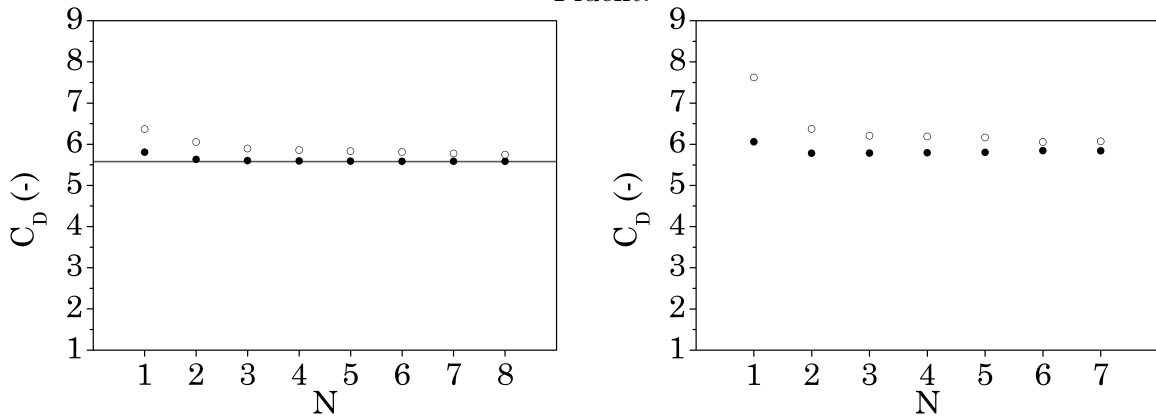
5.2 Aplicação em meios filtrantes

Com a verificação da condição de contorno de escorregamento, pode-se utilizá-la em aplicações de escoamento em casos de engenharia. Neste trabalho, três representações de meios filtrantes reais foram geradas de acordo com o código construído para esta finalidade, como detalhado na Seção 4.1. Estes meios filtrantes são identificados como F6, F8 e H13, segundo a norma ABNT NBR 16101:2012 (2012), que classifica filtros de acordo com suas características, como queda de pressão para diferentes faixas de vazão e eficiência de coleta para diversos tamanhos de partículas. As características de cada um dos meios filtrantes estão resumidas na Tabela 5.1, na qual os dados de distribuição estatística foram obtidos considerando uma distribuição log-normal.

O código construído como descrito na Seção 4.1 foi utilizado para a alocação das fibras, para ambas as abordagens apresentadas, de forma que o arquivo de saída com os diâmetros e as coordenadas de cada fibra foi importado na biblioteca OpenLB. Os

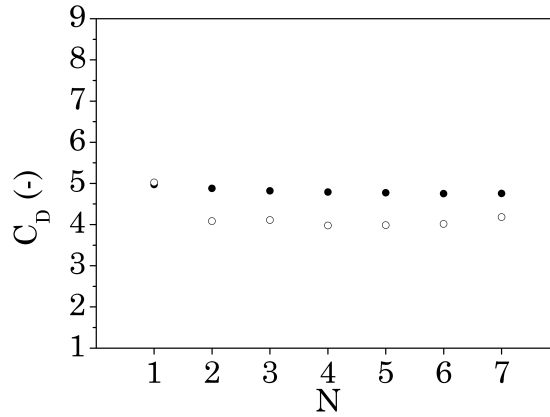
Figura 5.8 – Coeficientes de arraste para o escoamento ao redor de obstáculos.

Legenda: (—) valores apresentados por Schaefer et al. (1996), (●) OpenLB e (○) ANSYS Fluent.



(a) Cilindro, com esquema *bounce back*.

(b) Octógono, com esquema *bounce back*.



(c) Octógono, com esquema de reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela 5.1 – Características dos meios filtrantes utilizados nas simulações.

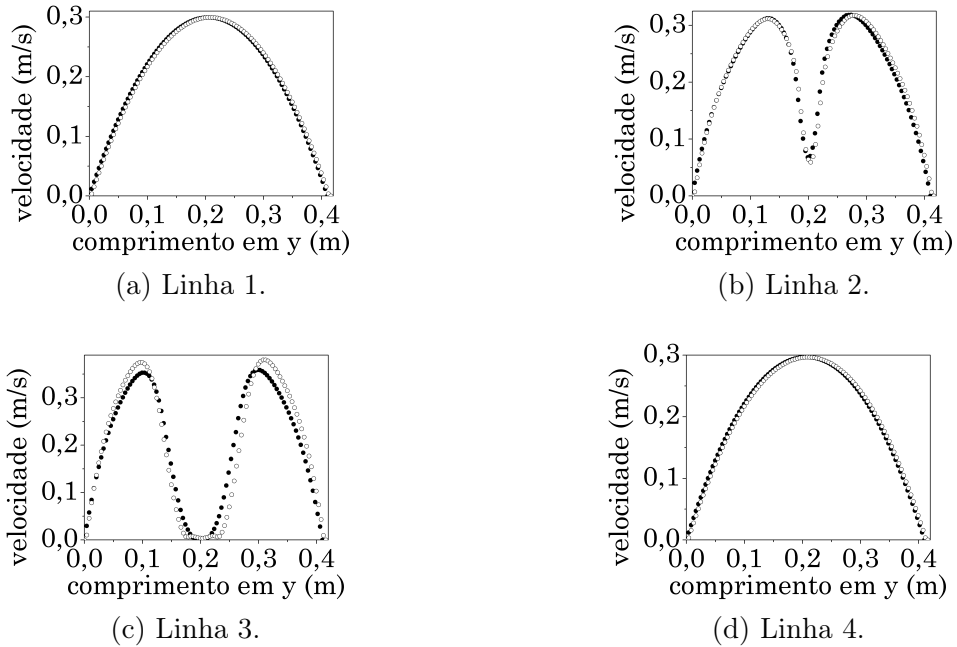
Características	F6	F8	H13
Diâmetro mínimo ($D_{mín}$)	1,15 μm	0,36 μm	0,13 μm
Diâmetro máximo ($D_{máx}$)	15,76 μm	8,80 μm	3,76 μm
Diâmetro médio (μ_g)	4,25 μm	1,77 μm	0,71 μm
Desvio Padrão (σ)	1,893	2,182	2,251
Fração de sólidos (ϵ_{exp})	0,0760	0,0810	0,0920
Espessura do meio filtrante	430 μm	350 μm	350 μm
Queda de pressão (TRONVILLE; RIVERS, 2006)	11 Pa	42 Pa	121 Pa

Fonte: Acervo pessoal.

domínios para os meios filtrantes gerados considerando uma alocação aleatória das fibras são mostrados na Figura 5.12. Na Figura 5.13, os mesmos domínios são apresentados, porém agora considerando a alocação das fibras de acordo com o algoritmo de Mitchell (1991). Para que a condição de escorregamento pudesse ser utilizada corretamente, as fibras foram representadas com seção transversal octogonal, ao invés de seções circulares.

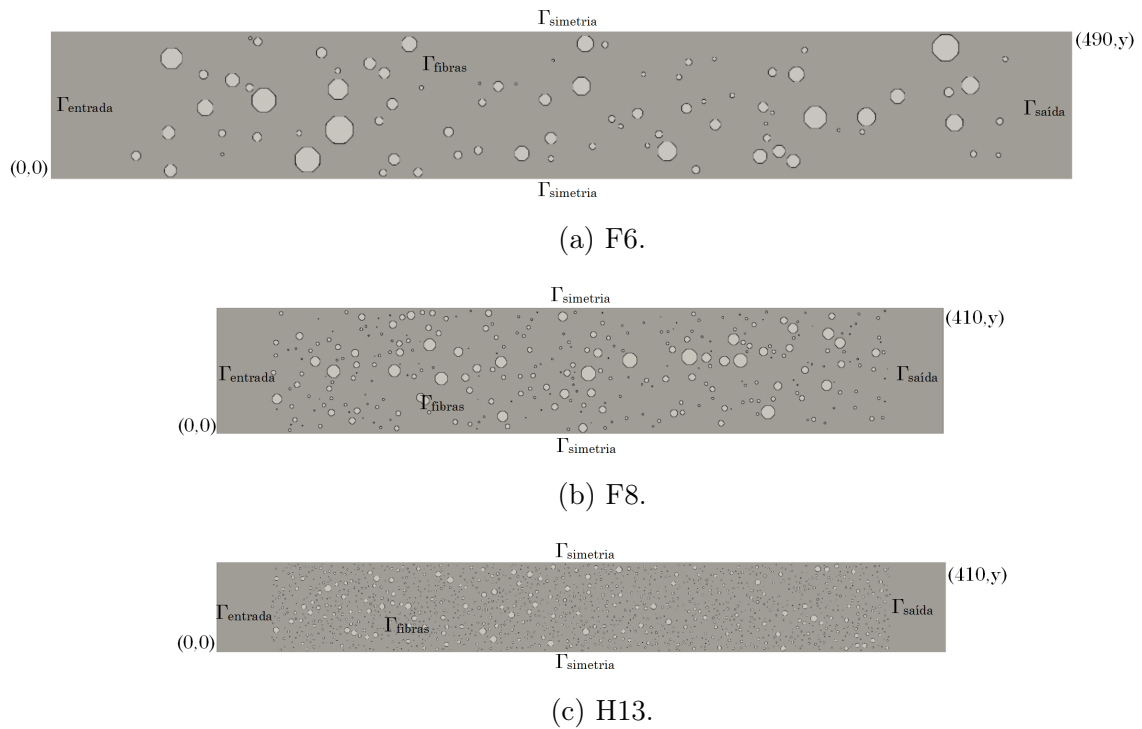
Figura 5.11 – Perfis de velocidade ao longo do domínio, para o octógono, com reflexão especular.

Legenda: (●) OpenLB e (○) ANSYS Fluent.



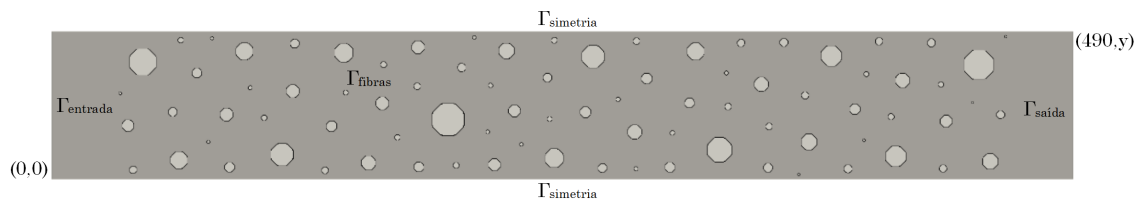
Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.12 – Domínios computacionais dos meios filtrantes gerados por alocação randômica das fibras.

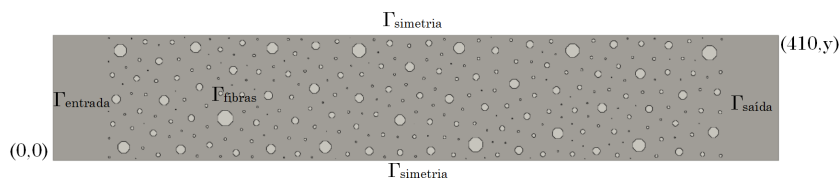


Fonte: Acervo pessoal.

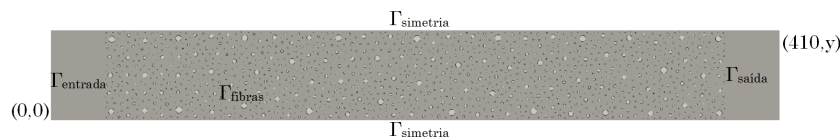
Figura 5.13 – Domínios computacionais dos meios filtrantes gerados por alocação de fibras segundo o algoritmo de Mitchell (1991).



(a) F6.



(b) F8.



(c) H13.

Fonte: Acervo pessoal.

caminho livre médio (λ) das moléculas do ar igual a 65 nm (TRONVILLE; ZHOU; RIVERS, 2013), a faixa do número de Knudsen é $4,1 \times 10^{-3}$ a $5,0 \times 10^{-1}$. Nesta faixa, o escoamento encontra-se em regime de escorregamento, e a condição de contorno apropriada deve ser utilizada (SOFONEA; SEKERKA, 2005; TRONVILLE; ZHOU; RIVERS, 2013). Além disso, de acordo com a teoria cinética dos gases, o método de lattice Boltzmann deve ser adaptado nesta escala de escoamento considerando a relação entre o tempo de relaxação τ e o número adimensional de Knudsen, como apresentado pela Equação 3.48, na Seção 3.4.

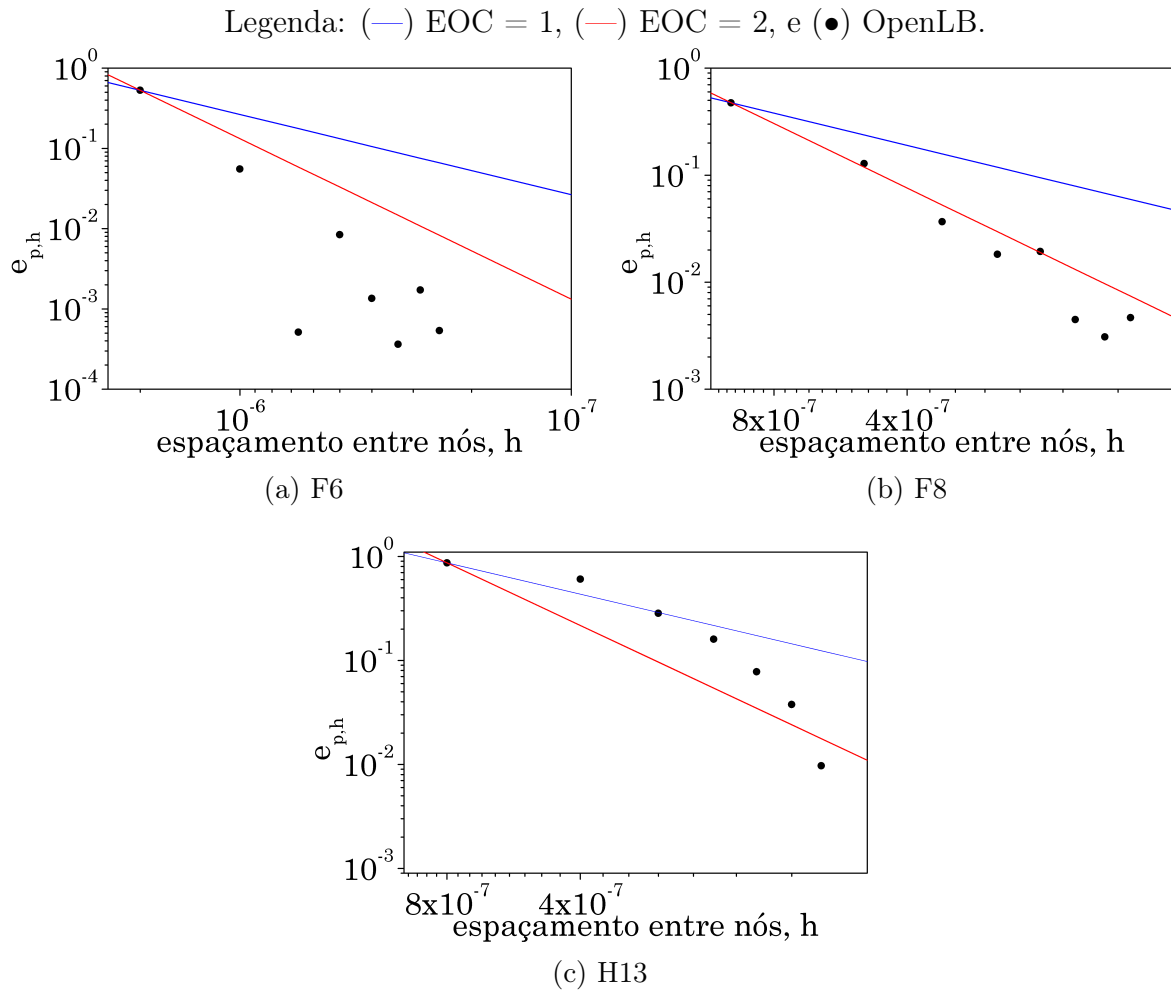
Foi considerado um escoamento gasoso ao longo dos meios filtrantes, a fim de se estimar a queda de pressão. A viscosidade do gás foi escolhida considerando que o escoamento ocorre a uma temperatura de 25°C, sendo o valor para a viscosidade cinemática $\nu = 1,56 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$. Na entrada dos meios filtrantes $\Gamma_{entrada}$, foi imposta uma velocidade uniforme de 0,0617 m/s, para F6 e F8, e de 0,0231 m/s, para H13, e na saída Γ_{saida} uma condição de pressão relativa igual a zero foi utilizada. A velocidade na entrada foi escolhida de acordo com os testes experimentais apresentados por Tronville e Rivers (2006), a fim de que fosse possível realizar a comparação entre os dados numéricos obtidos nesta tese e experimentais apresentados por Tronville e Rivers (2006). Nas fronteiras $\Gamma_{simetria}$, a reflexão especular foi utilizada para representar a condição de simetria, uma vez que o domínio representa apenas uma porção do filtro real, que possui uma dimensão na direção y muito maior que a sua espessura, representada pela dimensão na direção x .

Na superfície das fibras Γ_{fibras} , foram utilizadas as regras *bounce back* e reflexão especular, separadamente, para comparar as quedas de pressão nas situações de escorregamento e não-escorregamento.

Da mesma forma na Seção 5.1, foram realizados testes para verificar a influência do parâmetro de discretização h sobre a solução, gerando um conjunto de simulações f^h . O valor de h variou de $2,0 \times 10^{-6} m$ a $2,5 \times 10^{-7} m$, para o meio filtrante F6, de $1,0 \times 10^{-6} m$ a $1,25 \times 10^{-7} m$, para o filtro F8, e de $8,0 \times 10^{-7} m$ a $1,0 \times 10^{-7} m$, para H13. A queda de pressão ao longo do meio filtrante foi medida através da diferença entre as pressões após a entrada e antes da saída. Foram calculadas médias dos valores de pressão em linhas verticais localizadas a $20 \mu m$ de $\Gamma_{entrada}$ e de $\Gamma_{saída}$. Com os valores de queda de pressão, o erro relativo entre cada simulação e o resultado obtido pela melhor resolução $e_{p,h}$ foi calculado, através da Equação 5.4. Estimados os erros, foi possível calcular a ordem de convergência experimental, utilizando a Equação 5.6. O mesmo procedimento foi realizado para ambas as abordagens de alocação de fibras aleatória e segundo a lógica do melhor candidato. As Figuras 5.14 e 5.15 mostram a evolução do erro em função do espaçamento entre nós h , para ambas as condições de contorno, além dos gráficos teóricos de EOC iguais a 1 e 2, para a abordagem aleatória de alocação de fibras. Para os domínios gerados de acordo com o algoritmo de Mitchell (1991), os erros relativos são apresentados nas Figuras 5.16 e 5.17, para a condição de contorno de não-escorregamento e escorregamento, respectivamente. Analisando todos os gráficos, pode-se observar que a ordem de convergência é aproximadamente 2, ou mais, em todos os casos, em concordância com Krause (2010). Observa-se, ainda, que o erro tende a zero com o aumento da resolução do modelo geométrico. Para as simulações posteriores, foram utilizadas os modelos com menor espaçamento entre nós.

A espessura do meio filtrante é representada pela dimensão horizontal do domínio, sendo $430 \mu m$ para F6 e $350 \mu m$ para F8 e H13, acrescidos de $30 \mu m$ após $\Gamma_{entrada}$ e $30 \mu m$ antes da $\Gamma_{saída}$. A dimensão na vertical deve ser fornecida pelo usuário, ao executar o código apresentado na Seção 4.1. A escolha desta dimensão deve ser realizada de forma cautelosa, uma vez que caso esta dimensão seja muito pequena, o modelo pode não ser representativo do meio filtrante real, e um valor alto para esta distância pode acarretar em um alto custo computacional da simulação. Dessa forma, o ideal seria utilizar o menor valor possível para a dimensão y do modelo geométrico, de forma que este ainda represente de forma fiel o meio filtrante a ser simulado, sem gerar um aumento desnecessário do custo computacional. Assim, com o objetivo de avaliar a influência do tamanho do modelo representativo do meio filtrante, foram realizadas simulações com diferentes tamanhos em y , que variaram entre 10 e 70 μm , para os meios filtrantes F6 e F8, e entre 5 e 50 μm para o meio filtrante H13. Em todas as simulações, a queda de pressão foi estimada, pela diferença entre a pressão na entrada e na saída, da mesma forma que descrito anteriormente.

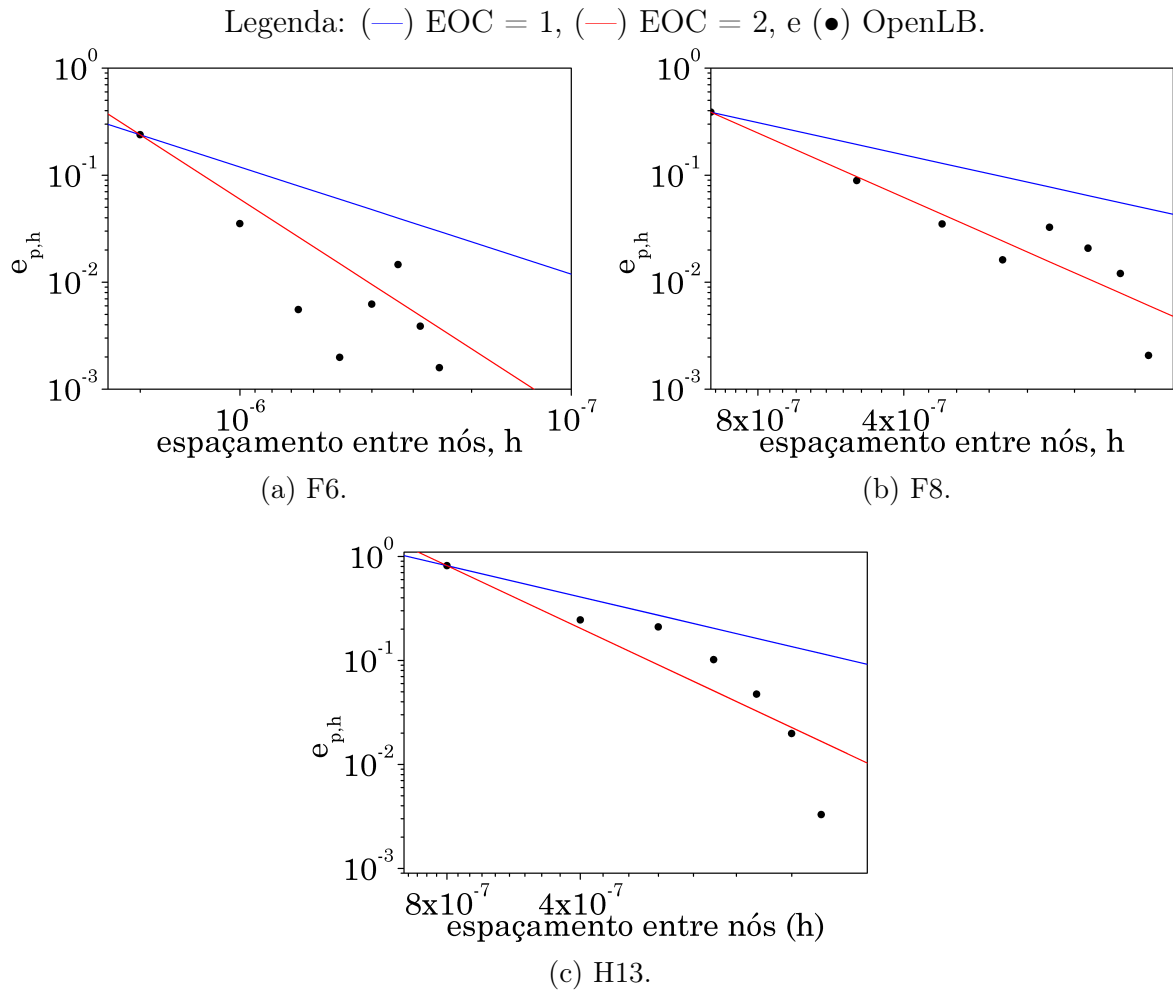
Figura 5.14 – EOC para meios filtrantes, com esquema *bounce back* e com coordenadas aleatórias.



Fonte: Acervo pessoal.

Para cada tamanho do meio filtrante, uma fração de sólido do modelo ϵ_{mod} foi calculada pelo código detalhado na Seção 4.1, e o número de fibras foi proporcional ao tamanho do meio filtrante. O cálculo da fração de sólidos depende da discretização do intervalo de diâmetros das fibras e também do tamanho do domínio computacional, uma vez que, dependendo do espaço disponível para distribuição das fibras, uma quantidade diferente será alocada. Como o número de fibras é um valor inteiro, a fração de sólidos calculada pelo modelo é ligeiramente diferente da fração de sólidos medida experimentalmente. Para cada dimensão, foram gerados dez diferentes meios filtrantes, com mesmo número de fibras e mesma fração de sólidos, porém com localizações diferentes para as fibras, e estes foram utilizados em simulações de acordo com as condições de escoamento apresentadas anteriormente. Por fim, a média de cada conjunto de dados de cada dimensão e o desvio padrão foram calculados. Os resultados de cada um dos dez testes de cada conjunto de simulações estão apresentados no Apêndice A. Um resumo das características do meio filtrante (número de fibras e fração de sólidos do modelo ϵ_{mod}) e os resultados da média

Figura 5.15 – EOC para meios filtrantes, com reflexão especular e com coordenadas aleatórias.



Fonte: Acervo pessoal.

da queda de pressão Δp e do respectivo desvio padrão são apresentados nas Tabelas 5.2 a 5.7, para ambas as abordagens aleatória e segundo o algoritmo de Mitchell (1991).

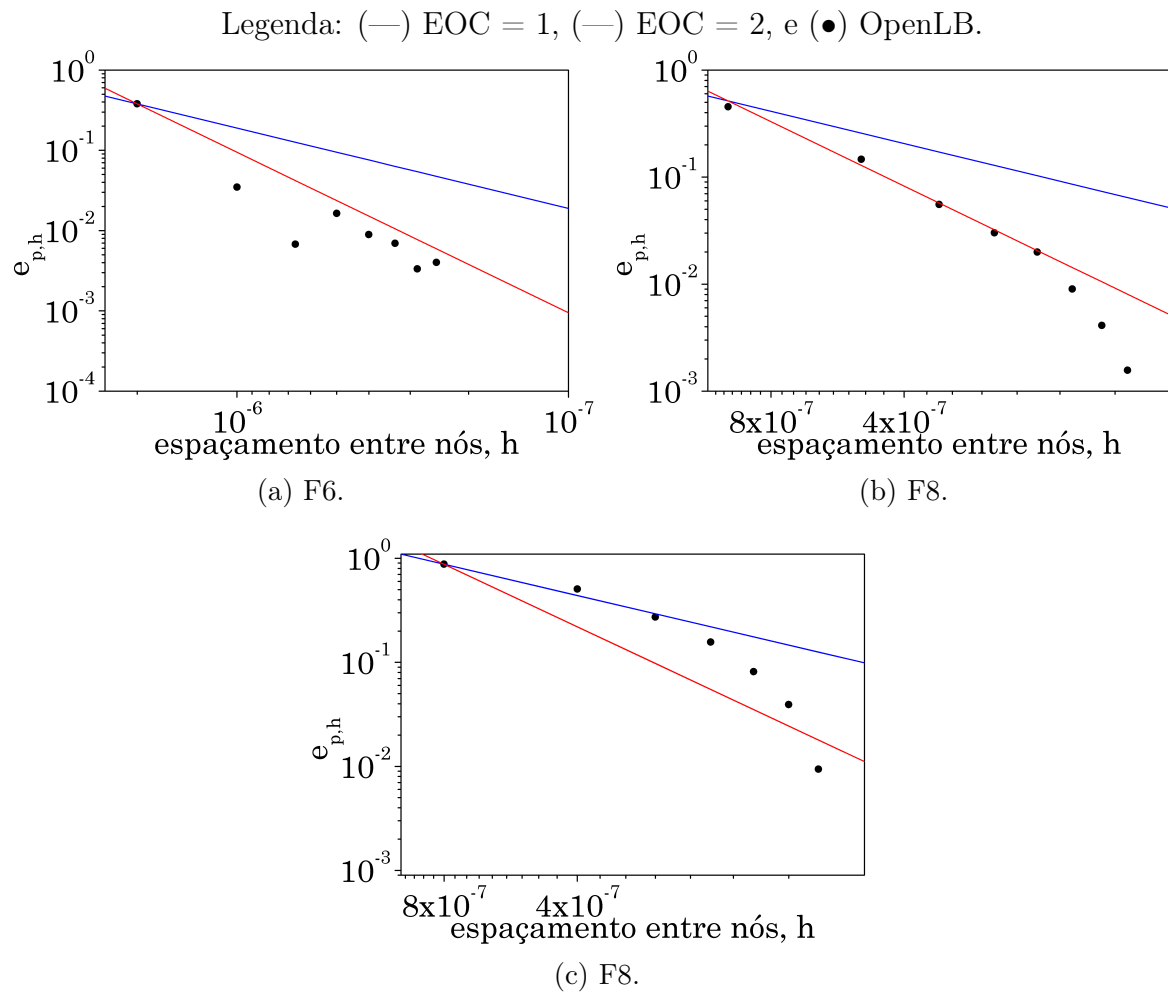
Tabela 5.2 – Meio filtrante F6, com alocação aleatória das fibras.

y (μm)	#Fibras	ϵ_{mod}	Média Δp (Pa)	
			<i>bounce back</i>	reflexão especular
10	11	0,0492	58,1 \pm 4,1	32,4 \pm 1,6
20	20	0,0571	19,2 \pm 3,5	13,7 \pm 1,7
30	35	0,0719	19,7 \pm 2,2	14,4 \pm 1,3
40	48	0,0748	19,9 \pm 1,9	14,6 \pm 1,1
50	57	0,0768	17,1 \pm 2,3	12,8 \pm 1,2
60	71	0,0747	16,9 \pm 1,4	12,6 \pm 0,8
70	83	0,0746	16,5 \pm 1,2	12,5 \pm 0,8

Fonte: Acervo pessoal.

Avaliando todas as tabelas, pode-se observar que a fração de sólidos tende a se aproximar do valor obtido experimentalmente através da análise de imagens (Tabela 5.1)

Figura 5.16 – EOC para meios filtrantes, com esquema *bounce back*, segundo algoritmo de Mitchell (1991).



Fonte: Acervo pessoal.

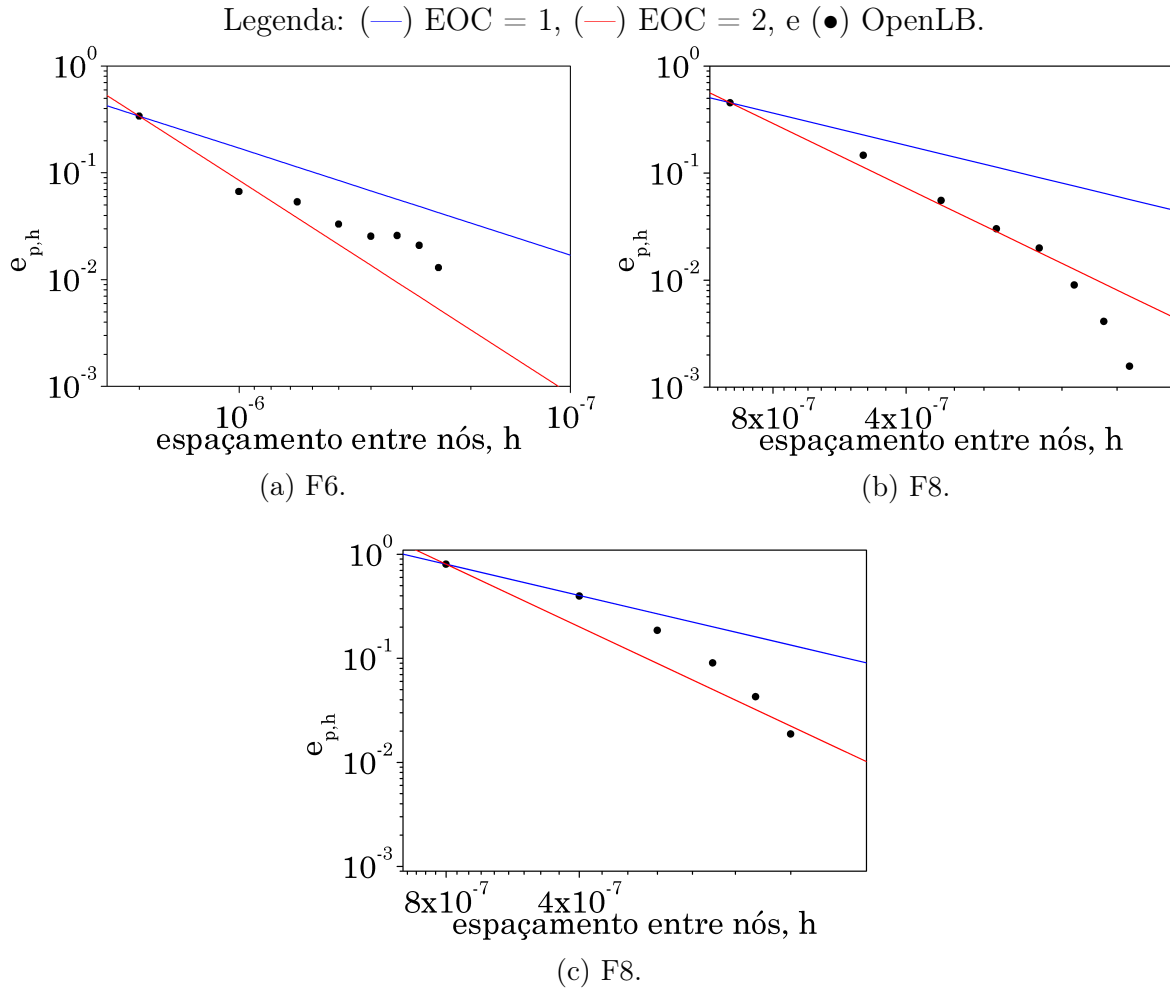
Tabela 5.3 – Meio filtrante F6, com alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).

y (μm)	#Fibras	ϵ_{mod}	Média Δp (Pa)	
			<i>bounce back</i>	reflexão especular
10	11	0,0492	$57,0 \pm 8,6$	$36,0 \pm 3,0$
20	20	0,0571	$17,7 \pm 0,3$	$13,9 \pm 0,2$
30	35	0,0719	$19,6 \pm 0,2$	$15,8 \pm 0,1$
40	48	0,0748	$21,4 \pm 0,2$	$17,0 \pm 0,2$
50	57	0,0768	$19,8 \pm 0,4$	$15,8 \pm 0,3$
60	71	0,0747	$19,4 \pm 0,4$	$15,5 \pm 0,2$
70	83	0,0746	$21,2 \pm 0,2$	$16,8 \pm 0,1$

Fonte: Acervo pessoal.

com o aumento do tamanho do domínio escolhido. O código construído para a alocação das fibras (Seção 4.1) varre todo o intervalo do diâmetro das fibras, e a discretização é realizada de forma a gerar o maior número possível de diâmetros diferentes. Vale lembrar que um intervalo de 30 valores discretos entre o valor mínimo e máximo dos diâmetros de

Figura 5.17 – EOC para meios filtrantes, com reflexão especular, segundo algoritmo de Mitchell (1991).



Fonte: Acervo pessoal.

Tabela 5.4 – Meio filtrante F8, com alocação aleatória das fibras.

y (μm)	#Fibras	ϵ_{mod}	Média Δp (Pa)	
			<i>bounce back</i>	reflexão especular
10	41	0,0631	$79,5 \pm 8,2$	$52,7 \pm 3,9$
20	89	0,0820	$68,4 \pm 6,6$	$46,8 \pm 3,0$
30	135	0,0866	$68,4 \pm 5,1$	$47,3 \pm 3,7$
40	177	0,0824	$64,0 \pm 4,2$	$44,8 \pm 2,2$
50	223	0,0823	$62,2 \pm 3,9$	$44,0 \pm 2,0$
60	264	0,0794	$58,2 \pm 2,8$	$41,8 \pm 1,6$
70	312	0,0817	$58,5 \pm 1,4$	$42,2 \pm 0,6$

Fonte: Acervo pessoal.

fibra foi previamente definido. Quando o domínio é muito pequeno, essas possibilidades são reduzidas e há uma dificuldade em varrer todos os valores discretos de diâmetros e ainda assim ponderar a fração de sólidos de acordo com o valor experimental. Em situações nas quais a dimensão y seja extremamente pequena, como os casos de $10 \mu\text{m}$

Tabela 5.5 – Meio filtrante F8, com alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).

y (μm)	#Fibras	ϵ_{mod}	Média Δp (Pa)	
			<i>bounce back</i>	reflexão especular
10	41	0,0631	72,4 \pm 0,1	52,7 \pm 1,0
20	89	0,0820	77,9 \pm 0,7	58,3 \pm 0,6
30	135	0,0866	76,6 \pm 0,8	57,2 \pm 0,5
40	177	0,0824	74,4 \pm 0,5	55,7 \pm 0,4
50	223	0,0823	73,5 \pm 0,3	55,2 \pm 0,3
60	264	0,0794	72,6 \pm 0,7	54,7 \pm 0,5
70	312	0,0817	73,6 \pm 0,3	55,3 \pm 0,2

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela 5.6 – Meio filtrante H13, com alocação aleatória das fibras.

y (μm)	#Fibras	ϵ_{mod}	Média Δp (Pa)	
			<i>bounce back</i>	reflexão especular
5	157	0,0963	208,7 \pm 6,0	127,5 \pm 2,5
10	307	0,0924	170,0 \pm 3,6	112,5 \pm 1,7
20	616	0,0926	167,4 \pm 3,3	111,0 \pm 1,7
30	922	0,0925	169,9 \pm 2,9	112,5 \pm 1,6
40	1234	0,0919	170,1 \pm 2,2	113,3 \pm 1,2
50	1541	0,0918	170,3 \pm 1,6	113,1 \pm 0,8

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela 5.7 – Meio filtrante H13, com alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).

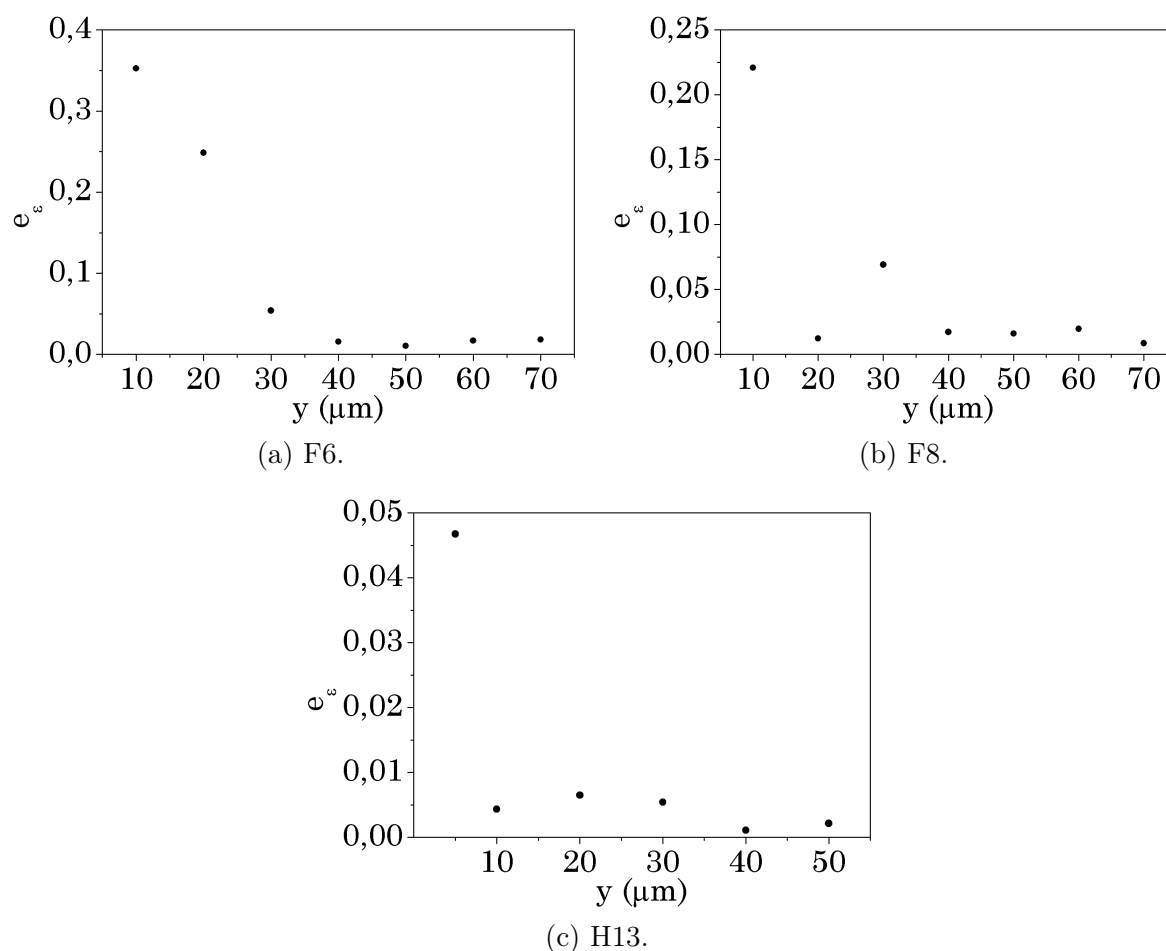
y (μm)	#Fibras	ϵ_{mod}	Média Δp (Pa)	
			<i>bounce back</i>	reflexão especular
5	157	0,0963	200,7 \pm 6,4	130,7 \pm 3,8
10	307	0,0924	186,1 \pm 1,0	123,9 \pm 0,5
20	616	0,0926	185,7 \pm 0,7	123,5 \pm 0,4
30	922	0,0925	187,2 \pm 0,5	124,0 \pm 0,5
40	1234	0,0919	187,9 \pm 0,4	124,7 \pm 0,5
50	1541	0,0918	187,5 \pm 0,6	124,5 \pm 0,4

Fonte: Acervo pessoal.

e 20 μm para o meio filtrante F6, a discretização do intervalo de forma a contemplar pelo menos uma fibra de cada tamanho torna-se impossível, uma vez que são geradas 11 e 20 fibras, respectivamente, e o intervalo pré-selecionado é igual 30. Esta dificuldade observada em situações cujo tamanho do domínio é reduzido faz com que a diferença entre as frações de sólidos do modelo e experimental seja significativa. Por outro lado, quando o domínio é suficientemente grande, é possível varrer todo o intervalo de diâmetros, de forma que haja fibras de todos os diâmetros discretos e, muitas vezes, várias fibras de mesmo tamanho. Quando isto ocorre, a fração de sólidos do modelo é mais próxima do valor obtido em laboratório, como ilustrado na Figura 5.18, na qual o erro relativo entre

as frações de sólido do modelo e experimental são mostrados em função do tamanho do domínio computacional, para todos os meios filtrantes. Observa-se que para os meios filtrantes F6 e F8, o erro relativo se torna praticamente constante a um valor baixo a partir de $40 \mu\text{m}$, enquanto que para H13, esta tendência pode ser observada a partir de $10 \mu\text{m}$. Pode ser inferido que isto se deve ao fato de o meio filtrante H13 possuir fibras de tamanhos menores e, conseqüentemente, alocar um maior número de fibras em um espaço menor. Já os meios filtrantes F6 e F8 possuem fibras maiores, e assim necessita de um espaço razoavelmente maior para que seja possível a alocação de um número considerável de fibras que corresponda a uma fração de sólidos próxima ao valor experimental.

Figura 5.18 – Erro relativo entre as frações de sólido em função da dimensão y .

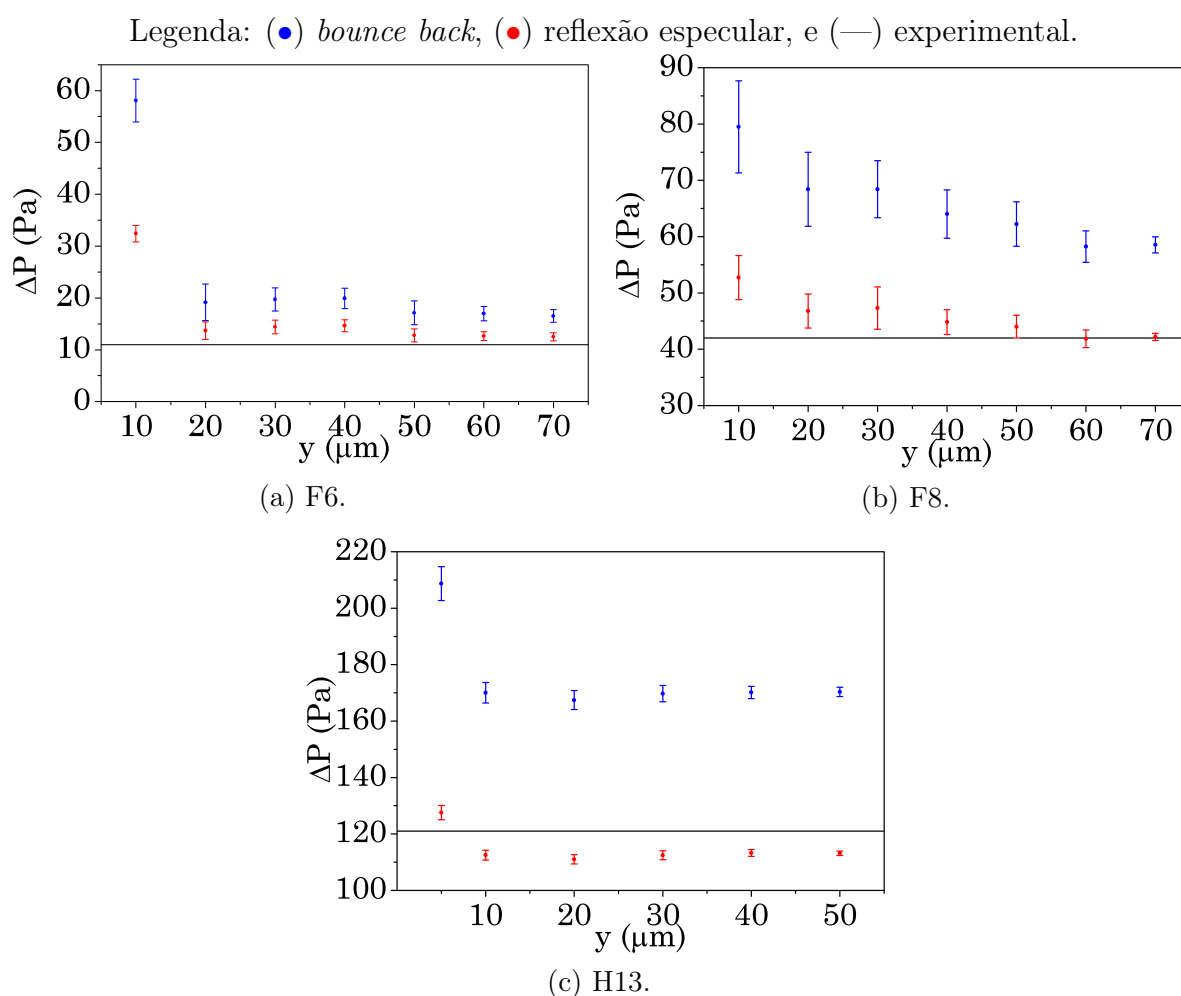


Fonte: Acervo Pessoal.

Ainda de acordo com as Tabelas 5.2 a 5.7, pode-se observar que quanto maior o valor selecionado para y , valores menores são obtidos para o desvio padrão em relação à média da queda de pressão, para cada conjunto de dez simulações. Este padrão foi observado tanto para a alocação aleatória das fibras quanto para a situação em que o algoritmo de Mitchell (1991) foi utilizado, e para as duas condições de contorno consideradas. Estes resultados estão apresentados na forma gráfica nas Figuras 5.19 e 5.20. A diminuição do desvio padrão ocorre devido ao fato de que, quanto maior a área do meio filtrante, maior

a quantidade de fibras alocadas e mais representativo será o meio filtrante. Assim, com uma maior quantidade de fibras, as alterações nas coordenadas das mesmas são menos sensíveis (já que há um grande número de fibras). Além disso, como o código aloca prioritariamente as fibras maiores, a aleatoriedade é ainda mais evidente, já que poucas fibras (e com os maiores diâmetros) são responsáveis por manter a fração de sólidos o mais próximo do experimental possível. Esta estratégia faz, então, com que meios filtrantes menos uniformes sejam gerados quando a área disponível é menor, influenciando na queda de pressão e implicando em maiores desvios padrões.

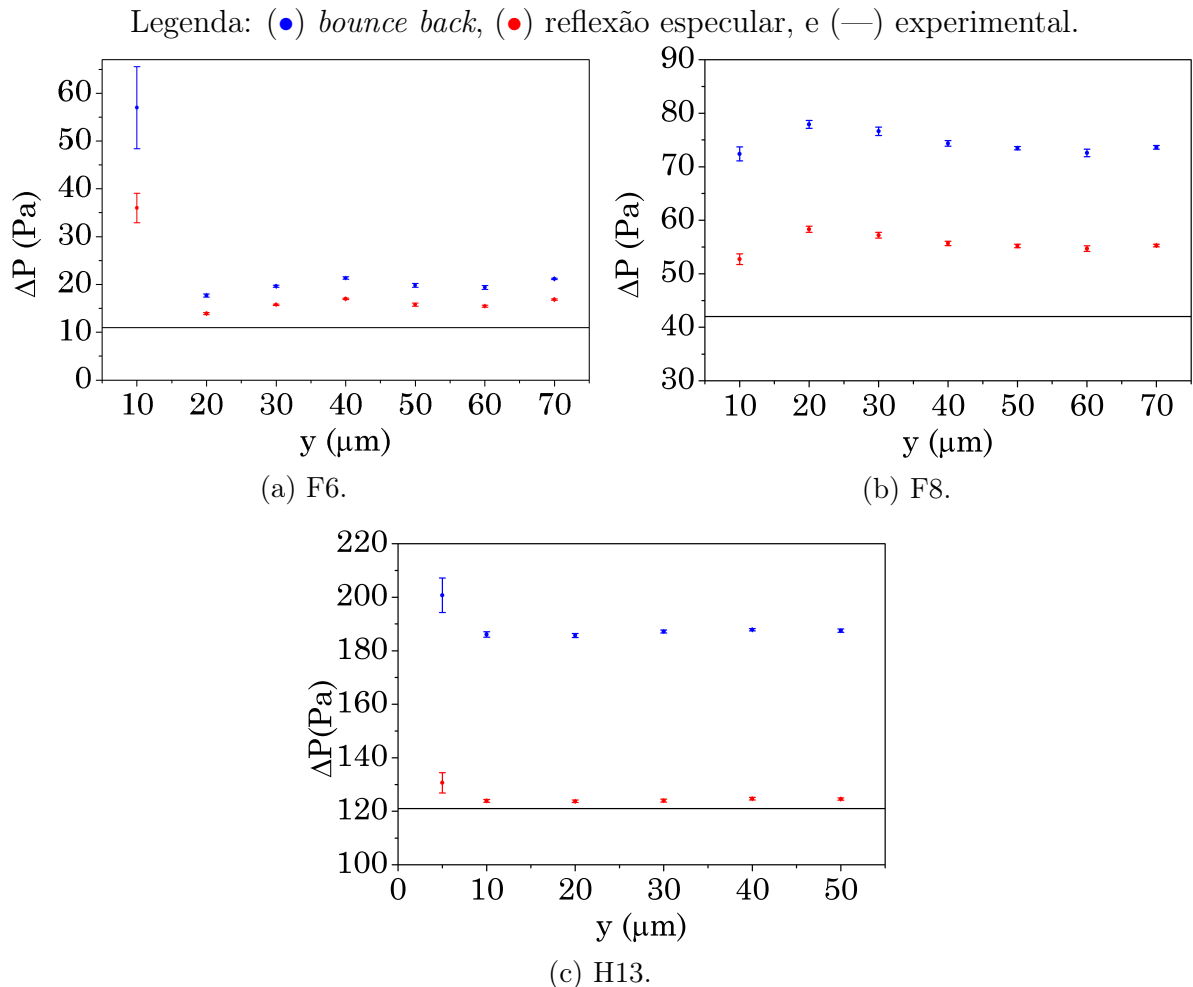
Figura 5.19 – Queda de pressão em função da dimensão y , para a alocação aleatórias das fibras.



Fonte: Acervo Pessoal.

Se compararmos agora os desvios padrões para cada abordagem de alocação de fibras separadamente, podemos observar que, para os três meios filtrantes, os desvios padrões observados para a abordagem com o algoritmo de Mitchell (1991) são expressivamente menores do que aqueles observados com a alocação aleatória. (Figuras 5.19 e 5.20). O motivo para esta tendência torna-se claro quando observamos a disposição das fibras nas Figuras 5.12 e 5.13: com a lógica do melhor candidato, gera-se meios filtrantes mais uniformes, com fibras melhores distribuídas. Logo, apesar de possuir um caráter aleatório

Figura 5.20 – Queda de pressão em função da dimensão y , para a alocação das fibras segundo algoritmo de Mitchell (1991).



Fonte: Acervo Pessoal.

na geração dos candidatos, a escolha para a “melhor” fibra faz com que os meios filtrantes sejam sempre bastante semelhantes entre si com relação à disposição das fibras. Dessa forma, a queda de pressão será, também, sempre semelhante para os mesmos tamanhos de meios filtrantes, devido ao aspecto uniforme conferido pelo algoritmo de melhor candidato.

Avaliando o valor para a queda de pressão, as Tabelas 5.2 a 5.7 e as Figuras 5.19 e 5.20 mostram que há uma tendência em estabilização. Ou seja, com o aumento do tamanho do domínio computacional (e, logo, uma melhor precisão da fração de sólidos), a queda de pressão tende para um mesmo valor. Para a abordagem aleatória da distribuição das fibras, observa-se que a partir de $20 \mu\text{m}$, a queda de pressão torna-se aproximadamente constante para o meio filtrante F6. Para F8, isto é observado apenas a partir de $60 \mu\text{m}$, enquanto que para o meio filtrante H13, um tamanho de $10 \mu\text{m}$ seria necessário para a estimativa da queda de pressão. Valores semelhantes podem ser observados quando a lógica do melhor candidato é utilizada. Entretanto, consegue-se um valor estável para o meio filtrante F8 a partir de $40 \mu\text{m}$.

Se as duas condições de contorno forem avaliadas separadamente, observa-se que

quando o fenômeno de escorregamento é considerado na superfície das fibras, a tendência é que a queda de pressão se estabilize em um valor mais próximo do experimental (Tabela 5.1), também indicado nos gráficos das Figuras 5.19 e 5.20. Quando o esquema *bounce back* é utilizado, apesar de apresentar um comportamento assintótico, a queda de pressão converge para um valor bastante distante daquele encontrado nos testes experimentais obtidos por Tronville e Rivers (2006). Isto evidencia a importância da consideração da condição de contorno correta quando trabalha-se com escoamento ao redor de elementos de dimensão reduzida, na faixa de escorregamento. Se compararmos as quedas de pressão obtidas pelas duas abordagens para alocação de fibras, podemos observar que quando uma distribuição randômica é utilizada, o valor da queda de pressão se aproxima mais do valor experimental (Tabela 5.1) do que quando o algoritmo de Mitchell (1991) é empregado, para os meios filtrantes F6 e F8. Para a condição de escorregamento, observa-se uma redução de 53% para 14% de erro da queda de pressão em relação ao valor experimental quando o algoritmo de alocação aleatória das fibras é empregado, para o meio filtrante F6. Para F8, e também a condição de escorregamento, há uma redução de 32% para 0,5% no erro da queda de pressão em relação ao valor experimental. Pode ser inferido, então, que durante a fabricação destes meios filtrantes, a deposição das fibras sobre o aparato ocorre, de fato, de forma randômica. Para o meio filtrante H13, observa-se que há uma concordância ligeiramente melhor entre a queda de pressão obtida com o algoritmo de Mitchell (1991) e os valores experimentais. A redução do erro foi de 6% para 3% na queda de pressão, em relação ao valor experimental, quando o algoritmo de melhor candidato é utilizado. Isto pode indicar que no caso deste meio filtrante, que é composto por fibras menores e também uma quantidade maior de fibras do que os demais, a distribuição deve ocorrer de forma mais uniforme durante a sua fabricação. Por outro lado, não se sabe qual a ordem do erro envolvido nos testes experimentais, de forma que caso este erro seja da ordem de 10%, torna-se delicado afirmar algo acerca deste meio filtrante e seu processo de fabricação, diferentemente dos meios filtrantes F6 e F8, cujos erros tiveram uma redução bastante significativa. Devido à esta aleatoriedade, podem se formar regiões com mais fibras (e também regiões com grandes espaços vazios) e, conseqüentemente, caminhos preferenciais para o escoamento do gás. Este fato tem influência direta sobre a queda de pressão. A formação destes caminhos preferenciais fica evidente quando avaliamos os contornos de velocidade para as duas abordagens de distribuição de fibras, apresentados nas Figuras 5.21 a 5.26. Se as imagens forem avaliadas de duas a duas, para cada meio filtrante, podemos observar claramente a formação de caminhos preferenciais e de regiões com maior concentração de fibras nos casos de alocação aleatória, em relação à lógica do melhor candidato. Para este último caso, a velocidade do gás ao longo do meio filtrante é praticamente uniforme. Os valores mais altos para a queda de pressão no caso de uma distribuição mais uniforme de fibras (algoritmo do melhor candidato) tem dois principais motivos. O

primeiro deles é que quando as fibras são mais espaçadas, o gás tem mais contato com as superfícies das fibras e, no caso da condição de não-escorregamento, há maior atrito na interface gás-sólido, o que acarreta em um aumento da queda de pressão. Quando as fibras ficam mais aglomeradas, há a formação de caminhos preferenciais, e o gás escoar por estas regiões, e não tanto nos pequenos espaços por entre as fibras aglomeradas. Assim, o atrito é menor e, conseqüentemente, a queda de pressão também será. O segundo motivo é que a aleatoriedade faz com que em alguns casos algumas fibras se organizem sequencialmente em linha reta, na horizontal, diminuindo o desvio que o fluido deve realizar e, conseqüentemente, há uma menor perda de energia. Além disso, com os caminhos preferenciais, o fluido tem por onde escoar, sem ter a necessidade de se desviar. No caso de fibras mais espaçadas entre si e sem a existência de caminhos preferenciais (algoritmo de Mitchell (1991)), o fluido não tem outra opção, a não ser contornar cada uma das fibras, causando uma maior perda de energia no sistema. Assim, devido à maior área de contato fluido-superfície e ao fato de o fluido ter que desviar de cada uma das fibras individualmente, a queda de pressão é maior quando o algoritmo de melhor candidato é utilizado para a alocação das fibras. Isso significa que ambos os arraste de atrito e de forma (discutidos adiante) são maiores quando se tem um meio filtrante mais uniforme, gerado pelo algoritmo de Mitchell (1991).

Em um escoamento ao redor de objetos submersos, a força exercida nas superfícies sólidas devido ao movimento do fluido F_k pode ser dividida em três outras componentes. São elas: F_n é a força atribuída às tensões normais às superfícies sólidas, F_s é a contribuição às tensões normais que existe mesmo quando o fluido se encontra em repouso, e F_t se refere às tensões cisalhantes que o fluido exerce sobre o objeto submerso tangencialmente (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2002). Em um escoamento viscoso, as forças tangenciais ocorrem devido ao atrito entre camadas de fluido e também do fluido com a superfície sólida, e no contato do fluido com a fronteira sólida pode ser interpretada como arraste de atrito. Esta parcela do arraste depende da orientação do corpo e da intensidade da tensão de cisalhamento na parede. Já as forças normais são provenientes de gradientes de pressão adversos, e resultam no arraste de forma, que é proporcional à área frontal do corpo imerso e depende da forma do objeto submetido ao escoamento (BIRD; STEWART; LIGHTFOOT, 2002; ÇENGEL; CIMBALA, 2007). Assim:

$$\begin{aligned} F_k &= (F_n - F_s) + F_t, \\ F_k &= F_{forma} + F_{atrito}. \end{aligned} \tag{5.8}$$

Uma relação entre o escorregamento e os arrastes de forma e de atrito pode ser estabelecida. Sabe-se que quando a condição de não-escorregamento é utilizada, há atrito entre a camada de fluido e a superfície sólida, de maneira que ambas as forças de arraste

de atrito e de forma são observadas. No caso da condição de contorno de escorregamento livre, não há atrito entre a camada de fluido e a superfície sólida (o que faz com que a componente tangencial da velocidade seja não-nula), e neste caso o arraste de atrito é ausente. Assim, nas simulações em que a condição de escorregamento foi aplicada nas fibras, atribui-se a perda de energia apenas ao arraste de forma. Já nas situações nas quais a condição de não-escorregamento foi aplicada na superfície das fibras, a perda de energia é uma soma das perdas de carga devido ao arraste de forma e por atrito. Considerando isto, uma relação pode ser estabelecida entre as quedas de pressão obtidas com ambas as condições de contorno. A queda de pressão resultante quando a condição de não-escorregamento foi utilizada indica a perda de energia por arraste de forma e atrito, enquanto que a queda de pressão obtida com a utilização da condição de escorregamento indicaria a perda de energia por arraste de forma:

$$\Delta P_{\text{não-escorregamento}} = \Delta P_{\text{atrito}} + \Delta P_{\text{forma}}, \quad (5.9)$$

$$\Delta P_{\text{escorregamento}} = \Delta P_{\text{forma}}. \quad (5.10)$$

Assim, através das Equações 5.9 e 5.10, é possível estimar a perda de energia por arraste por atrito e de forma, separadamente, para cada um dos meios filtrantes e para as duas abordagens para alocação das fibras. Os valores são mostrados nas Tabelas 5.8 e 5.9, estimados com base nas quedas de pressão com maior tamanho em y para o domínio computacional. Os dados confirmam o que foi discutido anteriormente sobre as duas abordagens de alocação de fibras. Mesmo que em proporções diferentes, tanto as perdas de energia por arraste por atrito e de forma aumentam quando as duas abordagens para alocação de fibras são comparadas, se observarmos os valores absolutos em pressão (Pa). Isso explica o fato de uma maior queda de pressão ter sido encontrada quando o algoritmo de melhor candidato é utilizado.

Tabela 5.8 – Perdas de energia, com coordenadas aleatórias.

Meio filtrante	ΔP_{atrito}	ΔP_{forma}
F6	4,0 Pa (24,2%)	12,5 Pa (75,8%)
F8	16,3 Pa (27,9%)	42,2 Pa (72,1%)
H13	57,2 Pa (33,6%)	113,1 Pa (66,4%)

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela 5.9 – Perdas de energia, segundo algoritmo de Mitchell (1991).

Meio filtrante	ΔP_{atrito}	ΔP_{forma}
F6	4,328 Pa (20,4%)	16,8 Pa (79,5%)
F8	18,349 Pa (24,9%)	55,3 Pa (75,1%)
H13	62,951 Pa (33,6%)	124,6 Pa (66,4%)

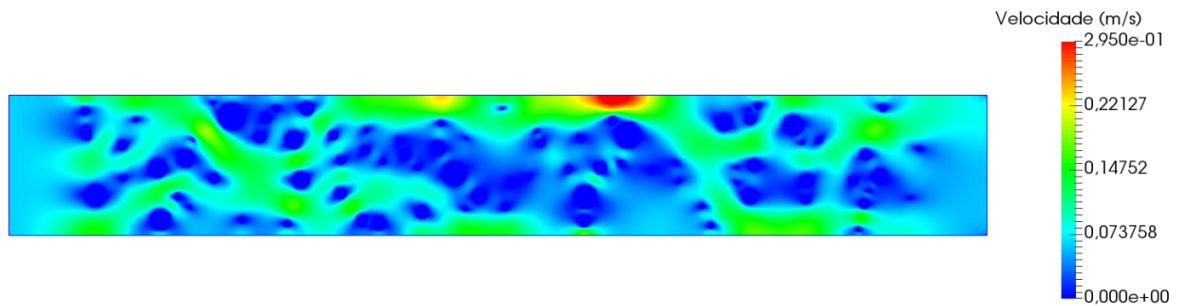
Fonte: Acervo pessoal.

Em ambas as abordagens para alocação das fibras, pode-se observar que o meio filtrante F6 possui uma maior proporção de perda de energia por arraste de forma do que os demais materiais (Tabelas 5.8 e 5.9). Este fato pode ser explicado com base na razão das áreas interna e superficial das fibras, sendo que a última representa a superfície onde ocorre o atrito entre o fluido e a fibra. A razão entre as áreas interna e superficial para o meio filtrante F6 é de 1,60, enquanto que para F8 e H13, os valores são de 0,79 e 0,32, respectivamente. Para o meio filtrante F6, observa-se que a área interna ocupada pelas fibras é maior que a superfície de contato fluido-fibra. Por outro lado, para o meio filtrante H13, a superfície de contato disponível é maior que a área interna ocupada pelas fibras. Assim, é coerente que a perda de energia por arraste de atrito seja maior do que por arraste de forma para o meio filtrante H13 (se compararmos os três meios filtrantes entre si), já que há mais superfície de contato (e, portanto, atrito) entre o fluido e as fibras. Da mesma forma, também não é surpreendente que o meio filtrante F6 sofra uma maior perda de energia por arraste de forma, já que sua área interna é maior, e o desvio que o fluido deve realizar para contornar as fibras também é mais evidenciado. Ainda de acordo com as Tabelas 5.8 e 5.9, para os meios filtrantes F6 e F8, um aumento na proporção entre os arraste de forma e por atrito foi observado quando se utiliza o algoritmo de melhor candidato para a distribuição das fibras. A razão para esta tendência se baseia no fato de que, com as fibras mais espaçadas, o fluido deve contornar cada uma das fibras, ao passo que a aleatoriedade pode fazer com que as fibras se organizem de forma sequencial e ainda ocasionar caminhos preferenciais, como foi discutido anteriormente. A proporção para o meio filtrante H13 sofre pouca alteração quando os dois algoritmos são empregados. O grande número de fibras (devido ao tamanho reduzido das mesmas e da fração de sólidos elevada, em relação aos demais meios filtrantes) pode explicar a manutenção da proporção: mesmo com a aleatoriedade das fibras, o meio filtrante tende a ser mais uniforme.

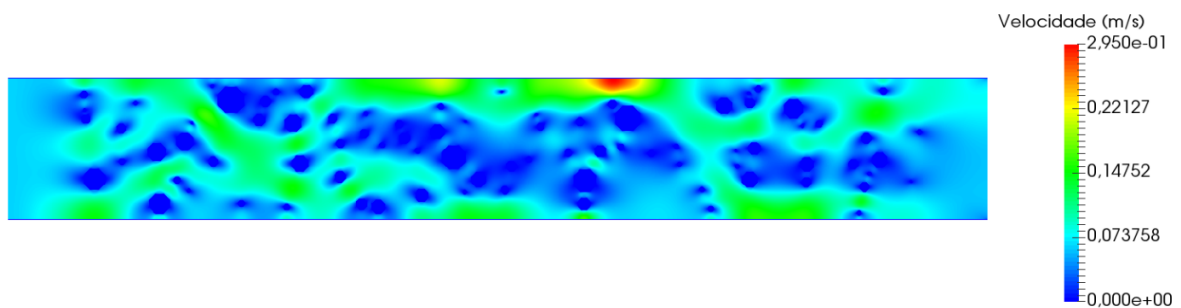
Comparando as duas condições de contorno empregadas, observa-se uma grande semelhança entre os perfis de velocidade, se diferenciando apenas pela magnitude da velocidade (Figuras 5.21 a 5.26). Os contornos de pressão são ilustrados nas Figuras 5.27 a 5.32. Novamente, os perfis são praticamente idênticos, apenas convergindo para valores de pressão diferentes (assim como foi observado anteriormente para as quedas de pressão). Estas tendências são esperadas uma vez que comparamos geometrias idênticas e configurações de simulações iguais, diferindo-se apenas pela condição de contorno na superfície das fibras.

O que pode-se concluir nesta seção é que os resultados confirmam a aleatoriedade da distribuição das fibras dos meios filtrantes estudados e que a formação de caminhos preferenciais por entre as fibras ocorre durante o escoamento do gás nesses filtros. Além disso, os resultados apresentados evidenciam a necessidade de se considerar a condição de contorno de escorregamento quando geometrias da ordem de poucos micrômetros são utilizadas.

Figura 5.21 – Contornos de velocidade para o meio filtrante F6, com coordenadas aleatórias.



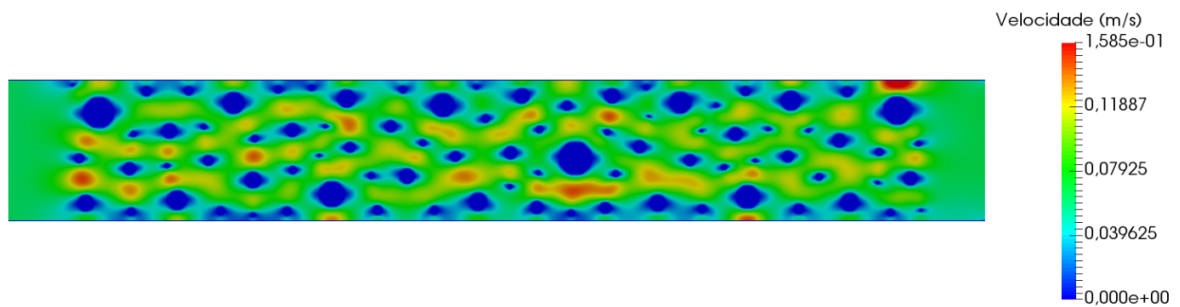
(a) Com esquema *bounce back*.



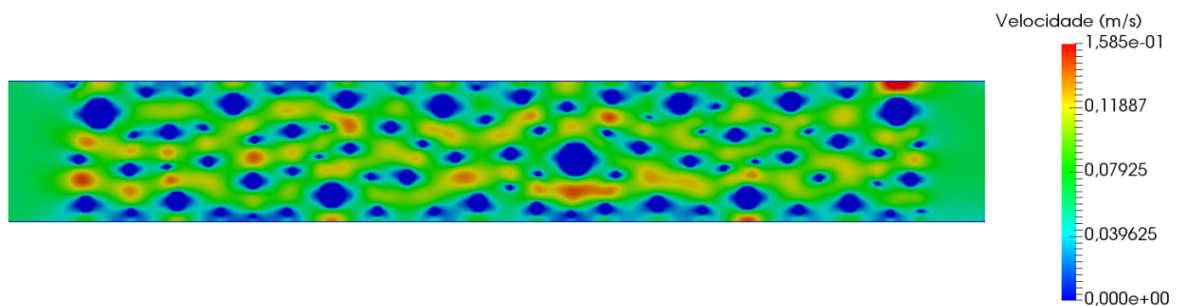
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.22 – Contornos de velocidade para o meio filtrante F6, segundo algoritmo de Mitchell (1991).



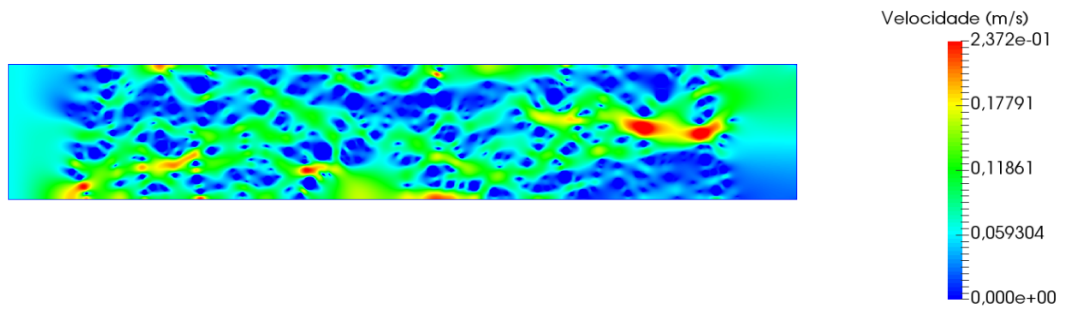
(a) Com esquema *bounce back*.



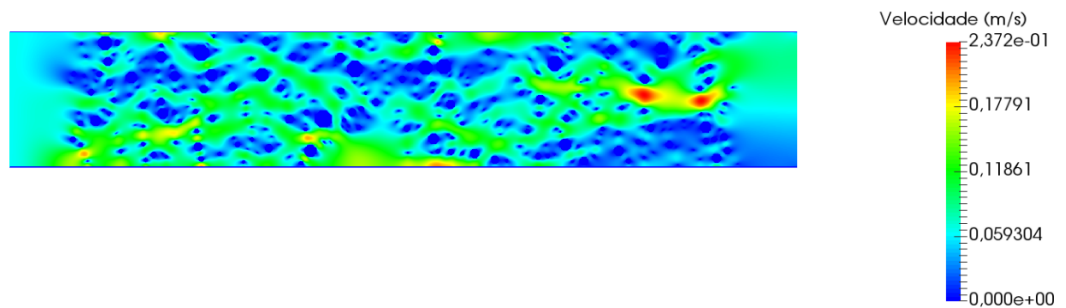
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.23 – Contornos de velocidade para o meio filtrante F8, com coordenadas aleatórias.



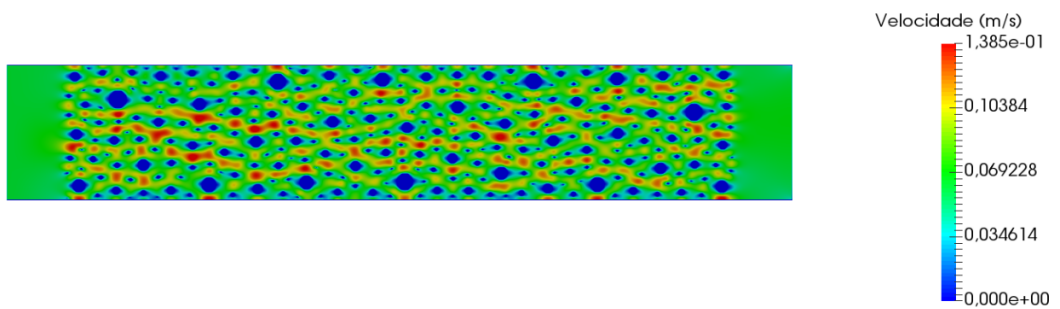
(a) Com esquema *bounce back*.



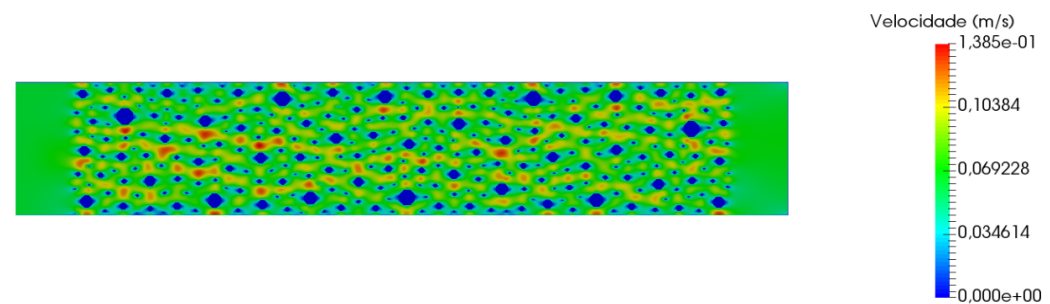
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.24 – Contornos de velocidade para o meio filtrante F8, segundo algoritmo de Mitchell (1991).



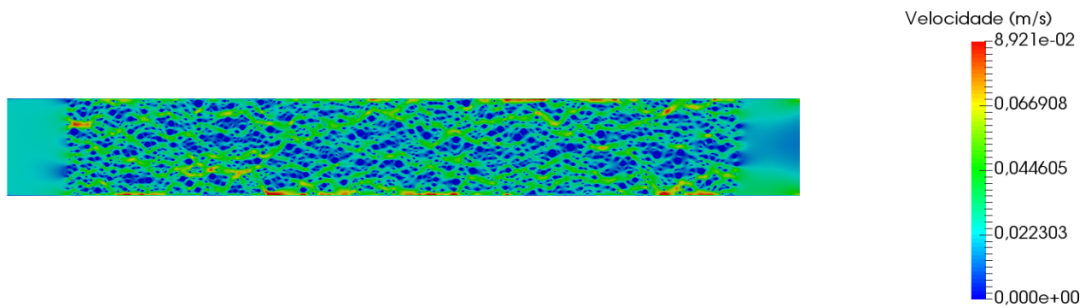
(a) Com esquema *bounce back*.



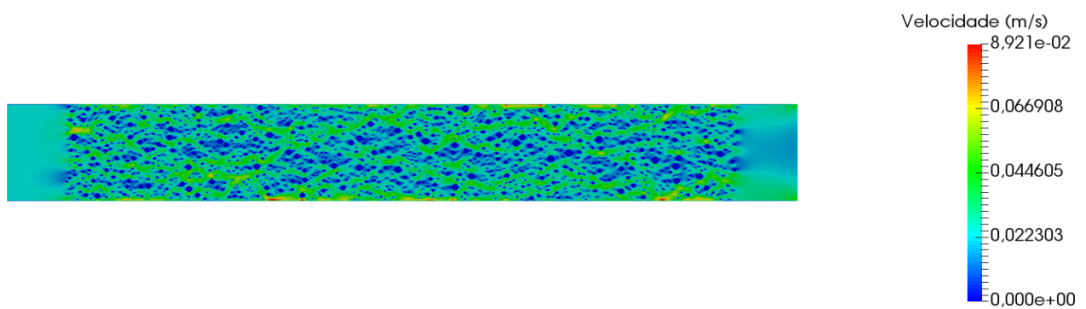
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.25 – Contornos de velocidade para o meio filtrante H13, com coordenadas aleatórias.



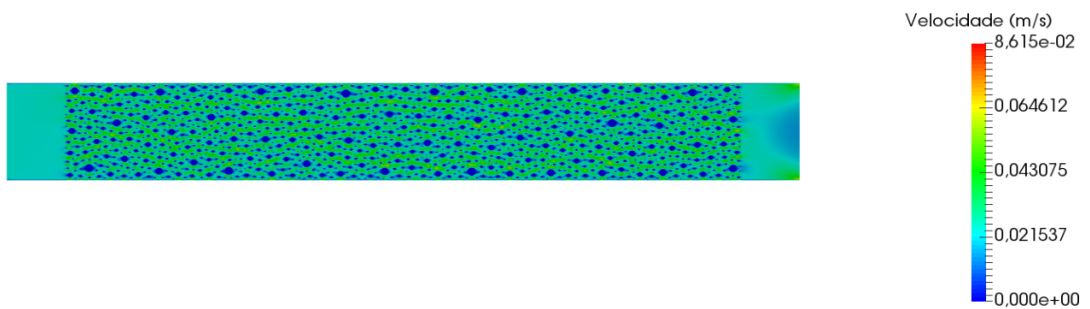
(a) Com esquema *bounce back*.



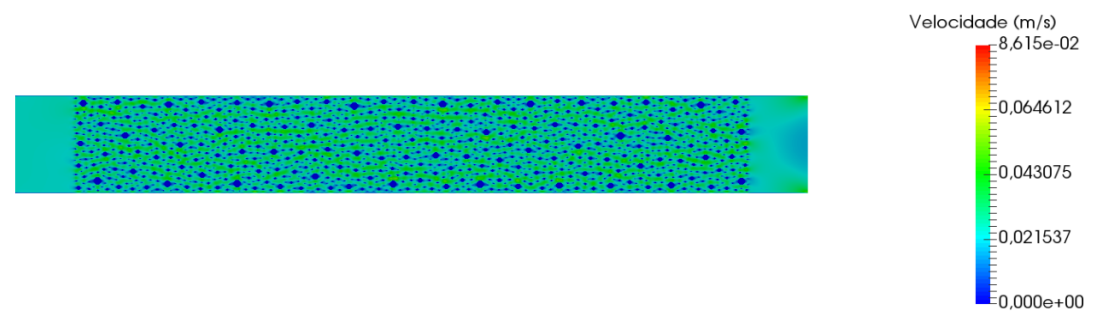
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.26 – Contornos de velocidade para o meio filtrante H13, segundo algoritmo de Mitchell (1991).



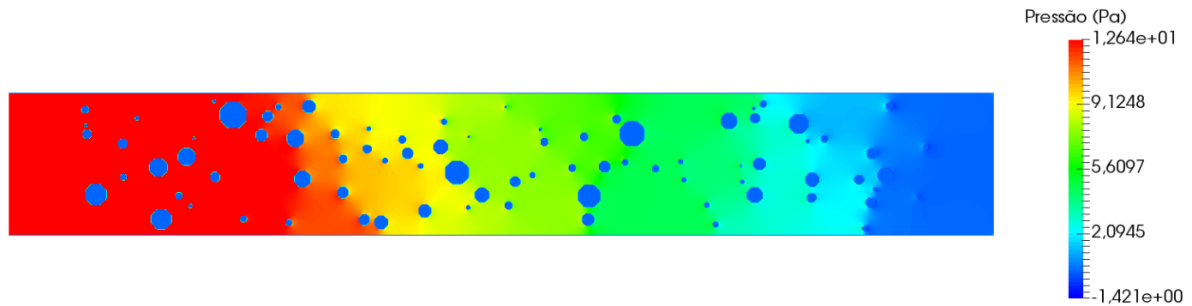
(a) Com esquema *bounce back*.



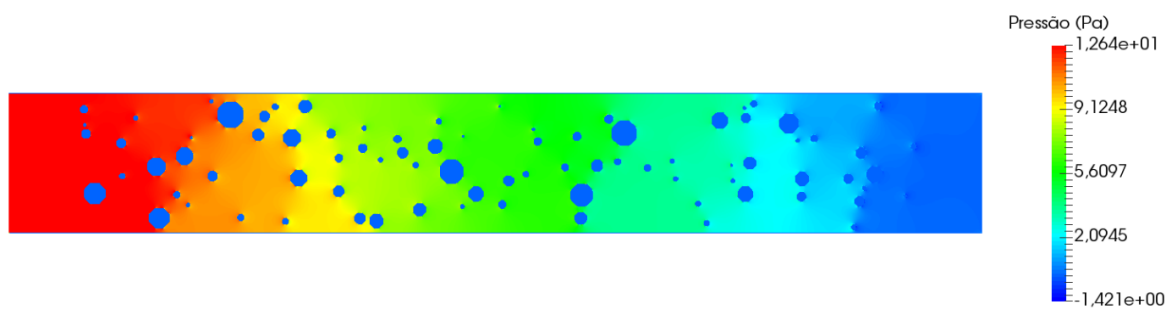
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.27 – Contornos de pressão para o meio filtrante F6, com coordenadas aleatórias.



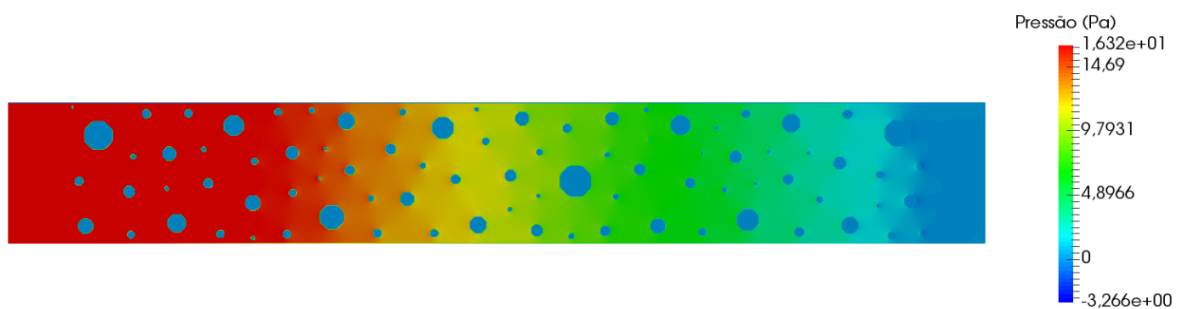
(a) Com esquema *bounce back*.



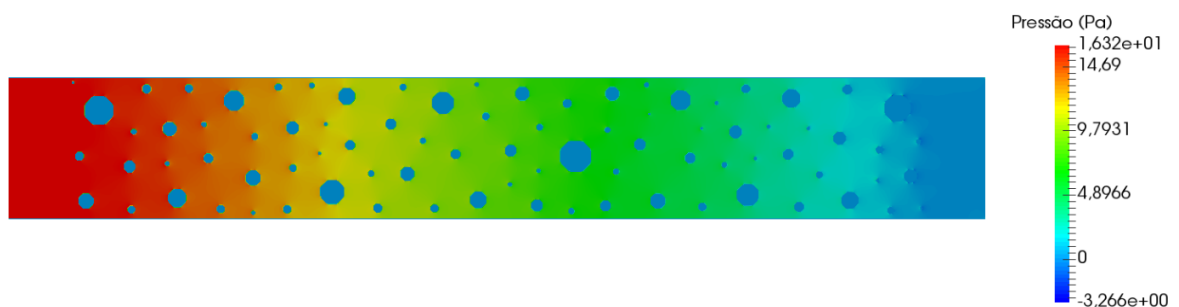
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.28 – Contornos de pressão para o meio filtrante F6, segundo algoritmo de Mitchell (1991).



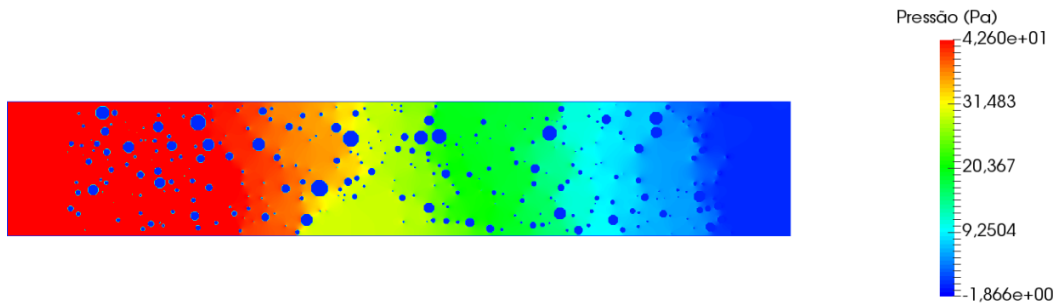
(a) Com esquema *bounce back*.



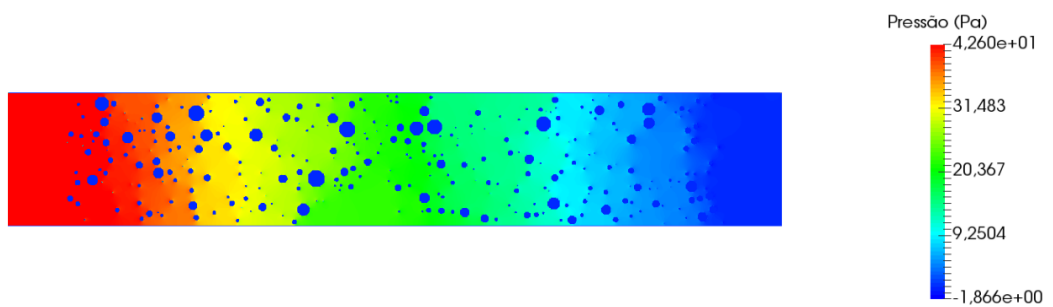
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.29 – Contornos de pressão para o meio filtrante F8, com coordenadas aleatórias.



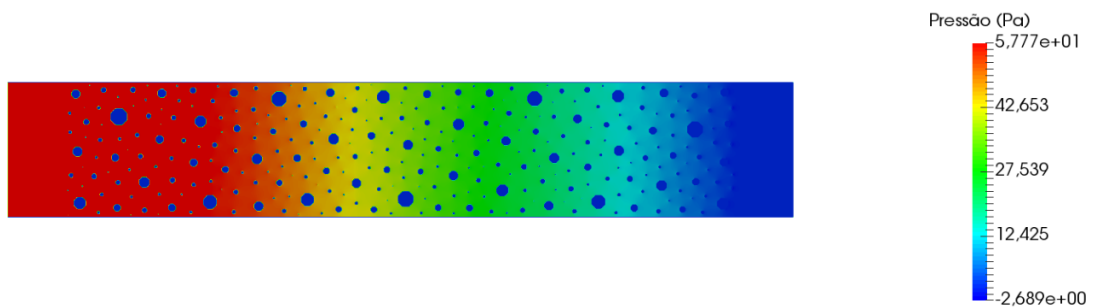
(a) Com esquema *bounce back*.



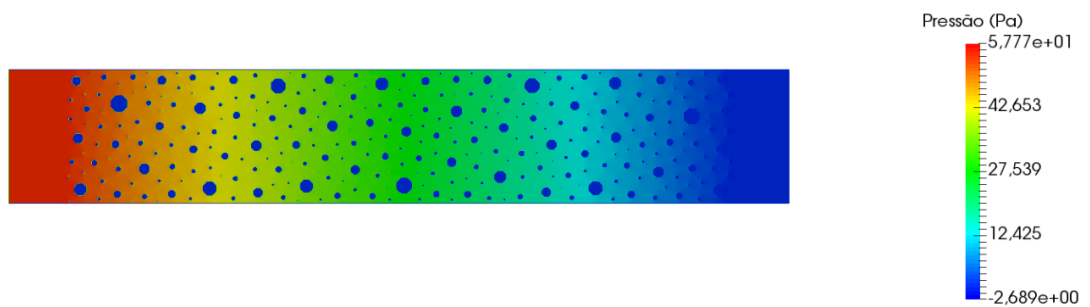
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.30 – Contornos de pressão para o meio filtrante F8, segundo algoritmo de Mitchell (1991).



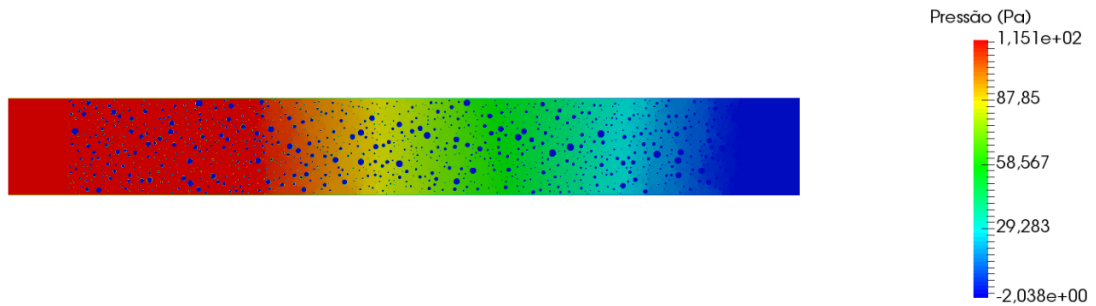
(a) Com esquema *bounce back*.



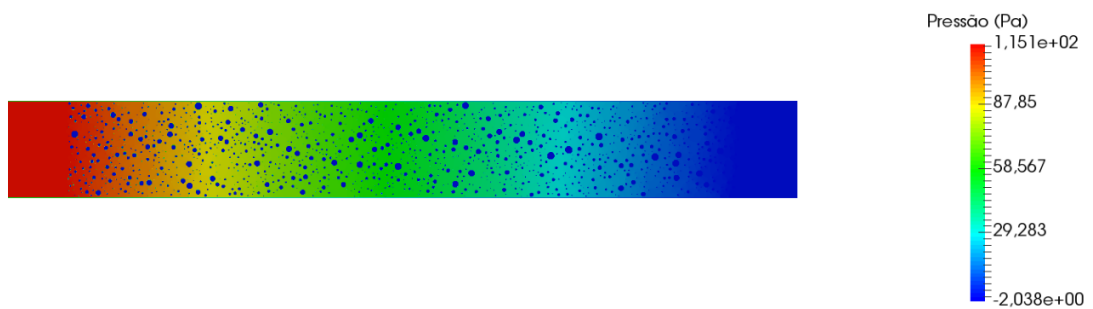
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.31 – Contornos de pressão para o meio filtrante H13, com coordenadas aleatórias.



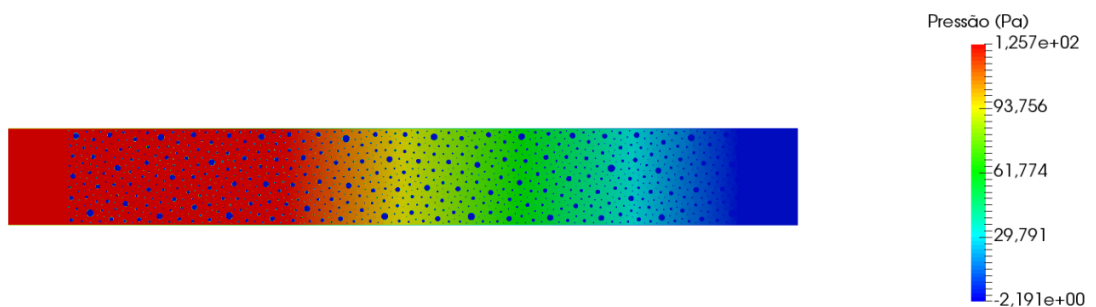
(a) Com esquema *bounce back*.



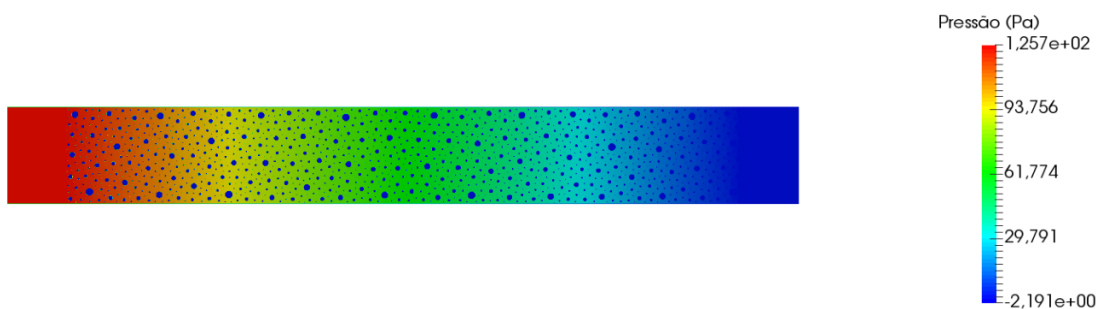
(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Figura 5.32 – Contornos de pressão para o meio filtrante H13, com algoritmo de Mitchell (1991).



(a) Com esquema *bounce back*.



(b) Com reflexão especular.

Fonte: Acervo pessoal.

Conclusões

Nesta tese, um código para a geração de um domínio computacional que fosse capaz de representar um meio filtrante foi desenvolvido. A análise estatística dos dados obtidos pela análise de imagens de microscopia de meios filtrantes reais revelou que a faixa de diâmetros segue uma distribuição log-normal. Salussoglia (2016) também analisou estatisticamente a distribuição de diâmetros obtidos por análise de imagens e também encontrou uma distribuição log-normal para a faixa de diâmetros. Esta informação foi utilizada para discretizar o intervalo de diâmetros e alocar as fibras. Para tal, duas abordagens foram testadas: uma alocação aleatória e outra que possui certas restrições. Os resultados das simulações mostraram que o código é eficaz na geração de modelos fiéis à representação de meios filtrantes reais.

As simulações do escoamento gasoso através do meio filtrante foi realizado no código aberto OpenLB, no qual foi implementada uma condição de reflexão especular das funções de distribuição, a fim de se recuperar o efeito de escorregamento nas superfícies das fibras. A comparação entre as quedas de pressão obtidas utilizando ambas as condições de escorregamento e não-escorregamento e dados experimentais mostraram melhor concordância quando a reflexão especular foi empregada. Assim, pode-se concluir que em casos de escoamento no regime de escorregamento, como é o caso dos meios filtrantes com fibras de poucos micrômetros de diâmetro, a condição de contorno correta deve ser aplicada.

A análise do tamanho do modelo geométrico revelou que há uma tendência na estabilização da queda de pressão com o aumento do domínio, uma vez que a fração de sólidos é estimada de forma mais precisa. Esta estabilização é atingida mais rapidamente quando se utiliza o algoritmo de melhor candidato para alocação de fibras. Mas, por outro lado, esta abordagem leva a uma queda de pressão mais distante do valor obtido experimentalmente.

Por fim, conclui-se que o código para alocação de fibras, a abordagem mesoscópica do método de lattice Boltzmann e a condição de contorno de deslizamento são indicadas para a modelagem de escoamentos em meios filtrantes, com números de Knudsen consideráveis.

Sugestões para trabalhos futuros

Como próximas etapas da tese, propõe-se:

- simulação de outros meios filtrantes, também utilizados na filtração de profundidade e em sistemas de ventilação e salas limpas;
- simulação de um meio filtrante composto por uma camada de nanofibras e uma camada de microfibras, cujos dados foram obtidos experimentalmente por Salussoglia (2016) através de diferentes análises de imagens (manual e automática) obtidas por dois tipos de microscopia;
- generalização da análise da influência da dimensão y , de forma a propor uma correlação geral que forneça o menor tamanho sugerido que represente de forma fidedigna o meio filtrante em questão;
- implementação da condição de contorno de escorregamento parcial no código OpenLB, segundo a Equação 3.37, e respectivos testes de verificação e aplicação em meios filtrantes;
- estimativa da eficiência de coleta dos meios filtrantes em questão, através da simulação da trajetória de partículas por entre o emaranhado de fibras.

Referências

- ABE, T. Derivation of the lattice Boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the lattice Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, v. 131, p. 241–246, 1997.
- ABNT NBR 16101:2012. *Associação Brasileira de Normas Técnicas: Filtros para partículas em suspensão no ar - Determinação da eficiência para filtros grossos, médios e finos*. Rio de Janeiro: ABNT, 2012. 61 p.
- ARKILIC, E. B.; BREUER, K. S.; SCHMIDT, M. A. Mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels. *Journal of FLuid Mechanics*, v. 437, n. 1, p. 29–43, 2001.
- BARBER, R. W.; EMERSON, D. R. Challenges in modeling gas-phase flow in microchannels: from slip to transition. *Heat Transfer Engineering*, v. 27, n. 4, p. 3–12, 2006.
- BERGMAN, W.; COREY, I. Filtration theory using computer simulations. *24th DOE/NRC Nuclear Air Cleaning and Treatment Conference*, p. 485–499, 1999.
- BHARDWAJ, N.; KUNDU, S. C. Electrospinning: A fascinating fiber fabrication technique. *Biotechnology Advances*, v. 28, n. 3, p. 325–347, 2010.
- BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, v. 94, n. 3, p. 511–525, 1954.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. *Transport Phenomena*. Segunda edição. New York: John Wiley & Sons, 2002. 914 p.
- BLANCHARD, D.; LIGRANI, P. Slip and accommodation coefficients from rarefaction and roughness in rotating microscale disk flows. *Physics of Fluids*, v. 19, n. 6, p. 063602, 2007.
- BORTOLASSI, A. C. C. *Caracterização e eficiência de diferentes meios filtrantes fibrosos na remoção de nanopartículas*. 113 p. Dissertação de Mestrado — Universidade Federal de São Carlos, São Carlos (SP), 2015.
- BORTOLASSI, A. C. C. et al. Procuring the fiber size distribution of nanofiber filter media. *CHISA 2014, Prague, Czech Republic, 23-27 August, 2014*.

- BOSTOCK, M. *Visualizing Algorithms*. 2014. Disponível em: <<https://bost.ocks.org/mike/algorithms/>>.
- BOUZIDI, M.; FIRDAOUSS, M.; LALLEMAND, P. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Physics of Fluids*, v. 13, n. 11, p. 3452–3459, 2001.
- BROWN, R. C. A many-fibre model of airflow through a fibrous filter. *Journal of Aerosol Science*, v. 15, n. 5, p. 583–593, 1984.
- BROWN, R. C. *Air filtration: an integrated approach to the theory and applications of fibrous filters*. Primeira edição. Sheffield: Pergamon Press, 1993. 272 p.
- CAI, R.-R.; ZHANG, L.-Z. Modeling of dynamic deposition and filtration processes of airborne particles by a single fiber with a coupled lattice Boltzmann and discrete element method. *Building and Environment*, v. 106, p. 274–285, 2016.
- CARMAN, P. C. Fluid flow through granular beds. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, v. 15, p. 150–166, 1937.
- CHAPMAN, S.; COWLING, T. G. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Terceira edição. Cambridge: Cambridge University Press, 1970. 448 p.
- CHEN, D.-R. et al. Design and evaluation of a nanometer aerosol differential mobility analyzer (nano-DMA). *Journal of Aerosol Science*, v. 29, n. 5-6, p. 497–509, 1998.
- CHEN, S.; TIAN, Z. Simulation of microchannel flow using the lattice Boltzmann method. *Physica A*, v. 388, n. 23, p. 4803–4810, 2009.
- CHEN, S.; TIAN, Z. Simulation of thermal micro-flow using lattice Boltzmann method with Langmuir slip model. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, v. 31, n. 2, p. 227–235, 2010.
- COLIN, S. Rarefaction and compressibility effects on steady and transient gas flows in microchannels. *Microfluidics Nanofluidics*, v. 1, n. 3, p. 268–279, 2005.
- CORNUBERT, R.; D'HUMIÈRES, D.; LEVERMORE, D. A Knudsen layer theory for lattice gases. *Physica D*, v. 47, n. 1-2, p. 241–259, 1991.
- Decreto Estadual 59113. São Paulo: Assembleia Legislativa do Estado de São Paulo, 2013. 3 p. Disponível em: <<http://www.al.sp.gov.br/norma>>. Acesso em: Janeiro de 2017.
- DELLAR, P. J. An interpretation and derivation of the lattice Boltzmann method using Strang splitting. *Computers & Mathematics with Applications*, v. 65, n. 2, p. 129–141, 2013.
- D'HUMIÈRES, D. et al. Multiple-relaxation-time lattice-Boltzmann models in three dimensions. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, v. 360, p. 437–451, 2002.
- DONGARI, N.; AGRAWAL, A.; AGRAWAL, A. Analytical solution of gaseous slip flow in long microchannels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 50, n. 17-18, p. 3411–3421, 2007.

- DU, R.; SHI, B.; CHEN, X. Multiple-relaxation-time lattice-Boltzmann model for incompressible flow. *Physical Letters A*, v. 359, p. 564–672, 2006.
- ÇENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. *Mecânica dos Fluidos: Fundamentos e Aplicações*. Primeira edição. Estados Unidos: McGraw-Hill, 2007. 816 p.
- ERGUN, S.; ORNING, A. A. Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds. *Industrial and Engineering Chemistry*, v. 41, n. 6, p. 1179–1184, 1952.
- EWART, T. et al. Tangential momentum accommodation in microtube. *Microfluidics and Nanofluidics*, v. 3, n. 6, p. 689–695, 2007.
- FARDI, B.; LIU, B. Y. H. Flow field and pressure drop of filters with rectangular fibers. *Aerosol Science and Technology*, v. 17, n. 1, p. 36–44, 1992.
- FEUCHTER, C. et al. Flow simulations of air filter media containing nanofibers. *Proceedings of FILTECH 2013 Conference*, p. 1–16, 2013.
- FILIPPOVA, O.; HAENEL, D. Numerical simulation of particle deposition in filters. *Journal of Aerosol Science*, v. 27, n. 1, p. S627–S628, 1996.
- FORCHHEIMER, P. Wasserbewegung durch Boden. *Zeitschrift des Vereins deutscher Ingenieure*, v. 45, p. 1782–1788, 1901.
- GAD-EL-HAK, M. The fluid mechanics of microdevices - The Freeman scholar lecture. *Journal of Fluids Engineering*, v. 121, n. 1, p. 5–33, 1999.
- GAD-EL-HAK, M. Comments on “critical view on new results in micro-fluid mechanics”. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 46, n. 20, p. 3941–3945, 2003.
- GRAHAM, K. et al. Polymeric nanofiber in air filtration applications. *Fifteenth Annual Technical Conference & Expo of the American Filtration & Separation Society*, Galveston, Texas, April 2002.
- GRAUR, I. A. et al. Measurements of tangential momentum accommodation coefficient for various gases in plane microchannel. *Physics of Fluids*, v. 21, n. 10, p. 102004, 2009.
- GUO, Z. et al. Discrete effects on boundary conditions for lattice Boltzmann equation in simulating microscale gas flows. *Physics Review E*, v. 76, p. 056704, 2007.
- GUO, Z.; SHU, C. *Lattice Boltzmann method and its applications in engineering*. Vol. 3. Singapura: World Scientific, 2013. 404 p.
- GUO, Z.; ZHAO, T. S.; SHI, Y. Physical symmetry, spatial accuracy, and relaxation time of the lattice Boltzmann equation for microgas flows. *Journal of Applied Physics*, v. 99, n. 7, p. 074903, 2006.
- HADJICONSTANTINO, N. G. Comment on Cercignani’s second-order slip coefficient. *Physics of Fluids*, v. 15, n. 8, p. 2352–2354, 2003.
- HAPPEL, J. Viscous flow relative to arrays of cylinders. *AIChE Journal*, v. 5, n. 2, p. 174–177, 1959.

- 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, 1997.
- HERMAN, P. K.; LEHMANN, M. J.; VELU, Y. K. Predicting initial pressure drop of fibrous filter media - Typical models and recent improvements. *Journal of Textile and Apparel, Technology and Management*, v. 5, n. 2, p. 1–15, 2006.
- HEUVELINE, V.; KRAUSE, M. J.; LATT, J. Towards a hybrid parallelization of lattice Boltzmann methods. *Computers & Mathematics with Applications*, v. 58, n. 5, p. 1071–1080, 2009.
- HINDS, W. C. *Aerosol technology: properties, behavior and measurement of airborne particles*. Primeira edição. New York: Wiley Interscience, 1999. 483 p.
- HOSSEINI, S. A.; TAFRESHI, H. V. Modeling particle filtration in disordered 2-D domains: a comparison with cell models. *Separation and Purification Technology*, v. 74, n. 2, p. 160–169, 2010a.
- HOSSEINI, S. A.; TAFRESHI, H. V. Modeling permeability of 3-D nanofiber media in slip flow regime. *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 6, p. 2249–2254, 2010b.
- HOSSEINI, S. A.; TAFRESHI, H. V. 3-D simulation of particle filtration in electrospun nanofibrous filters. *Powder Technology*, v. 201, n. 2, p. 153–160, 2010c.
- HOUAT, S.; BOUAYED, Z. E. The lattice Boltzmann method for mixed convection in a cavity. *Energy Procedia*, v. 139, p. 186–191, 2017.
- HSIA, Y.-T.; DOMOTO, G. A. An experimental investigation of molecular rarefaction effects in gas lubricated bearings at ultra-low clearances. *Journal of Lubrication Technology*, v. 105, n. 1, p. 120–129, 1983.
- HUANG, Z.-M. et al. A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites. *Composites Science and Technology*, v. 63, n. 15, p. 2223–2253, 2002.
- ILIAS, S.; DOUGLAS, P. L. Inertial impaction of aerosol particles on cylinders at intermediate and high Reynolds numbers. *Chemical Engineering Science*, v. 44, n. 1, p. 81–99, 1989.
- INGHAM, D. B.; HILDYARD, M. L.; HEGGS, P. J. The particle collection efficiency of a cascade of cylinders. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 67, n. 4, p. 545–553, 1989.
- INNOCENTINI, M. D. M.; PANDOLFELLI, V. C. Considerações sobre a estimativa da permeabilidade em concretos refratários através das equações de Darcy e de Forchheimer. *Cerâmica*, v. 45, n. 292, p. 292–293, 1999.
- JORDAN, F.; FISSAN, H. Particle trajectory analysis of deposition on a single fiber in an electric field with Brownian motion. *Journal of Aerosol Science*, v. 28, n. 1, p. S285–S286, 1997.
- KARNIADAKIS, G.; BESKOK, A.; ALURU, N. *Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation*. Primeira edição. New York: Springer-Verlag, 2005. 818 p.

- KIM, S. H.; PITSCH, H. Slip velocity and Knudsen layer in the lattice Boltzmann method for microscale flows. *Physical Review E*, v. 77, p. 026704, 2008.
- KIRSCH, A. A.; STECHKINA, I. B.; FUCHS, N. A. Effect of gas slip on the pressure drop in fibrous filters. *Journal of Aerosol Science*, v. 4, n. 4, p. 287–293, 1973.
- KIRSCH, A. A.; STECHKINA, I. B.; FUCHS, N. A. Gas flow in aerosol filters made of polydisperse ultrafine fibres. *Journal of Aerosol Science*, v. 5, n. 1, p. 39–45, 1974.
- KOMORI, F. S. *Desenvolvimento de um simulador computacional de dinâmica de fluidos utilizando o método de lattice Boltzmann*. 87 p. Dissertação de Mestrado — Universidade de São Paulo, São Paulo (SP), 2012.
- KRAUSE, M. J. *Fluid flow simulation and optimisation with lattice Boltzmann methods on high performance computers*. 175 p. Tese de doutorado — Fakultät für Mathematik - Universität Karlsruhe, Karlsruhe - Alemanha, 2010.
- KRAUSE, M. J. *OpenLB User guide: Associated to Release 1.0 of the Code*. 2016. Disponível em: <<http://www.openlb.net>>. Acesso em: Janeiro de 2017.
- KRAUSE, M. J. et al. Particle flow simulations with homogenised lattice Boltzmann methods. *Particuology*, v. 34, p. 1–13, 2017.
- KREMER, G. M. *Uma introdução à equação de Boltzmann*. Primeira edição. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2005. 160 p.
- KRUEGER, T. et al. *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. Primeira edição. Suíça: Springer, 2017. 694 p.
- KUWABARA, S. The forces experienced by randomly distributed parallel circular cylinders or spheres in a viscous flow at small Reynolds numbers. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 14, n. 4, p. 527–535, 1959.
- LEE, K. W.; LIU, B. Y. H. Theoretical study of aerosol filtration by fibrous filters. *Aerosol Science and Technology*, v. 1, n. 2, p. 147–161, 1982.
- LEE, T.; LIN, C.-L. Rarefaction and compressibility effects of the lattice-Boltzmann-equation method in a gas microchannel. *Physical Review E*, v. 71, p. 046706, 2005.
- LI, Q. et al. Lattice Boltzmann modeling of microchannel flows in the transition flow regime. *Microfluidics and Nanofluidics*, v. 10, n. 3, p. 607–618, 2011.
- LI, Y. et al. Extended finite element method for analysis of multi-scale flow in fractured shale gas reservoirs. *Environmental Earth Sciences*, v. 73, n. 10, p. 6035–6045, 2015.
- LIM, C. Y. et al. Application of lattice Boltzmann method to simulate microchannel flows. *Physics of Fluids*, v. 14, n. 7, p. 2299–2308, 2002.
- LIU, C.; YANG, J.; NI, Y. A multiplicative decomposition of Poiseuille number on rarefaction and roughness by lattice Boltzmann simulation. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 61, n. 2, p. 3528–3536, 2011.
- LIU, X.; GUO, Z. A lattice Boltzmann study of gas flows in a long micro-channel. *Computers and Mathematics with Applications*, v. 65, n. 2, p. 186–193, 2013.

- LIU, Z. G.; WANG, P. K. Numerical investigation of viscous flow fields around multifiber filters. *Aerosol Science and Technology*, v. 25, n. 4, p. 375–391, 1996.
- LORD, R. Tangential momentum accommodation coefficients on rare gases on polycrystalline metal surfaces. *Rarefied Gas Dynamics*, v. 53, p. 1–8, 1977.
- LUECKE, T. et al. Calculation of fluid flow and particle trajectories in a system of randomly placed parallel cylinders - a new model for aerosol filtration. *Journal of Aerosol Science*, v. 24, n. 1, p. S555–S556, 1993.
- MACDONALD, I. F. et al. Flow through porous media - the Ergun equation revisited. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, v. 18, n. 3, p. 199–208, 1979.
- MATTESON, M. J.; ORR, C. *Filtration: principles and practices*. Segunda edição. New York: Marcel Dekker, 1987. 736 p.
- MAURER, J. et al. Second-order slip laws in microchannels for helium and nitrogen. *Physics of Fluids*, v. 15, n. 9, p. 2613–2621, 2003.
- MAZE, B. et al. A simulation of unsteady-state filtration via nanofiber media at reduced operating pressures. *Journal of Aerosol Science*, v. 38, n. 5, p. 550–571, 2007.
- MITCHELL, D. P. Spectrally optimal sampling for distribution ray tracing. *Computer Graphics (SIGGRAPH '91 Proceedings)*, v. 25, p. 157–164, 1991.
- MOELTER, W. et al. Extension of the filtration equation from monodisperse to polydisperse fibres and measurement of the local fibre polydispersity. *Journal of Aerosol Science*, v. 24, n. 1, p. S557–S558, 1993.
- MOGHADDAN, R. N.; JAMIOLAHMADY, M. Slip flow in porous media. *Fuel*, v. 173, p. 298–310, 2016.
- MOHAMAD, A. A. *Lattice Boltzmann method: fundamentals and engineering applications with computer codes*. Primeira edição. Londres: Springer-Verlag London, 2011. 195 p.
- NEUMANN, P.; ROHRMANN, T. Lattice Boltzmann simulations in the slip and transition flow regime with the Peano Framework. *Open Journal of Fluid Dynamics*, v. 2, n. 3, p. 101–110, 2012.
- NEUMANN, P. R. *Hybrid multiscale simulation approaches for micro- and nanoflows*. 183 p. Tese de Doutorado — Fakultät für Informatik - Technischen Universität München, Munique - Alemanha, 2013.
- NIE, X.; DOOLEN, G. D.; CHEN, S. Lattice-Boltzmann simulations of fluid flows in MEMS. *Journal of Statistical Physics*, v. 107, n. 1-2, p. 279–289, 2002.
- NIU, X. D.; SHU, C.; CHEW, Y. T. A lattice Boltzmann BGK model for simulation of micro flows. *Europhysics Letters*, v. 67, n. 4, p. 600–606, 2004.
- Organização Mundial da Saúde. *Ambient (outdoor) air quality and health: Fact sheet 2016*. 2016. Disponível em: <<http://www.who.int/mediacentre/factsheets/>>. Acesso em: Janeiro de 2017.

- PEDRAS, M. H. J.; LEMOS, M. J. S. de. Computational of turbulent flow in porous media using a low-Reynolds $k-\epsilon$ model and an infinite array of transversally displaced elliptic rods. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 43, n. 6, p. 585–602, 2003.
- PHILIPPI, P. C. et al. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: the discretization problem and thermal models. *Physics Review E*, v. 73, p. 056702, 2006.
- PODGÓRSKI, A.; BALAZY, A.; GRADOŃ, L. Application of nanofibers to improve the filtration efficiency of the most penetrating aerosol particles in fibrous filters. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 20, p. 6804–6815, 2006.
- PORODNOV, B. T. et al. Experimental investigation of rarefied gas flow in different channels. *Journal of FLuid Mechanics*, v. 64, n. 3, p. 417–438, 1974.
- PREMANATH, K. N.; ABRAHAM, J. Three-dimensional multi-relaxation time (MRT) lattice-Boltzmann models for multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, v. 224, p. 539–559, 2007.
- QIAN, F.; ZHANG, J.; HUANG, Z. Effects of the operating conditions and geometry parameter on the filtration performance of the fibrous filter. *Chemical Engineering and Technology*, v. 32, n. 5, p. 789–797, 2009.
- RABIEE, M. B. et al. Investigation of the characteristics of particulate flows through fibrous filters using the lattice Boltzmann method. *Particuology*, v. 21, p. 90–98, 2015.
- RAO, N.; FAGHRI, M. Computer modeling of aerosol filtration by fibrous filters. *Aerosol Science and Technology*, v. 8, n. 2, p. 133–156, 1988.
- REIDER, M. B.; STERLING, J. D. Accuracy of discrete-velocity BGK models for simulation of the incompressible Navier-Stokes equations. *Computers & Fluids*, v. 24, n. 4, p. 459–467, 1995.
- SAINT-RAYMOND, L. *Hydrodynamic limits of the Boltzmann equation*. Primeira edição. Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. 202 p.
- SALUSSOGLIA, A. I. P. *Métodos para caracterização de meios filtrantes contendo nanofibras*. 77 p. Dissertação de Mestrado — Universidade Federal de São Carlos, São Carlos (SP), 2016.
- SAMBAER, W.; ZATLOUKAL, M.; KIMMER, D. 3D modeling of filtration process via polyurethane nanofiber based nonwoven filters prepared by electrospinning process. *Chemical Engineering Science*, v. 66, n. 4, p. 613–623, 2011.
- SAMBAER, W.; ZATLOUKAL, M.; KIMMER, D. 3D air filtration modeling for nanofiber based filters in the ultrafine particle size range. *Chemical Engineering Science*, v. 82, p. 299–311, 2012.
- SANGANI, A. S.; ACRIVOS, A. Slow flow past periodic arrays of cylinders with application to heat transfer. *International Journal of Multiphase Flow*, v. 8, n. 3, p. 193–206, 1982.

- SBRAGAGLIA, M.; SUCCI, S. Analytical calculation of slip flow in lattice Boltzmann model with kinetic boundary conditions. *Physics of Fluids*, v. 17, n. 9, p. 093602–1–093602–8, 2008.
- SCHAEFER, M. et al. Benchmark computations of laminar flow around a cylinder. *Notes on Numerical Fluid Mechanics*, v. 48, p. 547–566, 1996.
- SHEN, C. et al. Examination of the LBM in simulation of microchannel flow in transitional regime. *Microscale Thermophysical Engineering*, v. 8, n. 4, p. 423–432, 2004.
- SOFONEA, V.; SEKERKA, R. F. Boundary conditions for the upwind finite difference lattice Boltzmann model: Evidence of slip velocity in microchannel flow. *Journal of Computational Physics*, v. 207, n. 2, p. 639–659, 2005.
- SOUTO, E. B.; SEVERINO, P.; SANTANA, M. H. A. Preparação de nanopartículas poliméricas a partir da polimerização de monômeros - Parte I. *Polímeros*, v. 22, n. 1, p. 96–100, 2012.
- SOUTO, E. B.; SEVERINO, P.; SANTANA, M. H. A. Preparação de nanopartículas poliméricas a partir de polímeros pré-formados - Parte II. *Polímeros*, v. 22, n. 1, p. 101–106, 2012.
- SPIELMAN, L.; GOREN, S. L. Model for predicting pressure drop and filtration efficiency in fibrous media. *Environmental Science & Technology*, v. 2, n. 4, p. 279–287, 1968.
- SUCCI, S. *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Primeira edição. Oxford: Oxford University Press, 2001. 288 p.
- SUCCI, S. Mesoscopic modeling of slip motion at fluid-solid interfaces with heterogeneous catalysis. *Physical Review Letters*, v. 89, n. 6, p. 064502–1, 2002.
- SUGA, K. Lattice Boltzmann methods for complex micro-flows: applicability and limitations for practical applications. *Fluid Dynamics Research*, v. 45, n. 3, p. 1–31, 2013.
- SUTHERLAND, K. *Filters and Filtration Handbook*. Quinta edição. Estados Unidos: Elsevier, 2008. 536 p.
- SUTHERLAND, K. Pharmaceuticals: filtration plays role in pharmaceuticals and biotechnology. *Filtration + Separation*, v. 48, n. 2, p. 16–19, 2011.
- SŤEC, O.; SKOČEK, J. Simple Navier's boundary condition for the non-Newtonian lattice Boltzmann fluid dynamics solver. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, v. 199, p. 61–69, 2013.
- TANG, G. H.; TAO, W. Q.; HE, L. Lattice Boltzmann method for simulating gas flow in microchannels. *International Journal of Modern Physics C*, v. 15, n. 2, p. 335–347, 2004.
- THOMAS, L. B.; LORD, R. G. Comparative measurements of tangential momentum and thermal accommodations on polish and on roughened steel spheres. *Proceedings of 8th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, p. 405–412, 1975.
- THOMPSON, P. A.; TROIAN, S. M. A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces. *Nature*, v. 389, p. 306–362, 1997.

- TRONVILLE, P.; RIVERS, R. Numerical modeling of the flow resistances of fibrous air filter media having random fiber diameters. *Proceedings of FILTECH 2005 Conference*, p. 261–266, 2005.
- TRONVILLE, P.; RIVERS, R. CFD analysis of flow patterns and resistance of air filter media having random fiber diameters. *Proceedings of American Filtration Society, 19th Annual Conference, Rosemont*, Session 3-Track 3, 9-11 Maio 2006.
- TRONVILLE, P.; ZHOU, B.; RIVERS, R. Realistic air filter media performance simulation. Part I: Navier-Stokes/finite-volume computational fluid dynamics procedures. *HVAC&R Research*, v. 19, n. 5, p. 493–502, 2013.
- TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. *Computational fluid dynamics - A practical approach*. Primeira edição. Oxford: Elsevier, 2008. 458 p.
- VERHAEGHE, F.; LUO, L.-S.; BLANPAIN, B. Lattice Boltzmann modeling of microchannel flow in slip flow regime. *Journal of Computational Physics*, v. 228, n. 1, p. 147–157, 2009.
- WAKEMAN, R. J.; TARLETON, E. S. *Filtration: equipment selection modelling and process simulation*. Primeira edição. Oxford: Elsevier, 1999. 446 p.
- WANG, H. et al. Numerical simulation of particle capture process of fibrous filters using lattice-Boltzmann two-phase flow model. *Powder Technology*, v. 227, p. 111–122, 2012.
- WANG, H. et al. Simulation of filtration process for multi-fiber filter using the Lattice-Boltzmann two-phase flow model. *Journal of Aerosol Science*, v. 66, p. 164–178, 2013.
- WANG, J. et al. The lattice Boltzmann method for isothermal micro-gaseous flow and its application in shale gas flow: a review. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 95, p. 94–108, 2016.
- WANG, J.; KIM, S. C.; PUI, D. Y. H. Investigation of the figure of merit for filters with a single nanofiber layer on a substrate. *Aerosol Science*, v. 39, n. 4, p. 323–334, 2008.
- WANG, Q. et al. A case study of simulating submicron aerosol filtration via lightweight spun-bounded filter media. *Chemical Engineering Science*, v. 61, n. 15, p. 4871–4883, 2006.
- WEISBROD, P. *Reduction of unphysical velocities in a lattice Boltzmann multiphase model*. 84 p. Dissertação de mestrado — Fakultät für Mathematik - Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe - Alemanha, 2015.
- WOLF, F. G. *Modelagem da interação fluido-sólido para simulação de molhabilidade e capilaridade usando o modelo de lattice Boltzmann*. 154 p. Tese de Doutorado — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis (SC), 2006.
- WOLF-GLADROW, D. A. *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models - An introduction*. Primeira edição. Alfred Wegener Institute for Polar and Marine Research: Springer, 2005. 314 p.

- YAMAGUCHI, H. et al. Experimental measurement on tangential momentum accommodation coefficient in a single microtube. *Microfluidics and Nanofluidics*, v. 11, n. 1, p. 57–64, 2011.
- YEH, H.-C.; LIU, B. Y. H. Aerosol filtration by fibrous filters - I. Theoretical. *Journal of Aerosol Science*, v. 5, n. 2, p. 191–204, 1974.
- YUAN, Y.; RAHMAN, S. Extended application of the lattice Boltzmann method to rarefied gas flow in micro-channels. *Physica A*, v. 463, p. 25–36, 2016.
- ZHANG, W.-M.; MENG, G.; WEI, X. A review on slip models for gas microflows. *Microfluidics and Nanofluidics*, v. 13, n. 6, p. 845–882, 2012.
- ZHANG, X. et al. Lattice Boltzmann simulation of shale gas transport in organic nano-pores. *Scientific Reports*, v. 4, p. 1–6, 2014.
- ZHANG, Y.-H. et al. Gas flow in microchannels - a lattice Boltzmann method approach. *Journal of Statistical Physics*, v. 121, n. 1-2, p. 257–267, 2005.
- ZHOU, B. et al. Numerical simulation and experimental validation for the performance of fibrous air filter media with LB method. *Aerosol and Air Quality Research*, v. 17, p. 2645–2658, 2017a.
- ZHOU, W. et al. Lattice Boltzmann parallel simulation of microflow dynamics over structured surfaces. *Advances in Engineering Software*, v. 107, p. 51–58, 2017b.
- ZHUO, C.; ZHONG, C. Filter-matrix lattice Boltzmann model for microchannel gas flows. *Physical Review E*, v. 88, p. 053311, 2013.

Apêndices

Dados de queda de pressão

Neste apêndice, são apresentados os dados de queda de pressão para os meios filtrantes F6, F8 e H13, para diferentes dimensões verticais do modelo geométrico. O domínio computacional foi gerado segundo as duas abordagens aleatória e segundo o algoritmo de Mitchell (1991). Para cada meio filtrante, foram utilizadas as condições de contorno de reflexão especular e *bounce back* na superfície das fibras. A média e o desvio padrão de cada conjunto de simulações também são apresentados.

A.1 Meio filtrante F6, com coordenadas aleatórias.

A.1.1 Com reflexão especular na superfície das fibras

Tabela A.1 – $y = 10 \mu m$

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	33,502
2	31,289
3	31,223
4	34,746
5	30,504
6	31,026
7	33,183
8	33,937
9	30,504
10	34,401
Média	32,432
Desvio Padrão	1,593

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.2 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	16,420
2	11,617
3	13,217
4	16,855
5	12,374
6	13,875
7	13,135
8	12,064
9	13,044
10	14,355
Média	13,696
Desvio Padrão	1,660

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.3 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	17,018
2	15,053
3	14,212
4	14,660
5	14,960
6	12,717
7	11,932
8	15,381
9	13,965
10	14,225
Média	14,412
Desvio Padrão	1,334

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.4 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	13,432
2	14,670
3	15,266
4	12,870
5	14,343
6	15,521
7	13,913
8	14,398
9	17,189
10	14,665
Média	14,630
Desvio Padrão	1,137

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.5 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	11,559
2	12,447
3	11,368
4	14,618
5	12,839
6	11,931
7	15,478
8	11,918
9	12,806
10	12,747
Média	12,771
Desvio Padrão	1,254

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.6 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	11,857
2	13,156
3	12,409
4	12,475
5	11,515
6	12,543
7	13,342
8	12,396
9	12,309
10	14,592
Média	12,659
Desvio Padrão	0,819

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.7 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	13,897
2	13,167
3	12,608
4	11,558
5	11,818
6	11,929
7	12,170
8	11,748
9	13,755
10	12,651
Média	12,523
Desvio Padrão	0,785

Fonte: Acervo pessoal.

A.1.2 Com *bounce back* na superfície das fibras.Tabela A.8 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	63,557
2	52,513
3	56,818
4	62,582
5	56,762
6	56,360
7	57,381
8	61,931
9	50,983
10	61,988
Média	58,087
Desvio Padrão	4,105

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.9 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	24,751
2	15,483
3	18,071
4	26,557
5	16,498
6	16,498
7	17,747
8	16,481
9	19,602
10	19,818
Média	19,150
Desvio Padrão	3,531

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.10 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	23,907
2	21,002
3	19,683
4	19,642
5	21,170
6	16,766
7	15,636
8	21,420
9	18,710
10	19,335
Média	19,723
Desvio Padrão	2,253

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.11 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	17,907
2	19,963
3	21,257
4	17,181
5	19,334
6	21,184
7	18,609
8	19,309
9	24,465
10	19,935
Média	19,941
Desvio Padrão	1,950

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.12 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	15,025
2	16,558
3	14,441
4	20,244
5	17,149
6	16,175
7	22,502
8	15,700
9	16,650
10	16,905
Média	17,135
Desvio Padrão	2,319

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.13 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	16,474
2	18,214
3	15,775
4	16,387
5	15,210
6	16,653
7	17,599
8	16,580
9	16,233
10	20,385
Média	16,951
Desvio Padrão	1,397

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.14 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	18,376
2	17,912
3	16,527
4	15,087
5	15,406
6	15,533
7	15,788
8	15,440
9	18,564
10	16,642
Média	16,528
Desvio Padrão	1,247

Fonte: Acervo pessoal.

A.2 Meio filtrante F8, com coordenadas aleatórias.

A.2.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.

Tabela A.15 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	51,015
2	55,864
3	55,845
4	55,968
5	45,751
6	50,006
7	60,071
8	51,383
9	51,310
10	50,112
Média	52,732
Desvio Padrão	3,920

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.16 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	47,116
2	45,137
3	43,326
4	40,432
5	48,082
6	46,474
7	50,426
8	50,523
9	49,367
10	47,049
Média	46,793
Desvio Padrão	3,015

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.17 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	55,517
2	43,546
3	47,780
4	45,721
5	49,706
6	48,229
7	46,256
8	43,670
9	42,209
10	50,489
Média	47,314
Desvio Padrão	3,760

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.18 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	45,963
2	46,512
3	48,958
4	44,698
5	42,732
6	43,779
7	44,222
8	40,985
9	47,043
10	43,368
Média	44,826
Desvio Padrão	2,211

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.19 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	42,864
2	49,126
3	43,017
4	42,911
5	42,607
6	44,475
7	44,886
8	43,672
9	45,080
10	41,414
Média	44,005
Desvio Padrão	2,016

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.20 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	40,072
2	41,314
3	41,581
4	44,899
5	40,785
6	41,953
7	41,998
8	40,513
9	40,825
10	44,598
Média	41,854
Desvio Padrão	1,561

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.21 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	41,161
2	43,454
3	42,805
4	41,791
5	42,010
6	42,486
7	42,267
8	42,486
9	41,366
10	42,179
Média	42,220
Desvio Padrão	0,639

Fonte: Acervo pessoal.

A.2.2 Com *bounce back* na superfície das fibras.

Tabela A.22 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	77,423
2	87,450
3	86,457
4	88,316
5	65,526
6	72,672
7	92,395
8	76,503
9	74,743
10	73,525
Média	79,501
Desvio Padrão	8,180

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.23 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	67,279
2	64,327
3	62,141
4	55,901
5	71,246
6	67,667
7	79,415
8	75,880
9	73,818
10	66,423
Média	68,410
Desvio Padrão	6,576

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.24 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	67,279
2	62,560
3	71,480
4	64,789
5	71,856
6	70,509
7	66,943
8	62,023
9	71,451
10	75,740
Média	68,420
Desvio Padrão	4,305

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.25 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	66,765
2	66,345
3	72,970
4	63,399
5	59,042
6	61,909
7	63,689
8	57,020
9	67,007
10	61,982
Média	64,013
Desvio Padrão	4,230

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.26 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	60,377
2	72,002
3	60,053
4	59,501
5	59,326
6	63,626
7	65,552
8	60,114
9	63,567
10	58,069
Média	62,219
Desvio Padrão	3,951

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.27 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	54,228
2	57,249
3	58,532
4	63,566
5	56,123
6	59,064
7	57,918
8	56,218
9	56,645
10	62,777
Média	58,232
Desvio Padrão	2,793

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.28 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	56,655
2	61,158
3	59,725
4	57,425
5	57,895
6	59,756
7	58,911
8	58,399
9	56,320
10	59,079
Média	58,532
Desvio Padrão	1,426

Fonte: Acervo pessoal.

A.3 Meio filtrante H13, com coordenadas aleatórias.

A.3.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.

Tabela A.29 – $y = 5 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	122,779
2	126,722
3	130,872
4	130,579
5	127,966
6	128,037
7	129,604
8	125,694
9	128,810
10	124,407
Média	127,547
Desvio Padrão	2,514

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.30 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	113,215
2	115,115
3	114,754
4	111,757
5	114,217
6	109,576
7	111,804
8	110,464
9	112,780
10	111,477
Média	112,516
Desvio Padrão	1,739

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.31 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	110,733
2	114,453
3	110,922
4	113,307
5	109,354
6	110,474
7	114,090
8	110,820
9	111,142
10	113,287
Média	111,032
Desvio Padrão	1,667

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.32 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	110,971
2	114,355
3	113,722
4	111,615
5	111,319
6	110,410
7	112,255
8	115,367
9	112,678
10	114,508
Média	112,467
Desvio Padrão	1,602

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.33 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	115,520
2	114,354
3	113,036
4	113,789
5	114,802
6	111,679
7	113,399
8	111,550
9	112,401
10	113,155
Média	113,277
Desvio Padrão	1,228

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.34 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	112,422
2	112,510
3	113,844
4	112,289
5	112,832
6	113,660
7	112,891
8	115,042
9	112,967
10	112,934
Média	113,139
Desvio Padrão	0,791

Fonte: Acervo pessoal.

A.3.2 Com *bounce back* na superfície das fibras.Tabela A.35 – $y = 5 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	197,324
2	204,897
3	217,742
4	210,989
5	213,131
6	208,166
7	214,784
8	203,517
9	212,940
10	203,505
Média	208,700
Desvio Padrão	5,997

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.36 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	171,940
2	174,798
3	174,925
4	167,476
5	173,599
6	163,959
7	167,021
8	167,790
9	171,587
10	167,145
Média	170,024
Desvio Padrão	3,623

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.37 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	166,896
2	172,533
3	168,001
4	171,560
5	162,954
6	165,516
7	173,299
8	165,545
9	166,039
10	171,061
Média	167,449
Desvio Padrão	3,350

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.38 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	166,610
2	173,836
3	170,562
4	169,219
5	167,394
6	164,680
7	169,024
8	172,627
9	170,212
10	173,627
Média	169,716
Desvio Padrão	2,877

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.39 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	174,978
2	173,137
3	169,871
4	170,847
5	172,839
6	167,992
7	170,407
8	167,935
9	169,195
10	169,760
Média	170,139
Desvio Padrão	2,185

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.40 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	168,366
2	169,406
3	171,183
4	168,832
5	170,384
6	172,122
7	170,443
8	174,074
9	169,998
10	168,764
Média	170,357
Desvio Padrão	1,658

Fonte: Acervo pessoal.

A.4 Meio filtrante F6, segundo algoritmo de Mitchell (1991).

A.4.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.

Tabela A.41 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	39,027
2	36,361
3	33,457
4	35,761
5	33,533
6	39,162
7	39,939
8	31,825
9	31,706
10	39,146
Média	35,992
Desvio Padrão	3,053

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.42 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	13,883
2	14,144
3	13,839
4	13,959
5	14,117
6	13,388
7	13,534
8	14,207
9	14,040
10	13,866
Média	13,898
Desvio Padrão	0,250

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.43 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	15,613
2	15,705
3	15,719
4	15,722
5	15,653
6	16,044
7	15,612
8	15,854
9	15,934
10	15,819
Média	15,767
Desvio Padrão	0,136

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.44 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	17,242
2	17,149
3	17,174
4	17,003
5	16,764
6	17,029
7	16,759
8	16,920
9	16,921
10	17,081
Média	17,004
Desvio Padrão	0,156

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.45 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	15,604
2	15,469
3	15,862
4	16,062
5	15,931
6	15,899
7	16,377
8	15,173
9	15,708
10	15,833
Média	15,792
Desvio Padrão	0,313

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.46 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	15,700
2	15,331
3	15,249
4	15,606
5	15,334
6	15,351
7	15,641
8	15,917
9	15,181
10	15,398
Média	15,471
Desvio Padrão	0,221

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.47 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	16,816
2	16,890
3	16,737
4	16,844
5	16,614
6	17,164
7	16,759
8	16,828
9	16,820
10	16,881
Média	16,835
Desvio Padrão	0,134

Fonte: Acervo pessoal.

A.4.2 Com *bounce back* na superfície das fibras.

Tabela A.48 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	63,190
2	58,946
3	48,482
4	54,341
5	48,899
6	63,742
7	68,368
8	48,866
9	44,975
10	69,999
Média	56,981
Desvio Padrão	8,613

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.49 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	17,662
2	18,129
3	17,534
4	17,677
5	17,999
6	17,143
7	17,133
8	18,093
9	17,967
10	17,743
Média	17,708
Desvio Padrão	0,341

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.50 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	19,354
2	19,588
3	19,598
4	19,555
5	19,526
6	20,215
7	19,542
8	19,502
9	19,898
10	19,534
Média	19,631
Desvio Padrão	0,233

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.51 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	21,622
2	21,436
3	21,530
4	21,494
5	20,958
6	21,350
7	20,960
8	21,309
9	21,326
10	21,639
Média	21,362
Desvio Padrão	0,229

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.52 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	19,613
2	19,500
3	19,966
4	20,176
5	20,030
6	20,077
7	20,429
8	18,955
9	19,741
10	19,766
Média	19,825
Desvio Padrão	0,391

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.53 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	19,743
2	19,036
3	18,994
4	19,400
5	19,041
6	19,984
7	19,524
8	19,846
9	18,875
10	19,244
Média	19,369
Desvio Padrão	0,373

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.54 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	21,190
2	21,314
3	21,076
4	21,085
5	20,864
6	21,523
7	21,127
8	21,216
9	21,143
10	21,099
Média	21,164
Desvio Padrão	0,163

Fonte: Acervo pessoal.

A.5 Meio filtrante F8, segundo algoritmo de Mitchell (1991).

A.5.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.

Tabela A.55 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	52,027
2	52,260
3	53,171
4	52,146
5	51,677
6	51,869
7	53,484
8	54,342
9	54,425
10	51,863
Média	52,726
Desvio Padrão	0,995

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.56 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	58,035
2	58,402
3	58,719
4	58,332
5	58,364
6	57,402
7	58,126
8	59,458
9	58,826
10	57,573
Média	58,323
Desvio Padrão	0,569

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.57 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	56,056
2	56,977
3	57,201
4	57,625
5	57,142
6	57,198
7	57,596
8	57,883
9	56,540
10	57,810
Média	57,203
Desvio Padrão	0,545

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.58 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	55,736
2	55,283
3	55,872
4	55,553
5	55,027
6	56,478
7	55,274
8	55,924
9	55,723
10	55,931
Média	55,680
Desvio Padrão	0,396

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.59 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	55,102
2	55,330
3	55,336
4	55,304
5	55,482
6	54,385
7	55,545
8	55,095
9	55,354
10	55,039
Média	55,197
Desvio Padrão	0,313

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.60 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	53,949
2	53,956
3	55,220
4	54,911
5	55,198
6	55,020
7	55,000
8	54,300
9	55,349
10	54,188
Média	54,709
Desvio Padrão	0,521

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.61 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	55,425
2	55,025
3	54,946
4	54,978
5	55,512
6	55,565
7	55,389
8	55,386
9	55,562
10	55,068
Média	55,286
Desvio Padrão	0,239

Fonte: Acervo pessoal.

A.5.2 Com *bounce back* na superfície das fibras.Tabela A.62 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	70,478
2	72,112
3	72,869
4	72,057
5	72,095
6	71,193
7	73,677
8	73,947
9	74,694
10	70,951
Média	72,407
Desvio Padrão	1,306

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.63 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	77,217
2	77,906
3	78,980
4	77,806
5	78,262
6	77,378
7	77,253
8	79,207
9	78,342
10	76,798
Média	77,915
Desvio Padrão	0,747

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.64 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	75,164
2	76,407
3	76,657
4	77,230
5	76,308
6	76,196
7	77,427
8	77,575
9	75,722
10	77,535
Média	76,622
Desvio Padrão	0,776

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.65 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	74,740
2	73,955
3	74,384
4	74,156
5	73,615
6	75,119
7	73,756
8	75,064
9	74,028
10	74,819
Média	74,364
Desvio Padrão	0,516

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.66 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	73,409
2	73,465
3	73,824
4	73,589
5	73,961
6	72,844
7	73,699
8	73,391
9	73,487
10	73,047
Média	73,472
Desvio Padrão	0,318

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.67 – $y = 60 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	71,544
2	71,410
3	73,232
4	73,002
5	73,134
6	73,015
7	73,266
8	72,151
9	73,101
10	71,971
Média	72,583
Desvio Padrão	0,696

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.68 – $y = 70 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	73,803
2	73,164
3	73,578
4	73,126
5	74,286
6	73,540
7	73,573
8	73,632
9	74,132
10	73,512
Média	73,635
Desvio Padrão	0,348

Fonte: Acervo pessoal.

A.6 Meio filtrante H13, segundo algoritmo de Mitchell (1991).

A.6.1 Com reflexão especular na superfície das fibras.

Tabela A.69 – $y = 5 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	129,932
2	129,753
3	125,649
4	127,615
5	124,928
6	130,966
7	136,018
8	135,512
9	130,711
10	135,512
Média	130,660
Desvio Padrão	3,801

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.70 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	124,392
2	124,204
3	124,974
4	123,393
5	124,046
6	123,632
7	123,937
8	123,052
9	123,460
10	123,792
Média	123,888
Desvio Padrão	0,526

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.71 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	122,897
2	123,424
3	124,319
4	123,324
5	123,236
6	123,887
7	124,015
8	123,594
9	123,951
10	124,341
Média	123,741
Desvio Padrão	0,456

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.72 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	125,018
2	123,849
3	124,718
4	123,479
5	124,030
6	124,822
7	123,915
8	123,747
9	124,798
10	123,694
Média	123,973
Desvio Padrão	0,538

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.73 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	124,055
2	125,064
3	124,633
4	124,078
5	125,647
6	125,213
7	124,715
8	124,935
9	124,649
10	124,165
Média	124,682
Desvio Padrão	0,494

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.74 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	124,720
2	124,649
3	123,947
4	125,263
5	124,766
6	124,748
7	124,482
8	124,889
9	124,273
10	123,852
Média	124,559
Desvio Padrão	0,410

Fonte: Acervo pessoal.

A.6.2 Com *bounce back* na superfície das fibras.Tabela A.75 – $y = 5 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	201,351
2	199,588
3	191,677
4	192,819
5	193,451
6	202,921
7	212,945
8	207,902
9	204,139
10	200,553
Média	200,735
Desvio Padrão	6,452

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.76 – $y = 10 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	187,794
2	186,943
3	187,439
4	184,239
5	186,125
6	185,797
7	185,411
8	185,871
9	185,753
10	185,360
Média	186,073
Desvio Padrão	1,006

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.77 – $y = 20 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	185,484
2	184,774
3	186,173
4	184,581
5	184,774
6	186,920
7	186,086
8	186,538
9	185,431
10	185,889
Média	185,687
Desvio Padrão	0,753

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.78 – $y = 30 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	187,452
2	187,168
3	187,751
4	187,068
5	186,468
6	187,830
7	186,630
8	187,268
9	188,086
10	186,423
Média	187,218
Desvio Padrão	0,551

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.79 – $y = 40 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	187,836
2	188,245
3	187,584
4	187,097
5	188,533
6	188,012
7	187,937
8	188,169
9	187,773
10	187,153
Média	187,887
Desvio Padrão	0,434

Fonte: Acervo pessoal.

Tabela A.80 – $y = 50 \mu m$.

Simulação	Queda de pressão (Pa)
1	187,758
2	187,717
3	186,726
4	188,584
5	187,755
6	187,404
7	187,557
8	188,121
9	187,145
10	186,336
Média	187,510
Desvio Padrão	0,619

Fonte: Acervo pessoal.