



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS**  
**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**  
**MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA**

**ALESSANDRO PEIXOTO MAGALHÃES**

**ESCOAMENTO BIFÁSICO EM MEIO POROSO: ANÁLISE DOS REGIMES DO  
ESTADO ESTACIONÁRIO**

**FORTALEZA**

**2025**

ALESSANDRO PEIXOTO MAGALHÃES

ESCOAMENTO BIFÁSICO EM MEIO POROSO: ANÁLISE DOS REGIMES DO ESTADO  
ESTACIONÁRIO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física.

Orientador: Prof. Dr. Cláudio Lucas Nunes de Oliveira.

FORTALEZA

2025

ALESSANDRO PEIXOTO MAGALHÃES

ESCOAMENTO BIFÁSICO EM MEIO POROSO: ANÁLISE DOS REGIMES DO ESTADO  
ESTACIONÁRIO

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física.

Aprovada em: 19/02/2026.

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Cláudio Lucas Nunes de  
Oliveira (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Humberto de Andrade Carmona  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Hansjörg Florian Seybold  
Austrian Academy of Sciences (OEAW)

À memória de Cleber, missionário e irmão querido por todos. O testemunho autêntico de sua vida decidida por ser feliz fazendo o outro feliz encontrou plenitude no dia da apresentação deste trabalho.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, que, segundo seus planos, em momento algum deixou de ser providente para comigo no desenvolvimento e consumação deste trabalho, sobretudo em meus momentos de imprudência e inexperiência. Conforme seu modo de ser e agir, em sua bondade, transformou aos poucos o caos das incertezas, tão presente no decorrer do mestrado, em ordem e consolação, manifestas na concretização deste texto.

Aos meus queridos pais, Ronaldo e Iolanda, meu irmão, Rafael, e minha avó, Maria Edite, pelo amor familiar, expresso no encorajamento e no suporte incessantes, presentes de tantas formas. Agradeço também pela paciência diante dos inconvenientes da rotina desorganizada e das viagens à Beberibe que infelizmente faltei.

À minha amada namorada Maria Vitória, pelo estímulo, confiança e afetuoso companheirismo, além do sacrifício dos momentos de lazer que tivemos que renunciar.

Agradeço profundamente ao Prof. Dr. Cláudio Lucas pelo acompanhamento árduo e por todos os importantes direcionamentos referentes à pesquisa científica, mas certamente não somente a ela restritos. Agradeço por me ceder, juntamente com os professores Humberto Carmona, José Soares, Hansjörg Seybold e César Sampaio – membros efetivos e suplentes da bancada examinadora –, a participação neste projeto e as necessárias instruções, segundo a especialização de cada um. Minha gratidão a todos.

Aos professores Saulo Davi, Andrey Chaves, Ricardo Renan e Ascânio Dias, que me ensinaram as disciplinas da grade curricular. Agradeço ainda a este último, como ao professor Michael de Souza, por conversas e opiniões construtivas, pontuais e desinteressadas, mas valorosas.

Aos amigos e colegas da universidade, que construíram e trilharam comigo esse caminho, trazendo leveza e um senso de comunidade, mas também contribuindo com ideias e experiências. Agradeço em especial a Thiago Sales (sem o qual eu só teria agradecido a Deus no final do texto), Marcio Vaz (que me instigou a dar mais “personalidade” aos agradecimentos), Robert Bertoldo, Igor Pereira, Carlos Miguel e Hellen Moura, também a Letícia, Larissa, Gabriel Velho, Artur e Jéssica. Aos meus conterrâneos de laboratório, apesar do meu desaparecimento periódico do convívio: Antônio Edinaldo, João Henrique, Wallace Vale, Afonso Luiz, e professores Jeanlex Soares e Rosemayre Souza. Aos companheiros da turma de mestrado, que comigo enfrentaram as dificuldades de cada cadeira.

À minha comunidade religiosa e a toda a Igreja, pelas formações e exortações,

pelos testemunhos de vida autêntica e pela oportunidade de prestar meu serviço corrente, que constantemente me ajudam a colocar cada elemento da vida no devido lugar. Agradeço aos amigos e demais irmãos de caminhada, dentre os quais Herlon, Roberto, Sarah, Isabela, Davi, Caio, Rodrigo e João Pedro, pelo bem querer, orações e conversas frutuossas.

Agradeço pela oportunidade de lecionar dentro dos padrões da universidade, proporcionada pelo estágio obrigatório. Agradeço ao professor Marcos Antônio pela tutoria, e espero ter facilitado o aprendizado dos alunos da turma de engenharia química que presidi.

Sou grato aos demais professores e funcionários do departamento, por suas atividades sutís e anônimas, de gestão e manutenção, que me favoreceram de alguma forma.

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

Aos ladrões que roubaram meu notebook durante o mestrado, juntamente com quase tudo que eu tinha feito até então, pela oportunidade de reconstruir com mais dedicação.

“Deus disse: ‘Faça-se um firmamento entre as  
águas, e separe ele umas das outras’.”  
(Gênesis 1,6)

## RESUMO

O deslocamento imiscível em meios porosos desordenados exibe uma ampla gama de morfologias interfaciais estacionárias, cuja organização coletiva não pode ser inferida apenas pelas leis de transporte. Esses padrões surgem da competição entre forças viscosas, capilares e inerciais; contudo, descrições que abranjam diferentes regimes e conectem simultaneamente parâmetros de controle adimensionais, morfologia e estrutura coletiva ainda são limitadas. Neste trabalho, simulamos as equações de Navier-Stokes com condições de contorno periódicas para resolver o escoamento bifásico estatisticamente estacionário em uma matriz porosa desordenada constituída por um arranjo aleatório de discos, em amplas faixas de gradiente de pressão e tensão interfacial, cobrindo múltiplas ordens de magnitude nos números Capilar e de Forchheimer. Identificamos, via aprendizado de máquina não supervisionado, três morfologias estacionárias robustas — bolhas, listras e misturas —, organizadas em um diagrama de regimes ( $Fo$ ,  $Ca$ ) com transições nítidas e consistentes, governadas pelo equilíbrio entre os efeitos capilares, viscosos e inerciais. Apesar dessas reorganizações morfológicas pronunciadas, o transporte macroscópico varia suavemente: os estados de listras e de mistura seguem uma relação  $V$  por  $|\nabla p|$  do tipo Forchheimer, enquanto os estados de bolhas desviam-se sistematicamente devido à barreira energética adicional resultante das deformações da interface. Para caracterizar a organização coletiva subjacente a essas morfologias, e seguindo o precedente de analogias pseudo-termodinâmicas para escoamentos bifásicos, simplificamos configurações estacionárias em campos binários e inferimos modelos de máxima entropia aos pares. Os Hamiltonianos inferidos reproduzem as estatísticas de primeira e segunda ordem ajustadas e, próximo a algumas transições morfológicas, predizem com precisão correlações de ordem superior fora da amostra. A análise termodinâmica dos modelos inferidos — em que a temperatura é um parâmetro do modelo estatístico, sem relação com a temperatura do fluido — revela assinaturas de calor específico dependentes do regime: parte considerável das morfologias de listras opera próxima a um ponto de transição ordem-desordem, enquanto os estados de bolhas e de mistura correspondem à organização supercrítica. Em conjunto, o mapa de regimes hidrodinâmicos e a representação de máxima entropia estabelecem uma estrutura unificada e adimensional que conecta a morfologia interfacial, o transporte macroscópico e as estatísticas coletivas em escoamentos bifásicos em meios porosos.

**Palavras-chave:** Escoamento bifásico; meios porosos; lei de Forchheimer; máquina de Boltzmann.

## ABSTRACT

Immiscible displacement in disordered porous media exhibits a wide range of steady-state interfacial morphologies whose collective organization cannot be inferred from transport laws alone. These patterns arise from the competition between viscous, capillary, and inertial forces; however, descriptions that span different regimes and simultaneously connect dimensionless control parameters, morphology, and collective structure remain limited. In this work, we simulate the Navier-Stokes equations with periodic boundary conditions to resolve statistically steady two-phase flow in a disordered porous matrix consisting of a random array of non-overlapping disks, over wide ranges of pressure gradient and interfacial tension, covering multiple orders of magnitude in the Capillary and Forchheimer numbers. Using unsupervised machine learning, we identify three robust steady-state morphologies — bubbles, stripes, and mixtures — organized in a regime diagram ( $Fo$ ,  $Ca$ ) with sharp and consistent transitions governed by the balance between capillary, viscous, and inertial effects. Despite these pronounced morphological reorganizations, macroscopic transport varies smoothly: stripe and mixture states follow a Forchheimer-type  $V$  versus  $|\nabla p|$  relation, while bubble states deviate systematically due to the additional energy barrier arising from interface deformations. To characterize the collective organization underlying these morphologies, and following the precedent of pseudo-thermodynamic analogies for two-phase flows, we coarse-grain steady-state configurations into binary fields and infer pairwise maximum-entropy models. The inferred Hamiltonians reproduce the fitted first- and second-order statistics and, near some morphological transitions, accurately predict out-of-sample higher-order correlations. Thermodynamic analysis of the inferred models — in which temperature is a parameter of the statistical model, unrelated to the physical temperature of the fluid — reveals regime-dependent specific heat signatures: a considerable fraction of stripe morphologies operate near an order-disorder transition point, while bubble and mixture states correspond to supercritical organization. Taken together, the hydrodynamic regime map and the maximum-entropy representation establish a unified, dimensionless framework connecting interfacial morphology, macroscopic transport, and collective statistics in two-phase porous flows.

**Keywords:** Two-phase flow; porous media; Forchheimer’s law; Boltzmann machine.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Fotografias das linhas de corrente contornando um cilindro em diferentes regimes de escoamento: (a) $Re = 1.54$ – Regime Laminar; (b-c) $Re = 26$ e $2000$ – Regime Intermediário; (d) $Re = 10000$ – Regime Turbulento . . . . .	19
Figura 2 – Relação entre a magnitude do ângulo de contato ( $\theta$ ) e os regimes de molhabilidade. . . . .	20
Figura 3 – Sequência de Elementos Representativos de Área na direção do escoamento $z$ , interpretados como amostras independentes de um ensemble canônico. Esse empilhamento constitui a definição operacional de um tubo. . . . .	28
Figura 4 – Aplicação da Clusterização Hierárquica. Esquerda: Dendrograma representando as distâncias euclidianas de aglomeração. Direita: Visualização esquemática dos agrupamentos resultantes. . . . .	30
Figura 5 – Geometria utilizada nas simulações e discretização da região dos poros . . .	34
Figura 6 – Configuração inicial das simulações. A fase 1 (menos viscosa) está representada em vermelho, e a fase 2 (mais viscosa) em verde. . . . .	36
Figura 7 – Morfologias estacionárias e séries temporais de velocidade. Identificação inicial dos regimes por inspeção visual: (a-b) Regime de Bolhas; (c-d) Regime de Listras; (e-f) Regime de Mistura. Os painéis à direita indicam o intervalo estacionário $\tau$ utilizado para o cálculo da velocidade média $\bar{u}$ . . . . .	38
Figura 8 – Parâmetros morfológicos: determinação de $A_i$ e $p_i$ para o $i$ -ésimo cluster. . .	40
Figura 9 – Processo de binarização e discretização espacial. Uma malha regular é aplicada sobre os <i>snapshots</i> do escoamento em estado estacionário, com $s_i = \pm 1$ definido pela fase predominante em cada célula. . . . .	42
Figura 10 – Matriz binária resultante da discretização, cujas colunas são amostras de um mesmo objeto estatístico: a seção transversal do meio poroso em escoamento, mapeada em uma sequência vertical de spins (microestado $s$ ). . . . .	42
Figura 11 – Gráfico do Coeficiente de Silhueta Médio pelo Número de Clusters $K$ . . . .	44
Figura 12 – Dendrograma da Clusterização Hierárquica, ressaltando os cortes para $K = 3$ e $K = 6$ . A estrutura hierárquica evidencia que o macro-regime de Mistura contém o sub-regime de transição (Mistura Capilar), enquanto o macro-regime de Listras abarca as transições viscoso-capilares e viscoso-inerciais. . . . .	45

Figura 13 – Gráfico de $\nabla p$ em função de $V$ demonstrando o ajuste à Lei de Forchheimer nos regimes inerciais e viscosos. . . . .	46
Figura 14 – Diagrama de fases $Ca \times Fo$ com eixos logarítmicos, acima para $K = 3$ , e abaixo para $K = 6$ . . . . .	49
Figura 15 – Diagrama de fases $Ca \times Fo$ com eixos logarítmicos com $K = 3$ regimes. A transição entre os regimes de Bolhas e os demais está salientada pela curva tracejada, correspondente a um valor específico da soma dos números Capilar e de Weber. A interface entre os regimes de listras e bolhas é de difícil caracterização quando existe atuação relevante das forças capilares (proximidade ao ponto triplo), mas será tomada como $Fo \approx 3$ , pois possui essa forma para alto $Ca$ , onde somente as forças inerciais e viscosas são relevantes. . . . .	50
Figura 16 – Aprendizagem das Máquinas de Boltzmann, expressa pela reprodução das magnetizações e correlações de pares e pela tentativa de previsão dos tripletos. Uma situação física de cada regime foi escolhida, priorizando aquelas com melhor previsão dos terceiros momentos. Nos três casos, $\sigma = 10^{-4}$ N/m. (a-c) $\nabla p = 20.0$ Pa/m, regime de Bolhas; (d-f) $\nabla p = 50.0$ Pa/m, regime de Listras; (g-i) $\nabla p = 5000.0$ Pa/m, regime de Mistura. . . . .	52
Figura 17 – Distribuições dos coeficientes $h_i$ e $J_{ij}$ dos Hamiltonianos de três casos representativos. O caso de Bolhas (a-b) destaca-se pela distribuição bimodal de $J_{ij}$ . As Misturas (c-d) tendem a possuir distribuições estreitas, enquanto alguns casos de Listras (e-f) apresentam maior variância nos parâmetros. . . . .	54
Figura 18 – Gráfico de $C_v$ em função de $T$ para um caso físico de cada regime. Bolhas e Misturas (curvas com picos acentuados à esquerda de $T_{op} = 1$ ) operam no regime supercrítico (alta temperatura relativa). Já a curva das Listras é mais suave devido ao campo local intenso, operando frequentemente próxima ou abaixo da temperatura crítica. . . . .	54

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Parâmetros físicos e geométricos fixos em todas as simulações . . . . .	36
Tabela 2 – Valores escolhidos para os parâmetros variáveis, totalizando 52 casos . . . . .	37

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>CFD</i>	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
<i>CSF</i>	<i>Continuum Surface Force</i>
<i>HCA</i>	<i>Hierarchical Cluster Analysis</i>
<i>REA</i>	<i>Representative Elementary Area</i>
<i>VoF</i>	<i>Volume of Fluid</i>
<i>CCL</i>	<i>Connected-component labeling</i>
<i>DBM</i>	<i>Dielectric Breakdown Model</i>
<i>MB</i>	Máquina de Boltzmann
<i>MCMC</i>	Monte Carlo em Cadeias de Markov
<i>SK</i>	Sherrington-Kirkpatrick

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>17</b>
<b>2.1</b>	<b>Fundamentos da Dinâmica dos Fluidos</b>	<b>17</b>
<b>2.2</b>	<b>Escoamento em Meios Porosos</b>	<b>22</b>
<b>2.3</b>	<b>Abordagem Estatística e Aprendizado de Máquina</b>	<b>27</b>
<b>3</b>	<b>MÉTODOS</b>	<b>34</b>
<b>3.1</b>	<b>Simulação Numérica</b>	<b>34</b>
<b>3.2</b>	<b>Transporte Macroscópico</b>	<b>37</b>
<b>3.3</b>	<b>Agrupamento dos Regimes de Escoamento</b>	<b>39</b>
<b>3.4</b>	<b>Binarização e Máquina de Boltzmann</b>	<b>41</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>44</b>
<b>4.1</b>	<b>Regimes de Escoamento</b>	<b>44</b>
<b>4.2</b>	<b>Lei de Forchheimer</b>	<b>46</b>
<b>4.3</b>	<b>Diagrama de Fases</b>	<b>48</b>
<b>4.4</b>	<b>Resultado das Máquinas de Boltzmann</b>	<b>50</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS</b>	<b>55</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>57</b>
	<b>APÊNDICE A – UNICIDADE DO MÁXIMO DE VEROSSIMILHANÇA</b>	<b>61</b>

## 1 INTRODUÇÃO

O escoamento de fluidos através de meios porosos é um fenômeno de grande relevância e digno de dedicação acadêmica por se manifestar em processos naturais e industriais cruciais, como a recuperação de hidrocarbonetos em reservatórios de petróleo, a remediação de solos contaminados e a gestão de aquíferos subterrâneos (Bear, 1972). A complexidade deste transporte aumenta significativamente quando duas ou mais fases fluidas imiscíveis coexistem no espaço poroso, dando origem a uma rica fenomenologia dinâmico-configuracional governada pela competição entre forças viscosas, capilares e inerciais. Quando as forças capilares predominam, o escoamento caracteriza-se pela formação de bolhas isoladas, cujo movimento é resistido e às vezes impedido pelos obstáculos sólidos do meio. À medida que as forças viscosas se intensificam, emergem dedos viscosos (estruturas alongadas), nas quais as fases se organizam em faixas aproximadamente paralelas, percolando a estrutura porosa de uma extremidade a outra. Em regimes dominados por forças inerciais, por sua vez, observa-se o entrelaçamento das fases, acompanhado pela intensificação dos processos de ruptura e fragmentação das interfaces fluido-fluido.

Historicamente, a descrição macroscópica desses escoamentos baseia-se na Lei de Darcy (Darcy, 1856), que estabelece – em regimes laminares – uma relação linear entre o gradiente de pressão e a vazão do fluido. No entanto, em regimes onde a inércia se torna relevante, ou onde a complexidade interfacial predomina, a linearidade darciana é rompida, exigindo correções como a Lei de Forchheimer (Forchheimer, 1901) para descrever adequadamente a resistência ao fluxo. A caracterização precisa desses regimes – e das transições entre eles – permanece um desafio aberto, especialmente quando se busca uma classificação objetiva das morfologias complexas formadas pela interação entre o fluido e a matriz sólida.

Na literatura, diagramas de regimes detêm-se a algumas situações específicas que contemplam apenas alguns tipos de escoamento, como a invasão de um meio poroso por um fluido, tendo sido inicialmente ocupado por outro (Lenormand *et al.*, 1988) e o deslocamento em microtubos (Qian *et al.*, 2019). No entanto, uma descrição abrangente que considere todas as forças atuantes em um escoamento bifásico em meios porosos ainda não foi realizada.

Neste contexto, o avanço das técnicas de Dinâmica dos Fluidos Computacional – *Computational Fluid Dynamics (CFD)* – permite hoje a simulação detalhada de escoamentos em geometrias controladas, possibilitando o isolamento e a investigação sistemática das forças atuantes. Contudo, a análise puramente hidrodinâmica pode ser enriquecida por ferramentas

de Ciência de Dados e Física Estatística. Recentemente, abordagens que buscam estabelecer analogias termodinâmicas para sistemas fora do equilíbrio (Hansen *et al.*, 2023) têm ganhado destaque ao propor um mapeamento da complexidade dos microestados de escoamento em parâmetros macroscópicos bem definidos.

O presente trabalho propõe uma abordagem multidisciplinar para analisar o escoamento bifásico em meio poroso no regime estacionário. Utilizamos simulações numéricas para gerar um vasto conjunto de dados morfológicos e dinâmicos, variando sistematicamente a tensão superficial da interface do fluido e o gradiente de pressão entre as extremidades do sistema. Para a classificação dos regimes de escoamento, empregamos algoritmos de aprendizado de máquina não supervisionado, especificamente a Análise de Agrupamento Hierárquica (Johnson, 1967), utilizando descritores topológicos e geométricos.

Além da caracterização macroscópica e da verificação das leis de transporte, este estudo avança na descrição microscópica – ou melhor, em uma escala próxima à dos poros – ao mapear o sistema hidrodinâmico em um modelo de spins. Através do uso de Máquinas de Boltzmann (Ackley *et al.*, 1985), uma classe de redes neurais estocásticas, inferimos os Hamiltonianos efetivos (Sherrington e Kirkpatrick, 1975; Mézard *et al.*, 1987) que descrevem a estatística das configurações de fluido, seguindo o precedente de Bialek (2012). Essa metodologia permite não apenas investigar uma análoga “temperatura relativa” e uma “susceptibilidade” dos diferentes regimes (bolhas, listras e mistura), mas também testar os limites da descrição de campo médio e de interações de pares na representação de escoamentos complexos possivelmente dominados por interações de muitos corpos.

Dessa forma, este trabalho busca contribuir para a compreensão fundamental da física dos meios porosos, unindo a mecânica dos fluidos clássica a abordagens modernas de estatística computacional.

A estrutura desta dissertação foi organizada de modo a conduzir a investigação desde os fundamentos teóricos clássicos até a aplicação de métodos estatísticos avançados. Inicialmente, o Capítulo 2 estabelece a base necessária, revisando os conceitos fundamentais da Dinâmica dos Fluidos e as equações governantes do escoamento multifásico, além de discutir as leis constitutivas de Darcy e Forchheimer aplicadas a meios porosos. Este capítulo também introduz o arcabouço da Física Estatística e do Aprendizado de Máquina, com ênfase na técnica de Agrupamento Hierárquico e nas Máquinas de Boltzmann, ferramentas centrais para a análise proposta.

Em seguida, o Capítulo 3 descreve as simulações numéricas baseadas em *CFD* e o modelo geométrico 2D utilizado, que consiste em um arranjo aleatório de cilindros – ou discos – alinhados sem superposição. São apresentados os procedimentos para o cálculo das propriedades de transporte macroscópico, a definição dos parâmetros topológicos para a classificação dos regimes de escoamento e o processo de binarização dos dados para o treinamento das redes neurais estocásticas.

O Capítulo 4 dedica-se à apresentação e discussão dos resultados. São identificados e caracterizados os regimes de escoamento – bolhas, listras e mistura –, seguidos pela verificação da Lei de Forchheimer e pela construção de diagramas de fases inéditos baseados nos números Capilar e de Forchheimer. Avalia-se ainda a eficácia das Máquinas de Boltzmann em aprender a distribuição estatística dos microestados do fluido e interpreta-se a analogia termodinâmica do sistema.

Por fim, o Capítulo 5 sintetiza e correlaciona as conclusões obtidas a partir das análises hidrodinâmica e termoestatística, apontando perspectivas de trabalhos futuros que possam aprofundar a investigação deste sistema em ambas as frentes.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Para fundamentar adequadamente os métodos desenvolvidos neste trabalho, este capítulo apresenta os conceitos básicos de Mecânica dos Fluidos, reúne as principais definições relacionadas ao escoamento em meios porosos e discute algumas abordagens estatísticas e de aprendizado de máquina que serão posteriormente empregadas.

### 2.1 Fundamentos da Dinâmica dos Fluidos

A Mecânica dos Fluidos é o ramo da Física dedicado ao estudo do comportamento e das interações de líquidos e gases. De modo análogo à Mecânica Clássica, voltada sobretudo ao estudo dos corpos sólidos, essa área pode ser subdividida em duas grandes vertentes: a Estática dos Fluidos, que trata de fluidos em repouso, e a Dinâmica dos Fluidos, que se dedica à análise de fluidos em movimento (Fox *et al.*, 2010).

Os escoamentos apresentam uma complexidade significativamente maior do que os movimentos típicos de corpos sólidos. Isso se deve, em primeiro lugar, à ausência de forma e volume próprios, bem como à elevada mobilidade molecular característica da matéria no estado fluido. A essas propriedades somam-se características internas específicas que tornam a descrição do deslocamento mais intrincada.

As propriedades mais fundamentais incluem a densidade ( $\rho$ ), definida como a massa por unidade de volume; a pressão ( $p$ ), grandeza escalar que representa a força normal exercida por unidade de área sobre uma superfície — seja entre regiões adjacentes do fluido, seja sobre as superfícies de contato com sólidos; a compressibilidade, que descreve a variação da densidade em resposta a mudanças de pressão; e a viscosidade ( $\mu$ ), associada à resistência interna ao escoamento, resultante do atrito entre camadas vizinhas quando submetidas a tensões de cisalhamento.

Todos os fluidos, inclusive os líquidos, apresentam algum grau de compressibilidade, ainda que em muitos casos seja extremamente pequena. De modo análogo, a viscosidade não é, em geral, constante em todas as condições de operação, sobretudo em regimes extremos (Bird *et al.*, 2007). Contudo, como em qualquer investigação científica, a formulação teórica inicial privilegia situações idealizadas e mais simples. Assim, é comum considerar densidade constante e viscosidade independente da velocidade de escoamento, denominando tais fluidos, respectivamente, incompressíveis e newtonianos.

### *Equações Governantes*

As leis fundamentais que descrevem o movimento dos fluidos são expressas pelas equações de Navier-Stokes, formuladas na primeira metade do século XIX (Navier, 1822; Stokes, 1845). Elas representam a conservação da massa e do momento linear. Para um fluido incompressível e newtoniano, essas equações podem ser escritas na forma

$$\begin{cases} \rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top \right) \right] + \mathbf{f}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Nesse contexto,  $\mathbf{u}$  denota o campo vetorial de velocidade do fluido,  $p$  é o campo de pressão,  $\rho$  a densidade e  $\mathbf{f}$  representa forças de corpo externas, como a gravidade.

A primeira equação corresponde à formulação da Segunda Lei de Newton aplicada a um elemento infinitesimal do fluido, estabelecendo a relação entre as forças atuantes e a inércia do escoamento. O lado esquerdo corresponde ao termo inercial, dado pelo produto da densidade de massa  $\rho$  pela aceleração do fluido, a qual é composta pela aceleração local ( $\partial \mathbf{u} / \partial t$ ), associada à variação temporal da velocidade em um ponto fixo do espaço, e pela aceleração convectiva ( $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ ), decorrente do movimento da partícula através de um campo de velocidades espacialmente não uniforme (Landau e Lifshitz, 1987). O lado direito da equação representa a soma das forças (por unidade de volume) que atuam sobre o fluido, incluindo a força associada ao gradiente de pressão ( $-\nabla p$ ), as forças viscosas de atrito interno (que, no caso de viscosidade constante em todo o espaço, assumem a forma  $\mu \nabla^2 \mathbf{u}$ ) e as forças externas, representadas por  $\mathbf{f}$ . A segunda expressão, conhecida como equação da continuidade, designa a conservação da massa.

Essas equações, em geral, não admitem solução analítica fechada, com exceção de alguns casos idealizados e configurações altamente simétricas (Schlichting e Gersten, 2016). Assim, para determinar os campos de velocidade e pressão de um fluido em um domínio espacial de interesse, é necessário recorrer a métodos numéricos: o domínio é discretizado em pequenas unidades de volume, formando uma malha (conjunto de nós e/ou elementos), e as Equações 2.1 são então aproximadas e resolvidas computacionalmente em cada ponto (ou volume/elemento) da discretização (Versteeg e Malalasekera, 2007).

Para iniciar a análise de uma equação de tal complexidade, distinguem-se dois regimes principais: o laminar e o turbulento, caracterizados, respectivamente, pela predominância das forças viscosas e inerciais. A razão entre essas contribuições é usualmente expressa pelo

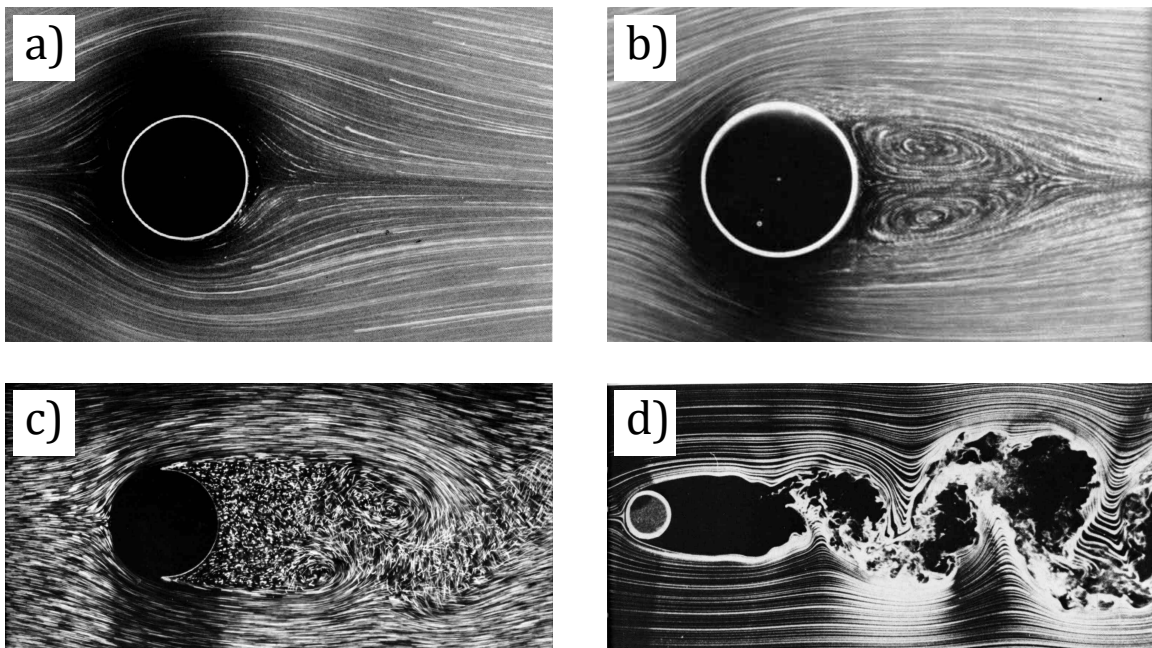
**Número de Reynolds** (Reynolds, 1883), definido como

$$\text{Re} = \frac{\rho V L}{\mu}, \quad (2.2)$$

em que  $V$  representa a velocidade média e  $L$  é um comprimento característico da geometria do domínio. A escolha desse comprimento envolve certo grau de arbitrariedade; entretanto, é essencial que ele seja representativo da escala relevante do problema. No caso de escoamento em dutos, caracterizados por uma área de seção transversal  $A$  e um perímetro molhado  $P$ , adota-se o diâmetro hidráulico  $D_h = 4A/P$ . Já ao redor de obstáculos, como cilindros, esferas ou meios granulares, utiliza-se tipicamente um diâmetro característico associado ao tamanho médio desses corpos.

O valor desse parâmetro influencia diretamente os campos de velocidade e de pressão do escoamento. Quando  $\text{Re}$  é baixo, as forças viscosas dominam, resultando em perfis de velocidade suaves e estáveis no tempo – regime laminar. Para valores elevados, as forças inerciais prevalecem, dando origem a flutuações intensas e mistura contínua entre as camadas do fluido – regime turbulento. Entre esses extremos, identifica-se um regime de transição, no qual características de ambos coexistem.

Figura 1 – Fotografias das linhas de corrente contornando um cilindro em diferentes regimes de escoamento: (a)  $\text{Re} = 1.54$  – Regime Laminar; (b-c)  $\text{Re} = 26$  e  $2000$  – Regime Intermediário; (d)  $\text{Re} = 10000$  – Regime Turbulento



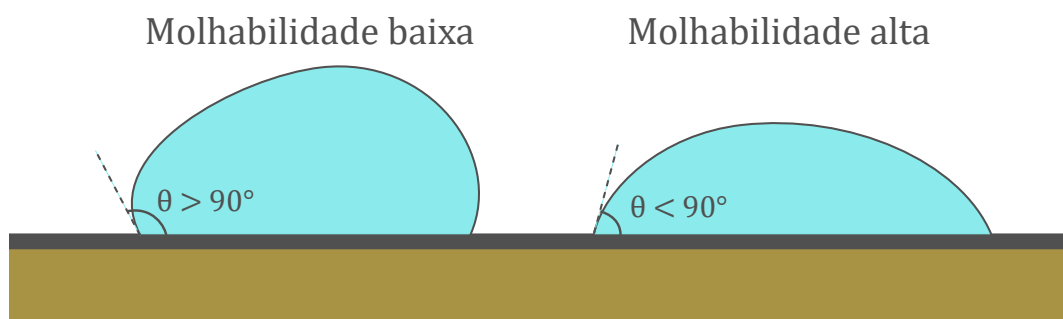
Fonte: (Dyke, 1982)

### ***Escoamento Multifásico***

Denomina-se multifásico o escoamento composto por duas ou mais fases imiscíveis, isto é, que não possuem afinidade química e, portanto, mantêm entre si uma interface bem definida (Guyon *et al.*, 2015). Esse tipo de sistema ocorre em configurações líquido-gás ou líquido-líquido, nas quais a presença dessa fronteira dá origem a fenômenos inexistentes em escoamentos monofásicos. Na região interfacial, manifesta-se uma propriedade fundamental dos líquidos responsável pela manutenção de sua integridade: a tensão superficial ( $\sigma$ ).

Quando a fronteira entre as fases entra em contato com uma superfície sólida, surgem efeitos adicionais decorrentes das interações fluido-sólido, coletivamente descritos pela molhabilidade (Gennes, 1985). Essa grandeza expressa a afinidade relativa de cada fase pela superfície sólida, indicando qual delas tende a se espalhar e aderir preferencialmente ao sólido, deslocando a outra. A molhabilidade é usualmente caracterizada pelo ângulo de contato ( $\theta$ ), definido como o ângulo formado pela fronteira fluida na linha de contato com o sólido.

Figura 2 – Relação entre a magnitude do ângulo de contato ( $\theta$ ) e os regimes de molhabilidade.



Fonte: Autor

A combinação das forças de coesão interfacial, associadas à tensão superficial, e das forças de adesão às superfícies sólidas é responsável pelo fenômeno da ação capilar, no qual um líquido pode escoar através de canais ou poros estreitos mesmo na presença de forças externas que se opõem a esse movimento, como o gravitacional. Esse mecanismo está na base do escoamento bifásico mais clássico em meios porosos: o deslocamento de um gás ou de um líquido com baixa afinidade pela superfície sólida – fase não molhante – por um líquido de maior afinidade com essa superfície – fase molhante.

Nesses tipos de escoamento, além das forças inerciais e viscosas já descritas na Equação (2.1), devem ser consideradas as forças capilares, resultantes das interações interfaciais

entre as fases e entre fluido e sólido. A presença simultânea desses três mecanismos – inércia, viscosidade e tensão superficial – torna necessária a introdução de parâmetros adimensionais adicionais para quantificar sua competição relativa. Dentre os mais relevantes no contexto multifásico destacam-se o Número Capilar, o Número de Weber e uma redefinição apropriada do Número de Reynolds.

O **Número Capilar** (Ca) representa a razão entre as forças viscosas e as associadas à tensão superficial, sendo definido como

$$Ca = \frac{\mu_c V}{\sigma}, \quad (2.3)$$

onde  $V$  é a velocidade característica do escoamento,  $\sigma$  é a tensão superficial entre as fases e  $\mu_c$  é a viscosidade característica do fluido. Valores baixos de Ca indicam a dominância capilar, favorecendo a formação de meniscos e a retenção de fluidos em poros de pequenas dimensões. Valores elevados, por sua vez, sinalizam a predominância das forças viscosas, permitindo que uma fase desloque a outra de forma mais eficiente, superando barreiras capilares.

O **Número de Weber** (We) quantifica a razão entre as contribuições inerciais e a tensão superficial, sendo definido como

$$We = \frac{\rho_c V^2 L}{\sigma}, \quad (2.4)$$

em que  $\rho_c$  é a densidade característica do fluido. Esse número adimensional é particularmente importante na análise da estabilidade das interfaces fluido-fluido, estando diretamente relacionado à deformação, ruptura e fragmentação de gotas ou bolhas em regimes de escoamento com inércia significativa (Probstein, 2005).

Por fim, o **Número de Reynolds** pode ser redefinido no contexto multifásico de modo a incorporar propriedades características do fluido dominante ou de referência, sendo expresso como

$$Re = \frac{\rho_c V L}{\mu_c}. \quad (2.5)$$

Esse parâmetro continua a quantificar a razão entre forças inerciais e viscosas, desempenhando papel central na classificação dos regimes de escoamento, mesmo em sistemas multifásicos.

As densidades e viscosidades características introduzidas nesses números adimensionais podem ser definidas de diferentes maneiras, a depender do contexto físico do problema. Por exemplo, podem ser adotadas as propriedades da fase contínua, da fase de maior fração volumétrica, ou ainda médias ponderadas das propriedades das diferentes fases, resultando em

grandezas efetivas  $\rho_{eff}$  e  $\mu_{eff}$ . A escolha adequada dessas propriedades características é crucial para a correta interpretação dos números adimensionais e para a comparação consistente entre diferentes cenários de escoamento multifásico. Quando densidade e viscosidade são definidas de forma coerente nos números de Reynolds, Capilar e de Weber, é possível estabelecer a relação

$$We = Ca \cdot Re, \quad (2.6)$$

particularmente útil para simplificar a análise e a organização de regimes em escoamentos multifásicos.

## 2.2 Escoamento em Meios Porosos

Um meio poroso é um material sólido que apresenta, em sua estrutura interna, uma rede de vazios interconectados, denominados poros (Sahimi, 2011). Essa microestrutura permite o escoamento de fluidos, frequentemente em regime multifásico, cujos mecanismos de deslocamento são de grande relevância tanto do ponto de vista científico quanto tecnológico. Exemplos típicos incluem solos naturais, rochas fraturadas ou sedimentares, materiais cerâmicos, tecidos biológicos e filtros industriais. O estudo desses sistemas é indispensável em aplicações como a exploração de reservatórios de petróleo e gás, a remediação de solos contaminados e a gestão de recursos hídricos subterrâneos (Bear, 1972), sendo essencial para a otimização de processos e a mitigação de impactos ambientais.

### *Caracterização do Meio*

A caracterização de um meio poroso envolve a descrição de sua estrutura geométrica, que influencia diretamente o escoamento de fluidos em seu interior. Entre as propriedades mais fundamentais destaca-se a porosidade ( $\phi$ ), definida como a fração do volume total do meio poroso ocupada pelos poros. No caso bidimensional, a porosidade é dada pela razão entre a área ocupada pelos poros,  $A_p$ , e a área total do meio,  $A$ ,

$$\phi = \frac{A_p}{A}. \quad (2.7)$$

A porosidade constitui um indicador direto da capacidade de armazenamento de fluido do meio, embora, isoladamente, não seja suficiente para descrever sua capacidade de transporte.

Outra característica essencial é o tamanho médio dos grãos ou dos poros, ou, de forma mais geral, a distribuição de tamanhos dessas estruturas. Embora não se trate de uma propriedade

escalar única, essa distribuição é determinante para a compreensão da heterogeneidade estrutural e de como ela afeta a conectividade dos poros, a tortuosidade dos caminhos preferenciais e a ocorrência de gargalos capilares (Dullien, 2012).

Do ponto de vista computacional, os meios porosos podem ser representados de diversas maneiras, desde geometrias idealizadas – como arranjos regulares ou aleatórios de cilindros sem superposição, modelo adotado neste trabalho – até reconstruções tridimensionais realistas obtidas por tomografia computadorizada (Blunt, 2017). A escolha do nível de detalhe geométrico depende da escala do problema, dos fenômenos de interesse e do grau de complexidade desejado para a simulação.

### *Leis de Resistência ao Fluxo*

Em uma abordagem macroscópica, o transporte em meios porosos pode ser descrito por propriedades médias que caracterizam a resistência do meio à passagem de fluidos. Nesse contexto, em 1856, o engenheiro francês Henry Darcy estabeleceu, a partir de experimentos sobre a filtração de água em colunas de areia, uma relação empírica entre a vazão e o gradiente de pressão imposto ao meio (Darcy, 1856).

Para um escoamento em regime estacionário, a Lei de Darcy pode ser escrita como

$$\nabla p = -\frac{\mu}{k} \mathbf{V}, \quad (2.8)$$

onde  $\nabla p$  representa o gradiente de pressão ao longo da direção do escoamento – por exemplo,  $(dp/dx)\hat{x}$ , caso o fluido escoe horizontalmente –,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica do fluido,  $V$  é a velocidade de Darcy, definida como a vazão volumétrica dividida pela área transversal total do meio, e  $k$  é a permeabilidade, uma propriedade geométrica intrínseca que quantifica a facilidade com que um fluido pode escoar através da sua estrutura porosa.

A Lei de Darcy é válida em regime laminar, no qual os efeitos viscosos predominam. Em regimes de maior velocidade, contudo, os efeitos inerciais tornam-se relevantes e a relação linear passa a subestimar a queda de pressão associada à resistência do meio (Bear, 1972). Os campos de velocidade tornam-se então mais desordenados e instáveis, resultando em um aumento significativo do atrito entre o fluido e a matriz sólida.

Para descrever esses regimes, o engenheiro hidráulico austríaco Philipp Forchheimer propôs, no início do século XX, uma correção empírica à Equação 2.8 (Forchheimer, 1901), adicionando um termo quadrático em velocidade à equação constitutiva. A chamada **Lei de**

**Darcy-Forchheimer** — ou simplesmente **Lei de Forchheimer** — assume a forma

$$\nabla p = -\frac{\mu}{k}\mathbf{V} - \beta\rho V\mathbf{V}, \quad (2.9)$$

onde  $\beta$  é o coeficiente não-darciano, propriedade intrínseca do meio que quantifica a contribuição inercial à resistência ao escoamento (Whitaker, 1996).

A partir dessa equação constitutiva, torna-se possível definir um número adimensional que, embora menos difundido que o Número de Reynolds clássico, quantifica de forma mais direta a competição entre os mecanismos viscoso e inercial. Dividindo o termo quadrático pelo termo linear na Equação 2.9, obtém-se o **Número de Forchheimer** (Ruth e Ma, 1992), definido como

$$Fo = \frac{\beta\rho V^2}{(\mu/k)V} = \frac{\rho V(\beta k)}{\mu}, \quad (2.10)$$

cuja vantagem reside em evitar a escolha, em certa medida arbitrária, de um comprimento característico  $L$ .

De fato, esse número adimensional é formalmente equivalente ao Número de Reynolds caso se adote  $L = \beta k$  como comprimento característico – escolha incomum nas definições tradicionais. Por essa razão, alguns autores argumentam que, no contexto de meios porosos, o Número de Forchheimer pode ser mais apropriado que o de Reynolds para descrever a transição entre regimes e a relevância relativa das forças atuantes (Zeng e Grigg, 2006).

### *Estimativa Teórica de Parâmetros Constitutivos*

Neste tópico, apresentamos uma dedução teórica para os parâmetros constitutivos do meio poroso que aparecem na Equação 2.9. A literatura sobre o tema é extensa, uma vez que as geometrias de meios porosos podem variar consideravelmente. Aqui, restringimo-nos ao tipo de meio poroso utilizado nas simulações deste trabalho, correspondente a um arranjo 2D aleatório de discos não sobrepostos, ou, de forma equivalente, um arranjo 3D aleatório de cilindros paralelos não sobrepostos.

O meio poroso bidimensional considerado consiste na disposição de  $N_{obs}$  obstáculos circulares, de raio  $r_{obs}$ , em um domínio retangular de dimensões  $L_x \times L_y$  (área total  $A$ ) com condições de contorno periódicas. O escoamento é imposto na direção horizontal, da esquerda para a direita. Como os obstáculos não são sobrepostos, a porosidade do meio pode ser escrita como

$$\phi = \frac{A_p}{A} = 1 - \frac{A_{obs}}{A}, \quad (2.11)$$

em que  $A_p$  é a área total ocupada pelos poros e  $A_{obs}$  é a área total ocupada pelos obstáculos. Como  $A_{obs} = N_{obs}\pi r_{obs}^2$ , obtém-se uma expressão direta para o número de obstáculos em função dos parâmetros geométricos do sistema, dada por

$$N_{obs} = \frac{A(1 - \phi)}{\pi r_{obs}^2}. \quad (2.12)$$

A forma teórica mais difundida para estimar a permeabilidade de um meio poroso é a relação de Kozeny-Carman, a qual expressa  $k$  em termos da porosidade e de uma medida geométrica da “superfície específica” do meio (Carman, 1997; Kaviany, 1995). Em sua forma genérica, essa relação pode ser escrita como

$$k = \frac{\phi}{K_{CK} A_s^2}, \quad (2.13)$$

em que  $K_{CK}$  é a constante de Kozeny-Carman e  $A_s$  representa a superfície específica do meio. No problema bidimensional em questão,  $A_s$  deve ser interpretado como o perímetro total dos obstáculos dividido pela área de poros ( $A_p = \phi A$ ), isto é,

$$A_s = \frac{N_{obs} 2\pi r_{obs}}{\phi A}.$$

Para obstáculos circulares não sobrepostos, utilizar a relação geométrica previamente obtida para  $N_{obs}$  (Eq. 2.12) resulta em

$$A_s = \frac{(1 - \phi)}{\phi} \frac{2}{r_{obs}}. \quad (2.14)$$

Substituindo-se essa expressão em (2.13), obtém-se uma estimativa para a permeabilidade em função de  $\phi$  e  $r_{obs}$ , dada por

$$k = \frac{\phi^3}{4K_{CK}(1 - \phi)^2} r_{obs}^2. \quad (2.15)$$

A constante  $K_{CK}$  é frequentemente reportada como da ordem de 5 para meios do tipo *packed beds* (leitos empacotados), mas seu valor efetivo depende da geometria e da conectividade do espaço poroso. Para o meio aqui considerado, o valor apropriado de  $K_{CK}$  ainda é tema de discussão na literatura, com argumentos por vezes divergentes. Uma primeira aproximação, embora discutível, consiste em assumir  $K_{CK} \sim 5$  como estimativa inicial, em virtude do uso consolidado em problemas correlatos e como valor de comparação.

No que se refere ao coeficiente  $\beta$  associado ao termo inercial na lei de Forchheimer, adotaremos uma estimativa baseada no somatório das forças de arrasto exercidas pelos obstáculos

sobre o escoamento, abordagem que possui precedente na literatura (Koch e Ladd, 1997). A força de arrasto hidrodinâmica sobre um corpo imerso em um fluido de densidade  $\rho$  em regime inercial, sujeito a uma velocidade relativa  $u$ , é comumente expressa por

$$F_d = \frac{1}{2} \rho u^2 C_d A_{\perp}, \quad (2.16)$$

em que  $C_d$  é o coeficiente de arrasto (dependente da geometria do corpo e do regime de escoamento) e  $A_{\perp}$  é a área de seção transversal perpendicular à direção do fluxo (Hoerner, 1965).

No presente problema bidimensional, considerando obstáculos circulares e uma formulação por unidade de profundidade,  $A_{\perp}$  deve ser interpretado como um comprimento transversal efetivo. Para um círculo de raio  $r_{obs}$ , tem-se  $A_{\perp} \equiv 2r_{obs}$ , e a expressão de arrasto pode ser reescrita como

$$F_d = \frac{1}{2} \rho u^2 C_d (2r_{obs}). \quad (2.17)$$

A velocidade  $u$  deve ser entendida como a velocidade característica do fluido na escala dos poros (isto é, a velocidade intersticial), a qual se relaciona com a velocidade média macroscópica  $V$ , frequentemente denominada velocidade superficial ou velocidade de Darcy, por meio da porosidade. Em meios porosos, uma aproximação amplamente utilizada é (Whitaker, 1996; Kaviany, 1995)

$$u = \frac{V}{\phi}.$$

A partir deste ponto, adotamos a hipótese de uma porosidade suficientemente alta para que a força de arrasto total do meio possa ser aproximada pela soma das contribuições individuais. Dessa forma, usando a expressão para  $N_{obs}$  (Eq. 2.12) e a força de arrasto sobre um obstáculo 2.17, o arrasto total vale

$$F_{tot} = N_{obs} \left[ \frac{1}{2} \rho \left( \frac{V}{\phi} \right)^2 C_d (2r_{obs}) \right] = \left( \frac{A(1-\phi)}{\pi r_{obs}^2} \right) \rho \left( \frac{V}{\phi} \right)^2 C_d r_{obs}.$$

Simplificando, obtém-se

$$F_{tot} = A \frac{C_d}{\pi r_{obs}} \frac{1-\phi}{\phi^2} \rho V^2. \quad (2.18)$$

Essa é a força total exercida pelo fluido sobre os obstáculos, que é igual em módulo à força resistiva exercida pelo meio sobre o fluido. Para relacioná-la à queda de pressão

macroscópica ao longo do comprimento  $L_x$ , deve-se considerar que essa força está sendo atuada na região ocupada pelo fluido, que é justamente a área dos poros, isto é,

$$\frac{\Delta P}{L_x} = \frac{F_{tot}}{\phi A} = \frac{C_d}{\pi r_{obs}} \frac{1 - \phi}{\phi^3} \rho V^2. \quad (2.19)$$

Comparando esse gradiente de pressão ao termo inercial da Equação de Forchheimer (Eq. 2.9), o coeficiente não-darciano assume a forma

$$\beta = \frac{C_d}{\pi r_{obs}} \frac{1 - \phi}{\phi^3}. \quad (2.20)$$

Para um cilindro isolado em escoamento transversal, no regime inercial que compreende o intervalo das simulações ( $Re \sim 10^2 - 10^3$ ), o coeficiente de arrasto apresenta um comportamento relativamente estável, oscilando em torno de  $C_d \approx 1.2$  (Hoerner, 1965). Embora a presença de obstáculos vizinhos possa alterar este valor, manteremos essa estimativa teórica como referência, verificando sua compatibilidade com os resultados numéricos.

### 2.3 Abordagem Estatística e Aprendizado de Máquina

#### *Física Estatística de Escoamentos Bifásicos*

Diante da complexidade das configurações espaciais dos escoamentos multifásicos em escala microscópica – mais precisamente na escala dos poros –, surgem tentativas recorrentes de estabelecer uma analogia termodinâmica para esses sistemas (Edwards e Oakeshott, 1989; Valavanides *et al.*, 1998; Tallakstad *et al.*, 2009b). O objetivo dessas abordagens é relacionar as configurações complexas e variadas do escoamento a parâmetros macroscópicos definidos na escala do meio poroso, permitindo uma descrição estatística do comportamento coletivo do sistema.

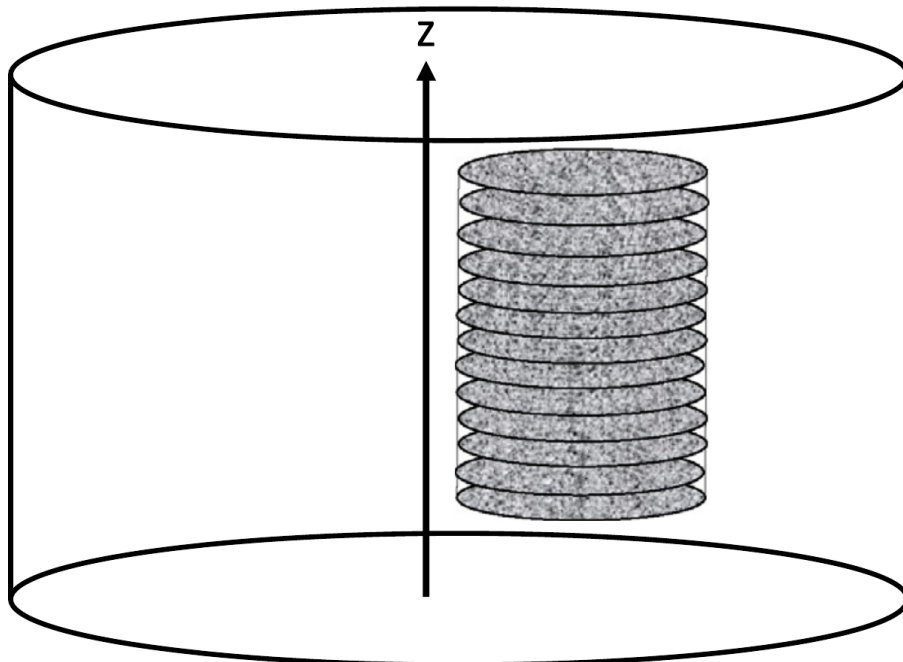
Essas análises concentram-se, em geral, nos estados estacionários do escoamento, caracterizados por flutuações da velocidade média em torno de um valor constante ao longo do tempo. Um estudo recente de Sales *et al.* (2022) demonstrou que, em regimes dominados por pequenas gotas e dedos viscosos (*droplets and fingers*) – associados a valores elevados do número capilar ( $Ca$ ) – tais estados estacionários satisfazem as relações de reciprocidade de Onsager no que se refere às séries temporais das velocidades das fases. Em particular, observou-se que a função de correlação cruzada entre as velocidades das duas fases é simétrica no tempo, isto é,  $C_{12}(t) = C_{21}(t)$ . Esse resultado sugere que, ao menos no nível estatístico das flutuações, o

sistema exibe uma forma de reversibilidade temporal, apesar de se tratar de um escoamento dissipativo e fora do equilíbrio termodinâmico estrito.

Em um estudo contemporâneo, Hansen *et al.* (2023) propuseram um formalismo pseudo-termodinâmico baseado em um ensemble canônico de **Elementos Representativos de Área** – *Representative Elementary Area (REA)*. Cada *REA* corresponde a uma fatia circular de uma seção transversal, caracterizada pelas variáveis macroscópicas de vazão ( $Q_p$ ), área ocupada pelos poros ( $A_p$ ) e área ocupada pela fase molhante ( $A_w$ ). Os *REA* são definidos em uma escala intermediária: grande o suficiente para que as médias estatísticas sejam estáveis, e pequeno o suficiente para resolver variações espaciais na escala macroscópica do meio.

Além disso, e de particular relevância para o presente trabalho, esse estudo estabelece um precedente para **tratar as seções transversais do meio poroso como elementos de um ensemble estatístico**, descrito em termos dessas mesmas variáveis, reforçando a viabilidade de uma abordagem estatística para a caracterização de escoamentos bifásicos em meios porosos.

Figura 3 – Sequência de Elementos Representativos de Área na direção do escoamento  $z$ , interpretados como amostras independentes de um ensemble canônico. Esse empilhamento constitui a definição operacional de um tubo.



Fonte: (Hansen *et al.*, 2023)

## ***Reconhecimento de Padrões Não Supervisionado***

Os escoamentos bifásicos, conforme discutido anteriormente, tendem a se auto-organizar em regimes distintos após atingirem estados estatisticamente estacionários. Tais regimes são amplamente reportados na literatura, particularmente em estudos envolvendo microtubos e meios confinados (Qian *et al.*, 2019), e incluem, de forma geral, configurações caracterizadas por **bolhas** (dispersas ou aprisionadas), **listras** (canais contínuos das fases intercalados) e **misturas**, nas quais as fases se encontram fortemente entrelaçadas.

Nesse contexto, surge o desafio da classificação objetiva desses regimes. Sob a hipótese de que existem parâmetros de natureza espacial, dinâmica ou topológica capazes de discriminar sistematicamente as distintas situações físicas, o problema torna-se naturalmente adequado ao uso de técnicas de aprendizado de máquina não supervisionado. O objetivo dessa abordagem é identificar e caracterizar padrões recorrentes em conjuntos de dados não rotulados, sem a imposição prévia de classes subjetivas.

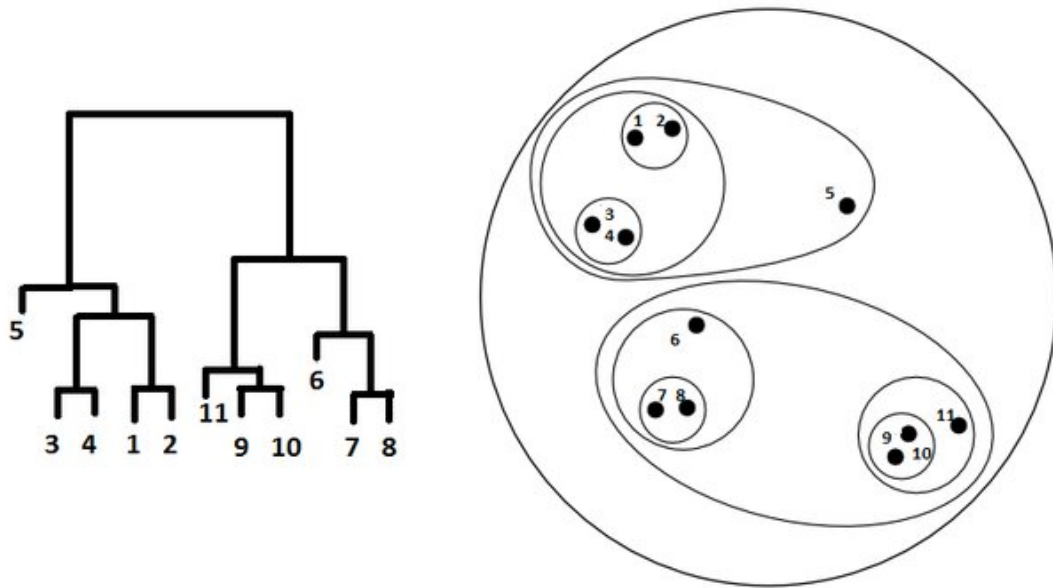
O método que será empregado neste trabalho chama-se **Análise de Agrupamento Hierárquica** (*Hierarchical Cluster Analysis (HCA)*). Este algoritmo tem por objetivo a construção de uma hierarquia de grupos a partir de um conjunto de  $N$  objetos a serem classificados, identificados pelos índices  $\{1, 2, 3, \dots, N\}$ , onde cada objeto possui um número  $n$  de parâmetros característicos. Para assegurar que todas as variáveis contribuam igualmente para o cálculo das distâncias Euclidianas, os dados são previamente normalizados utilizando a padronização *Z-score* (Han *et al.*, 2011). O valor padronizado  $z_{ij}$  do objeto  $i$  referente ao parâmetro  $j$  é dado por

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{Dp_j}, \quad (2.21)$$

em que  $x_{ij}$  é o valor original,  $\bar{x}_j$  é a média do parâmetro  $j$ , e  $Dp_j$  é o seu desvio padrão.

Dentre os diversos critérios de aglomeração baseados em distâncias Euclidianas, adotamos o método de *Ward* (*Ward's linkage*), que busca minimizar a variância total intra-cluster a cada passo da fusão (Ward, 1963). O resultado do agrupamento é representado visualmente por um Dendrograma (Figura 4), no qual a altura das conexões verticais indica a distância (ou dissimilaridade) em que dois grupos foram unidos. Fusões em alturas menores indicam alta similaridade entre os objetos, enquanto uniões em alturas maiores denotam maior heterogeneidade. Um corte horizontal no dendrograma define uma partição específica do sistema em  $K$  grupos distintos.

Figura 4 – Aplicação da Clusterização Hierárquica. Esquerda: Dendrograma representando as distâncias euclidianas de aglomeração. Direita: Visualização esquemática dos agrupamentos resultantes.



Fonte: (Kaur e Deep, 2019)

Para determinar o número ideal de clusters, empregamos o **Coefficiente de Silhueta** (*Silhouette*), uma métrica robusta que avalia a coesão e a separação dos agrupamentos (Rousseeuw, 1987). Para um dado objeto  $i$  pertencente a um cluster  $C$ , o coeficiente  $S(i)$  é definido como

$$S(i) = \frac{b(i) - a(i)}{\max\{a(i), b(i)\}}, \quad (2.22)$$

em que  $a(i)$  é a distância média entre  $i$  e todos os outros pontos do mesmo cluster  $C$ , e  $b(i)$  é o menor valor entre as distâncias de  $i$  aos pontos de cada um dos demais clusters.

O coeficiente varia no intervalo  $[-1, 1]$ . Valores próximos de  $+1$  indicam que o objeto está bem alocado e longe dos clusters vizinhos. Valores próximos de  $0$  indicam que o objeto está na fronteira de decisão entre dois clusters, e valores negativos sugerem que o objeto pode ter sido alocado ao grupo errado. A média global dos valores  $S(i)$  de todos os objetos fornece um critério quantitativo para a qualidade da clusterização em  $K$  grupos.

### **Modelos Gerativos Baseados em Energia**

Explorando a analogia termodinâmica para escoamentos bifásicos, será estabelecido no Capítulo 3 um mapeamento entre a distribuição de fases no meio poroso e um sistema de spins, através de um processo de discretização. Para inferir os parâmetros do modelo a partir de

dados observados, utilizamos uma classe de redes neurais estocásticas conhecidas como Máquina de Boltzmann (MB) (Ackley *et al.*, 1985), seguindo o precedente estabelecido por Bialek (2012), aplicado a redes de neurônios (Schneidman *et al.*, 2006; Tkačik *et al.*, 2014; Tkačik *et al.*, 2015).

As Máquinas de Boltzmann são modelos gerativos baseados em energia que atribuem a cada configuração  $\mathbf{s}$  de spins uma probabilidade dada pela distribuição de Boltzmann

$$P(\mathbf{s}) = \frac{e^{-H(\mathbf{s})/T}}{\sum_{\mathbf{s}} e^{-H(\mathbf{s})/T}}, \quad (2.23)$$

adotando unidades naturais onde  $k_B = 1$ . O Hamiltoniano considerado incorpora interações de pares e campos locais,

$$H(\mathbf{s}) = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i, \quad (2.24)$$

onde os acoplamentos  $J_{ij}$  e os campos  $h_i$  são parâmetros a serem inferidos. Esse Hamiltoniano de pares corresponde ao modelo de Sherrington-Kirkpatrick (SK) (Sherrington e Kirkpatrick, 1975), originalmente proposto como uma abordagem de campo médio para sistemas magnéticos desordenados (*spin glasses*), e equivale ao modelo de máxima entropia compatível com os momentos de primeira e segunda ordem dos dados (Schneidman *et al.*, 2006). Sem perda de generalidade, fixamos  $\beta = 1/T = 1$ , de modo que a escala de temperatura é absorvida na magnitude dos parâmetros aprendidos.

A complexidade introduzida pelo elevado número de graus de liberdade e pela desordem dos acoplamentos resulta em uma paisagem de energia rugosa, repleta de mínimos locais, dificultando a transição do sistema entre estados de equilíbrio localmente estáveis (Parisi, 1979; Mézard *et al.*, 1987).

Dado um *ensemble* de  $M$  configurações observadas, o objetivo é ajustar os coeficientes  $h_i$  e  $J_{ij}$  de modo que o modelo reproduza os momentos de primeira e segunda ordem

$$\begin{aligned} m_i^{obs} &= \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M s_i^{(m)}, \\ c_{ij}^{obs} &= \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M s_i^{(m)} s_j^{(m)}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

O processo de aprendizado da máquina busca ajustar os parâmetros aos dados observáveis, o que equivale a maximizar a *Verossimilhança* ( $\mathcal{L}$ ) do modelo. Em termos qualitativos, essa função quantifica a probabilidade de que os dados observados tenham sido gerados pelo nosso modelo estocástico.

Uma propriedade fundamental das Máquinas de Boltzmann é a concavidade da função de log-verossimilhança. Diferente das arquiteturas com unidades ocultas discutidas em Ackley *et al.* (1985) – que sofrem com múltiplos mínimos locais –, a versão totalmente conectada e visível (equivalente ao modelo SK) possui uma superfície de verossimilhança com curvatura suave e um único máximo global. Isso garante que algoritmos de otimização baseados em gradiente sempre caminhem na direção da solução ótima, sem risco de estagnação em soluções falsas (demonstração detalhada no Apêndice A).

A acessibilidade computacional a essa solução ótima varia drasticamente com o número de spins  $n$  do sistema. Para redes de pequeno porte ( $n \leq 24$ ), o espaço de estados – contendo até  $2^{24} \approx 1.6 \times 10^7$  configurações – permanece tratável, permitindo a varredura completa de todos os microestados, extraindo a probabilidade de cada um. Nesses casos, o cálculo da função de partição e dos gradientes é exato, e a solução única é encontrada deterministicamente.

Contudo, para sistemas maiores ( $n \geq 25$ ), o crescimento exponencial de  $2^n$  implica uma vasta quantidade de microestados, tornando a soma de Boltzmann analiticamente inviável. Para contornar essa barreira em altas dimensões, a computação exata é substituída por uma estimativa estocástica via métodos de Monte Carlo em Cadeias de Markov (MCMC). Em vez de uma enumeração total, utiliza-se a amostragem por importância (*Importance Sampling*) empregando o algoritmo de Banho Térmico (*Heat Bath* ou *Gibbs Sampling*) (Geman e Geman, 1984). Nesta abordagem, a atualização dos spins ocorre pela reamostragem direta do estado  $s_i$  com base na probabilidade condicional local induzida pelo campo efetivo de seus vizinhos, permitindo extrair um subconjunto representativo de configurações de equilíbrio para estimar as médias do modelo. Embora a unicidade matemática da solução persista, a convergência numérica torna-se estocástica e sujeita a ruídos.

Na implementação computacional das regras de atualização, utilizamos o método de Gradiente Ascendente com adição de um termo de momento (*momentum*)  $\alpha$  (Rumelhart *et al.*, 1986) para acelerar a convergência e mitigar oscilações em regiões de alta curvatura da superfície de verossimilhança. As equações de atualização são

$$\begin{aligned} h_i(t) &= h_i(t-1) + \eta_h(t) \left[ m_i^{obs} - m_i^*(t-1) \right] + \alpha_h \Delta h_i(t-1), \\ J_{ij}(t) &= J_{ij}(t-1) + \eta_J(t) \left[ c_{ij}^{obs} - c_{ij}^*(t-1) \right] + \alpha_J \Delta J_{ij}(t-1), \end{aligned} \tag{2.26}$$

nas quais  $\Delta h$  e  $\Delta J$  representam as variações ocorridas no passo anterior e os parâmetros  $\eta(t)$  (taxa de aprendizado) são ajustados dinamicamente durante o treinamento, reduzindo-se conforme a

norma do gradiente diminui.

Com o aumento do número de iterações, espera-se que as médias do modelo se igualem às médias observadas

$$\begin{aligned}\lim_{t \rightarrow \infty} m_i^*(t) &= m_i^{mod} \approx m_i^{obs}, \\ \lim_{t \rightarrow \infty} c_{ij}^*(t) &= c_{ij}^{mod} \approx c_{ij}^{obs}.\end{aligned}\tag{2.27}$$

Atingida essa condição, o algoritmo terá aprendido o Hamiltoniano  $H(\mathbf{s})$  que teria gerado os dados observáveis segundo a probabilidade de Boltzmann.

Uma estratégia costumeira para validar o aprendizado e investigar se as correlações de ordem superior são redutíveis a interações de pares consiste em confrontar os momentos de terceira ordem gerados pelo modelo com as médias da amostra. A concordância entre esses valores indicaria que a complexidade dos dados é adequadamente capturada pelas interações de segunda ordem. Por outro lado, divergências significativas nos tripletos revelam a presença de correlações de ordem superior irredutíveis, sugerindo que o sistema possui interações efetivas de muitos corpos não contempladas pelo Hamiltoniano de pares do modelo SK.

Neste trabalho, utilizamos a média dos terceiros momentos (tripleto), dada por

$$\begin{aligned}T_{ijk}^{obs} &= \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M (s_i s_j s_k), \\ T_{ijk}^{mod} &= \langle s_i s_j s_k \rangle.\end{aligned}\tag{2.28}$$

### 3 MÉTODOS

#### 3.1 Simulação Numérica

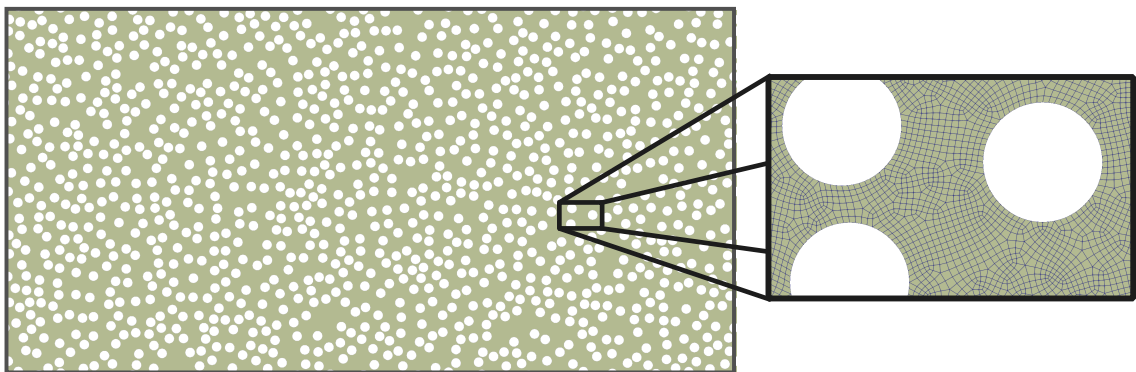
Neste trabalho, empregamos simulações baseadas em Dinâmica dos Fluidos Computacional (*CFD*) para resolver as equações governantes do escoamento em geometrias representativas de meios porosos. A simulação numérica constitui uma ferramenta central para os objetivos deste estudo, pois permite um elevado grau de controle sobre os diversos parâmetros do sistema, como propriedades dos fluidos, condições de contorno e características geométricas do meio poroso, possibilitando a análise sistemática de diferentes regimes de escoamento.

##### *Geometria do Meio Poroso*

O sistema computacional, modelado no software ANSYS Fluent (ANSYS Inc., 2023), consiste em um domínio bidimensional de comprimento  $L_x$  e altura  $L_y$ , no qual são impostas condições de contorno periódicas. O meio poroso é representado por um arranjo aleatório de cilindros sem superposição (Sahimi, 2011; Koch e Ladd, 1997), no qual  $N_{obs}$  obstáculos circulares de raio  $r_{obs}$  são distribuídos aleatoriamente no interior do domínio até que se atinja uma porosidade prescrita  $\phi$ . A sobreposição entre obstáculos não é permitida, o que simplifica a caracterização geométrica do meio.

O sistema escolhido tem dimensões  $150 \text{ mm} \times 75 \text{ mm}$  ( $L_x \times L_y$ ), e foi gerado com  $N_{obs} = 1064$  obstáculos de raio  $r_{obs} = 1 \text{ mm}$ , de forma que a porosidade tenha valor  $\phi = 0.703$ .

Figura 5 – Geometria utilizada nas simulações e discretização da região dos poros



Fonte: Autor

Na região ocupada pelos poros  $A_p = A - A_{obs}$  foi introduzido um fluido bifásico newtoniano e incompressível. As fases são denominadas *fase 1* e *fase 2*, com densidades  $\rho_1$

e  $\rho_2$ , e viscosidades  $\mu_1$  e  $\mu_2$ , respectivamente. Um gradiente de pressão foi imposto entre as extremidades do domínio, de forma que o fluido escoar da esquerda para a direita.

### **Solução Numérica**

Para resolver as equações de movimento do sistema utilizamos o formalismo Volume de fluido – *Volume of Fluid (VoF)* – (Hirt e Nichols, 1981) que é uma adaptação da Equação de Navier Stokes para fluidos multifásicos. Neste método, em vez de resolver uma equação para cada fluido separadamente, considera-se um único fluido de densidade e viscosidade variáveis em cada ponto, definidas como médias ponderadas das propriedades de cada fase pela sua fração volumétrica local. Assim, a densidade e a viscosidade do fluido são dadas por

$$\left. \begin{aligned} \rho(\mathbf{x}) &= \rho_1 \cdot s(\mathbf{x}) + \rho_2 \cdot (1 - s(\mathbf{x})) \\ \mu(\mathbf{x}) &= \mu_1 \cdot s(\mathbf{x}) + \mu_2 \cdot (1 - s(\mathbf{x})) \end{aligned} \right\}, \quad (3.1)$$

em que  $s(\mathbf{x}) \in [0, 1]$  denota a fração de volume da fase 1 em dada posição  $\mathbf{x}$  da malha. A fração da outra fase deve ser complementar à primeira ( $1 - s(\mathbf{x})$ ).

Com essas definições, a Equação de Navier-Stokes para o escoamento multifásico pode ser reescrita como

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^\top \right) \right] + \sigma \kappa \nabla s, \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0.$$

O termo  $\sigma \kappa \nabla s$  – no qual  $\sigma$  é a tensão superficial entre as fases – é tratado através do método *Continuum Surface Force (CSF)* (Brackbill *et al.*, 1992), onde a curvatura  $\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}$  é calculada com base no vetor normal unitário da interface  $\mathbf{n} = \nabla s / |\nabla s|$ . Regiões de alto gradiente de  $s(\mathbf{x})$  estão justamente na superfície de transição entre os líquidos e, portanto, são afetadas pela força capilar. Além disso, a evolução da interface entre os fluidos é governada pela equação de advecção da fração de volume

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla s = 0. \quad (3.3)$$

O escoamento, portanto, é resolvido pela solução dessas equações em cada ponto do espaço discretizado por uma malha computacional – como visto na Figura 5 – a cada instante de tempo. O passo temporal  $\Delta t$  foi ajustado para manter o número de Courant global abaixo da unidade, garantindo estabilidade numérica (Anderson, 1995).

Nesta mesma estrutura espacial (Figura 5), executamos várias simulações de escoamento bifásico. Para isolar os efeitos das forças capilares e viscosas, um conjunto de propriedades físicas foi mantido constante em todos os cenários, conforme detalhado na Tabela 1.

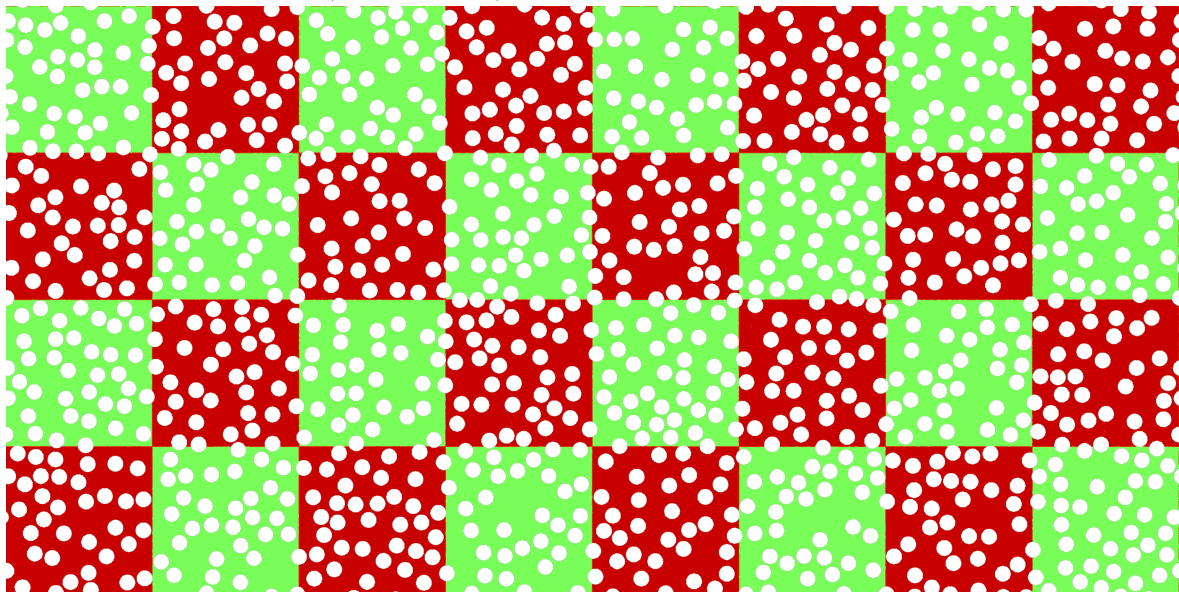
Tabela 1 – Parâmetros físicos e geométricos fixos em todas as simulações

Parâmetro	Valor / Condição
Densidade ( $\rho = \rho_1 = \rho_2$ )	1000 kg/m <sup>3</sup>
Viscosidade da Fase 1 ( $\mu_1$ )	0.001 kg/(m · s)
Viscosidade da Fase 2 ( $\mu_2$ )	0.002 kg/(m · s)
Saturação da Fase 1 ( $S_1$ )	0.5 ( $S_1 = S_2$ )
Ângulo de Contato ( $\theta$ )	90° (Molhabilidade neutra)

Fonte: Elaborada pelo autor.

O estado inicial é também idêntico para todos os casos, caracterizando-se por uma configuração tipo “xadrez”, com o objetivo de maximizar a interação interfacial inicial e reduzir o tempo de transiente necessário para atingir o estado estatisticamente estacionário.

Figura 6 – Configuração inicial das simulações. A fase 1 (menos viscosa) está representada em vermelho, e a fase 2 (mais viscosa) em verde.



Fonte: Autor

Nota: Este padrão de cores será mantido ao longo do trabalho.

Em contrapartida, a **tensão superficial**  $\sigma$  e o **gradiente de pressão**  $\nabla p$  foram sistematicamente variados ao longo de múltiplas ordens de magnitude. O objetivo dessa varredura, apresentada na Tabela 2, é analisar regimes de escoamento dominados distintamente por forças viscosas, capilares e inerciais.

Tabela 2 – Valores escolhidos para os parâmetros variáveis, totalizando 52 casos

$\sigma$ (N/m)	$\nabla p$ (Pa/m)
0.0	0.5 – 1.0 – 10.0 – 50.0 – 100.0 – 500.0 – 1000.0 – 5000.0 – 10000.0
$10^{-6}$	0.5 – 1.0 – 2.0 – 5.0 – 10.0 – 20.0 – 50.0
$10^{-5}$	5.0 – 10.0 – 20.0 – 50.0 – 100.0
$10^{-4}$	10.0 – 20.0 – 50.0 – 80.0 – 100.0 – 500.0 – 1000.0 – 2000.0 – 5000.0 – 10000.0
$10^{-3}$	50.0 – 100.0 – 500.0 – 600.0 – 800.0 – 1000.0 – 2000.0 – 5000.0 – 10000.0 – 20000.0
$10^{-2}$	200.0 – 500.0 – 1000.0 – 5000.0 – 10000.0 – 20000.0
$10^{-1}$	2000.0 – 5000.0 – 10000.0 – 20000.0 – 50000.0

Fonte: Elaborada pelo autor.

### 3.2 Transporte Macroscópico

A partir do campo de velocidades  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ , calculado numericamente na região dos poros, obtemos a velocidade média intersticial instantânea na direção do escoamento ( $x$ )

$$\bar{u}(t) = \frac{1}{\Omega_f} \int_{\Omega_f} u_x(\mathbf{x}, t) d\Omega, \quad (3.4)$$

onde  $\Omega_f$  é o volume do domínio preenchido pelo fluido.

Após um transiente inicial ( $t = t_0$ ), a série temporal  $\bar{u}(t)$  atinge um regime estatisticamente estacionário. Calculamos, então, a média temporal da velocidade intersticial neste regime

$$v = \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \bar{u}(t) dt, \quad (3.5)$$

onde  $\tau$  é o intervalo temporal de amostragem.

Por fim, para a análise de transporte macroscópico e aplicação da Lei de Forchheimer, convertemos este valor para a velocidade superficial, ou velocidade de Darcy ( $V$ ). Esta é obtida multiplicando a velocidade intersticial média pela porosidade ( $\phi$ ) do meio

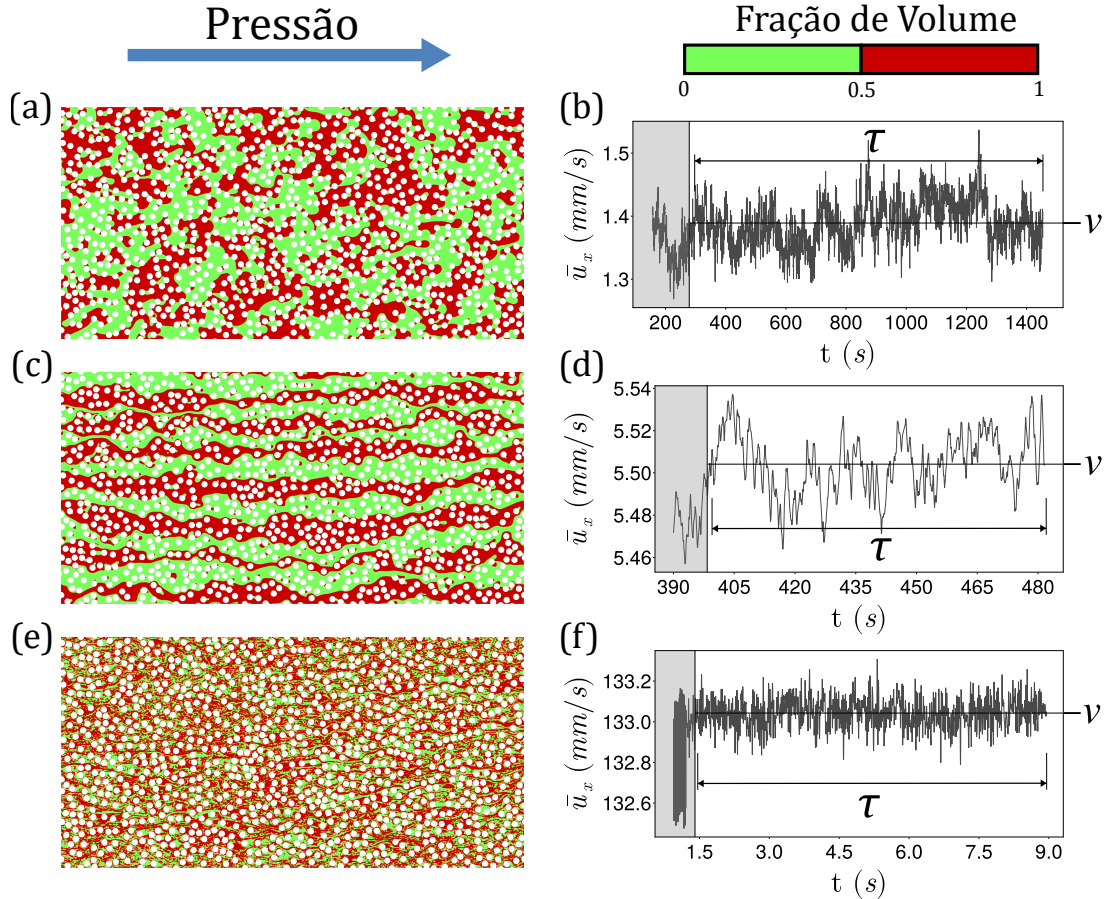
$$V = \phi \cdot v. \quad (3.6)$$

A partir das velocidades de Darcy  $V$  obtidas, podemos construir a curva característica de transporte macroscópico ( $\nabla p \times V$ ), a fim de verificar a concordância dos dados com a Lei de Forchheimer (Equação 2.9) e extrair os coeficientes fenomenológicos do meio.

Com o objetivo de produzir um diagrama de fases, calculamos os parâmetros adimensionais das forças do sistema,  $Ca$  e  $Fo$ , utilizando este último como alternativa ao Número de Reynolds, conforme discutido na Seção 2.2. Definimos também um Número de Weber modificado que se relaciona com os parâmetros escolhidos, dado por

$$We^* = Ca \cdot Fo. \quad (3.7)$$

Figura 7 – Morfologias estacionárias e séries temporais de velocidade. Identificação inicial dos regimes por inspeção visual: (a-b) Regime de Bolhas; (c-d) Regime de Listras; (e-f) Regime de Mistura. Os painéis à direita indicam o intervalo estacionário  $\tau$  utilizado para o cálculo da velocidade média  $\bar{u}$ .



Fonte: Autor

A densidade característica foi definida naturalmente como a própria densidade do fluido ( $\rho_c = \rho$ ). Para a viscosidade característica, embora existam definições alternativas na literatura (Bedeaux, 1983), adotamos a viscosidade de mistura ponderada pela saturação, dada por  $\mu_c = S_1\mu_1 + (1 - S_1)\mu_2$ . Considerando a equipartição das fases ( $S_1 = 0.5$ ), essa expressão simplifica-se para a média aritmética, resultando nos valores de referência

$$\begin{cases} \rho_c = 1000 \text{ kg/m}^3, \\ \mu_c = \frac{\mu_1 + \mu_2}{2} = 0.0015 \text{ kg/(m} \cdot \text{s)}. \end{cases} \quad (3.8)$$

Com isso, os parâmetros são

$$\text{Ca} = \frac{\mu_c V}{\sigma}, \quad \text{Fo} = \frac{\rho(\beta k)V}{\mu_c}, \quad \text{We}^* = \frac{\rho(\beta k)V^2}{\sigma}, \quad (3.9)$$

tendo  $\beta$  e  $k$  sido extraídos do gráfico de transporte macroscópico.

### 3.3 Agrupamento dos Regimes de Escoamento

Para realizar a segregação dos regimes via Clusterização Hierárquica, é necessário definir parâmetros quantitativos que sirvam como métrica de similaridade. A extração desses descritores foi realizada a partir do processamento de imagens das frações de fluido obtidas nas simulações. Seleccionamos um conjunto de  $N_{img}$  imagens no estado estacionário, separadas temporalmente por um intervalo  $\Delta t \approx \tau/8$  (onde  $\tau$  é o período definido na Seção 3.2), visando uma maior independência estatística das amostras ao minimizar correlações temporais.

A partir da análise morfológica da fase fluida, seleccionamos três parâmetros topológicos e geométricos prioritários, cada um capturando uma dinâmica de força predominante. A identificação das estruturas conexas foi realizada através de algoritmos de rotulação de componentes conectados – *Connected-component labeling* (CCL) –, baseados no método de Hoshen-Kopelman (Hoshen e Kopelman, 1976).

O primeiro é o **número médio de clusters percolantes** ( $\langle N_p \rangle$ ), que contabiliza as estruturas que atravessam o domínio horizontalmente formando canais contínuos. Observamos que este parâmetro é particularmente elevado em regimes de escoamento estratificado (listras), onde as forças viscosas são consideráveis o suficiente para estabilizar a interface longitudinalmente; nos demais casos,  $\langle N_p \rangle$  tende a zero.

O segundo parâmetro é o **número médio total de clusters** ( $\langle N \rangle$ ), que atua como indicador do grau de fragmentação do sistema. Este valor atinge seu pico nos regimes de Mistura, onde as forças inerciais tornam-se predominantes. Neste cenário, a energia cinética do escoamento é suficiente para superar os mecanismos de estabilização da interface, sejam eles a coesão capilar (em casos de alta tensão superficial) ou a ordenação laminar viscosa (que, em velocidades menores, daria origem às listras contínuas), resultando na ruptura do fluido em múltiplas estruturas pequenas e dispersas.

Por fim, a caracterização geométrica é dada pela **média da razão área-perímetro dos clusters** ( $\langle R \rangle$ ), ilustrados na Figura 8. A interpretação física deste parâmetro sugere valores mais altos no regime de bolhas (baixo Número Capilar). Isso ocorre porque, sob forte influência da tensão superficial, os clusters tendem a ser menos numerosos e possuem interfaces suaves e globulares (reduzindo o perímetro relativo à área), em contraste com as formas sinuosas, alongadas e de alto perímetro características dos regimes dominados pela inércia.

Considerando a  $j$ -ésima imagem do conjunto, denotamos por  $N^{(j)}$  o número total de clusters e por  $N_p^{(j)}$  o número de clusters percolantes nessa imagem.

As médias globais desses parâmetros são

$$\langle N \rangle = \frac{1}{N_{img}} \sum_{j=1}^{N_{img}} N^{(j)},$$

$$\langle N_p \rangle = \frac{1}{N_{img}} \sum_{j=1}^{N_{img}} N_p^{(j)}.$$
(3.10)

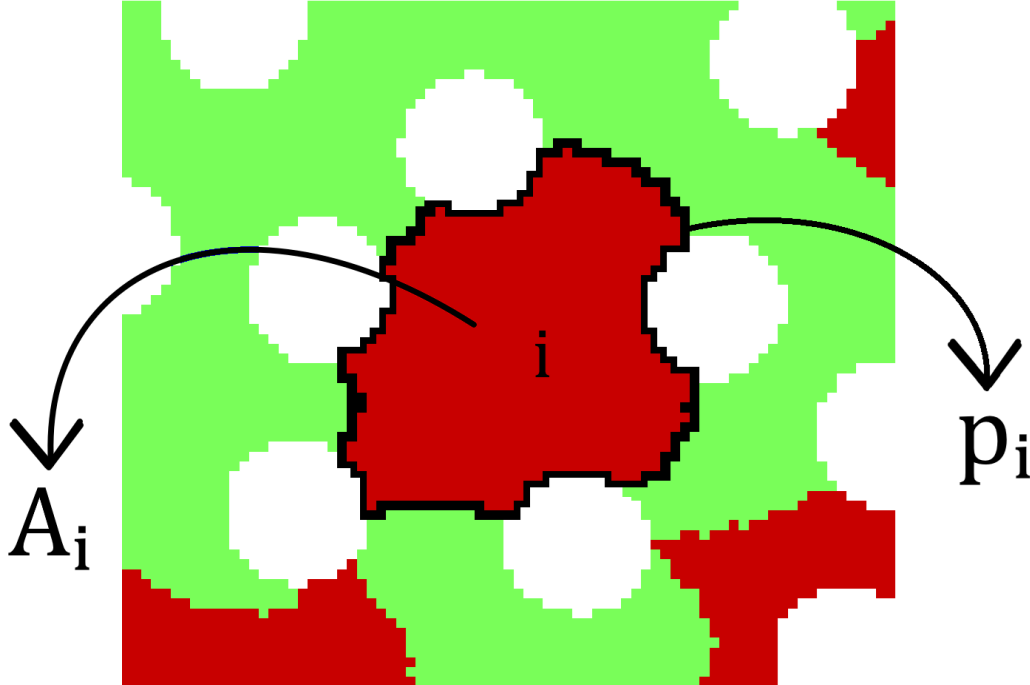
Para a métrica geométrica, definimos a razão característica  $R^{(j)}$  da imagem  $j$  como a média aritmética das razões área-perímetro de todos os seus clusters

$$R^{(j)} = \frac{1}{N^{(j)}} \sum_{i=1}^{N^{(j)}} \left( \frac{A_i}{p_i} \right).$$
(3.11)

Consequentemente, o valor global desta razão é dado pela média sobre todas as imagens

$$\langle R \rangle = \frac{1}{N_{img}} \sum_{j=1}^{N_{img}} R^{(j)}.$$
(3.12)

Figura 8 – Parâmetros morfológicos: determinação de  $A_i$  e  $p_i$  para o  $i$ -ésimo cluster.



Fonte: Autor.

Nota: A discretização ilustrada é meramente representativa; as simulações reais possuem refinamento de malha superior.

Para a construção do espaço de características (*feature space*) utilizado na *HCA*, foi necessário mitigar as discrepâncias de escala entre essas grandezas, que abrangem múltiplas ordens de magnitude. Além disso, a métrica de distância Euclidiana requer um tratamento

especial para a distribuição dos dados – como discutido na Seção 2.3. Assim, definimos o vetor de características  $\mathbf{x} = [\tilde{N}, \tilde{N}_p, \tilde{R}]$  através das transformações não-lineares

$$\begin{aligned}\tilde{N} &= \log\langle N \rangle, \\ \tilde{R} &= \log\langle R \rangle, \\ \tilde{N}_p &= \text{SymLog}(\langle N_p \rangle) \equiv \log(1 + \langle N_p \rangle).\end{aligned}\tag{3.13}$$

A utilização da escala logarítmica em  $\tilde{N}$  e  $\tilde{R}$  normaliza o crescimento exponencial dessas variáveis. Para o número de clusters percolantes, adotamos a escala logarítmica simétrica (*Symmetric Log*), essencial para lidar robustamente com os frequentes valores nulos (regimes não-percolantes) onde o logaritmo convencional seria indefinido, mantendo a sensibilidade para valores pequenos positivos.

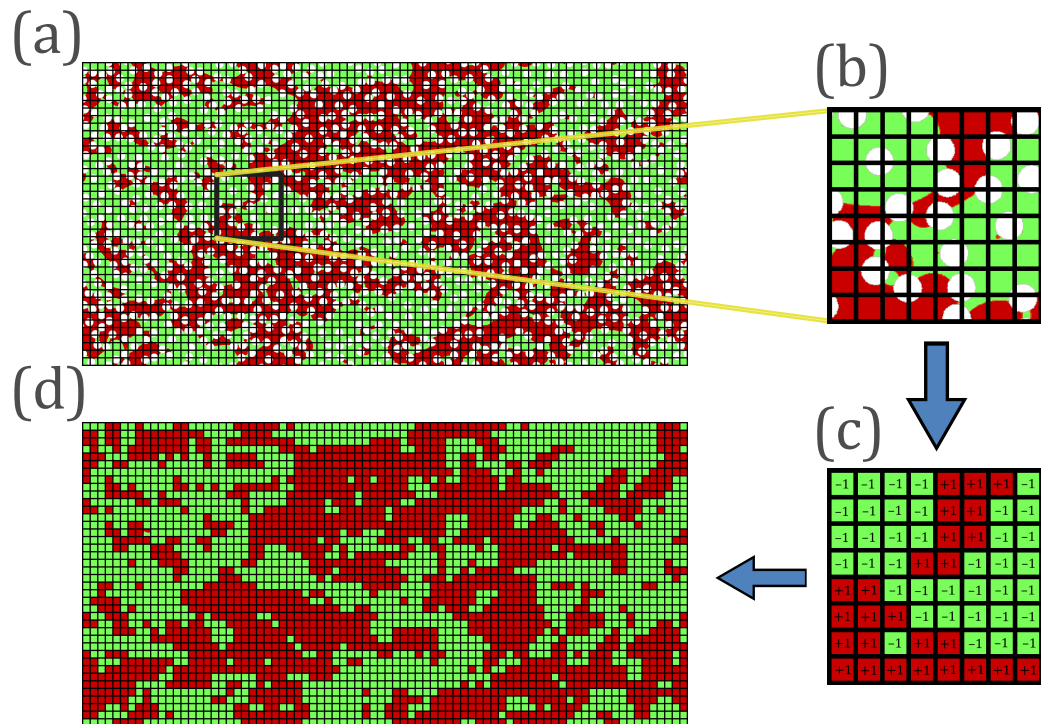
Com base nesses descritores transformados (e posteriormente normalizados via *Z-score*), construímos o dendrograma para identificar a hierarquia dos regimes. É importante ressaltar que a seleção desses parâmetros e suas transformações implica um viés observacional focado na ordem de grandeza das estruturas, e não apenas em seus valores absolutos. Além disso, a escolha de outras métricas, sejam topológicas (como o Número de Euler e os Números de Betti) sejam geométricos (como circularidade, razão de aspecto, extensão) resultaria em um padrão de agrupamento distinto. Não obstante, os três parâmetros adotados foram selecionados por sua intuição física direta e por capturarem, de forma complementar, os mecanismos dominantes em cada regime identificado visualmente.

### 3.4 Binarização e Máquina de Boltzmann

Nesta seção, realizamos um mapeamento do sistema hidrodinâmico contínuo em um sistema discreto de spins. Embora existam métodos sofisticados para realizar esta binarização, a abordagem mais simples e direta baseia-se exclusivamente na saturação das fases: sobrepomos uma malha retangular à imagem do escoamento e atribuímos o spin  $s_i = +1$  ou  $-1$  a cada célula, dependendo da fase majoritária em seu interior (Figura 9).

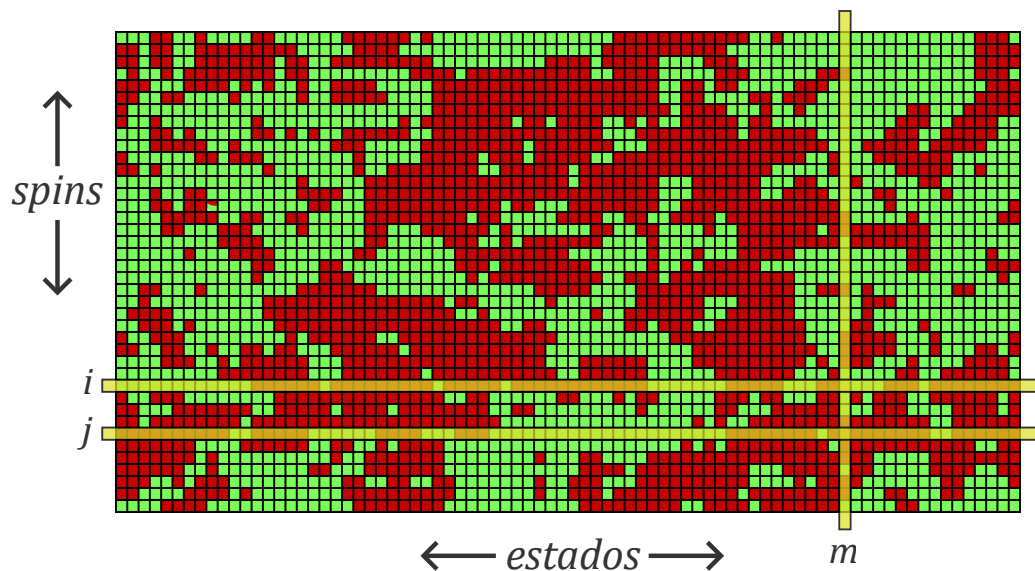
Para definir o *ensemble* estatístico, adotamos a premissa, exposta na Seção 2.3, de que a **seção transversal** do meio poroso constitui nosso sistema físico fundamental. Assim, cada coluna da matriz binária resultante representa um microestado  $\mathbf{s}$ , e a coleção de colunas ao longo do domínio espacial (e da evolução temporal) compõe o conjunto de dados para o treinamento da MB (Figura 10).

Figura 9 – Processo de binarização e discretização espacial. Uma malha regular é aplicada sobre os *snapshots* do escoamento em estado estacionário, com  $s_i = \pm 1$  definido pela fase predominante em cada célula.



Fonte: Autor

Figura 10 – Matriz binária resultante da discretização, cujas colunas são amostras de um mesmo objeto estatístico: a seção transversal do meio poroso em escoamento, mapeada em uma sequência vertical de spins (microestado  $s$ ).



Fonte: Autor

Assumindo a ergodicidade do sistema e a ausência de correlações temporais de longo alcance no regime estacionário, concatenamos as matrizes binárias de todas as imagens disponíveis dentro do intervalo  $\tau$ , cujas colunas são então embaralhadas e submetidas a *boots-*

*trapping*, isto é, selecionamos aleatoriamente um subconjunto de colunas para cada aplicação do algoritmo de treinamento. Essa estocasticidade previne que o modelo se ajuste excessivamente a características específicas de uma única imagem ou de uma sequência temporal particular, favorecendo a generalização.

Trabalhamos exclusivamente com uma discretização vertical de  $n = 20$  spins por coluna, o que resulta de uma binarização  $20 \times 40$  de cada imagem, portanto da escolha de uma rede de células quadradas. No *bootstrapping*, geramos 25 lotes (réplicas), cada um contendo 10% do total de colunas.

É fundamental ressaltar que, nesta abordagem, assumimos que cada regime físico  $(Ca, Fo)$  está associado a um sistema de Modelo SK distinto, cada qual detentor de seus próprios coeficientes  $h_i$  e  $J_{ij}$  do Hamiltoniano.

Uma vez determinados esses coeficientes para cada caso físico, torna-se possível investigar a termodinâmica desse sistema fora do equilíbrio. O Hamiltoniano aprendido define a “energia” das configurações de escoamento na “temperatura” de operação da máquina ( $T_{op} \equiv 1$  em unidades naturais).

Para sondar a proximidade do sistema a possíveis transições de fase no espaço de configurações, realizamos o cálculo numérico exato das médias térmicas, variando a temperatura hipotética  $T$  do modelo. Dada a dimensão reduzida do sistema, a computação direta da função de partição e de seus momentos através da soma sobre as  $2^{20}$  configurações possíveis torna-se computacionalmente viável, dispensando a necessidade de amostragem estocástica via simulações de Monte Carlo. O calor específico ( $C_v$ ) pode então ser calculado através das flutuações da energia, conforme a relação clássica da mecânica estatística (Pathria e Beale, 2011)

$$C_v(T) = \frac{1}{k_B T^2} (\langle H^2 \rangle_T - \langle H \rangle_T^2). \quad (3.14)$$

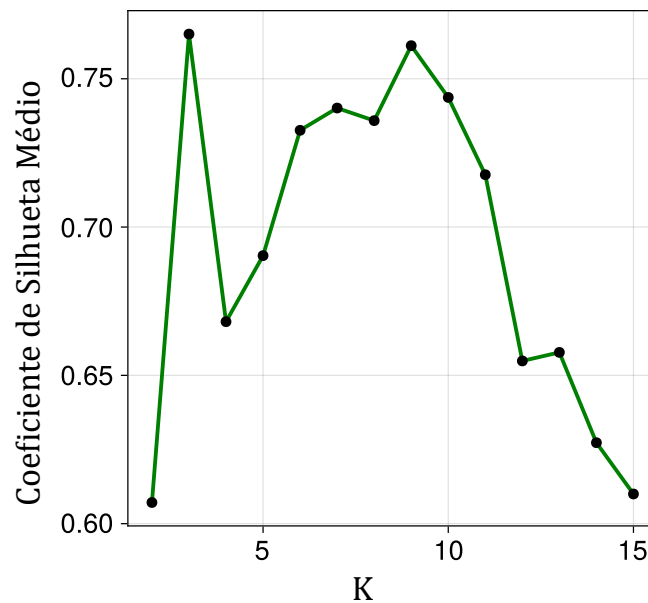
Em um gráfico de  $C_v(T)$  em função de  $T$ , a posição relativa da temperatura de operação  $T_{op}$  em relação ao pico de divergência do calor específico (temperatura crítica  $T_c$ ) indicará o estado do sistema: subcrítico (ordenado/frio), supercrítico (desordenado/quente) ou próximo ao ponto de calor específico máximo ( $T_{op} \approx T_c$ ). Tal análise tem por objetivo revelar como a complexidade do escoamento se traduz na linguagem de transições de fase.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 4.1 Regimes de Escoamento

A aplicação da técnica de Clusterização Hierárquica ao conjunto de dados previamente processado resultou no dendrograma apresentado na Figura 12. Para determinar o número ótimo de grupos, calculamos o Coeficiente de Silhueta para o intervalo  $K \in [2, 15]$  (Figura 11). A análise quantitativa revela um máximo global em  $K = 3$ , seguido por um máximo local em  $K = 9$ . Contudo, o intervalo  $K \in [6, 11]$  também apresenta consistência robusta, visto que valores de silhueta média superiores a 0.70 são considerados indício de uma estrutura de agrupamento forte e bem definida (Rousseeuw, 1987).

Figura 11 – Gráfico do Coeficiente de Silhueta Médio pelo Número de Clusters  $K$ .



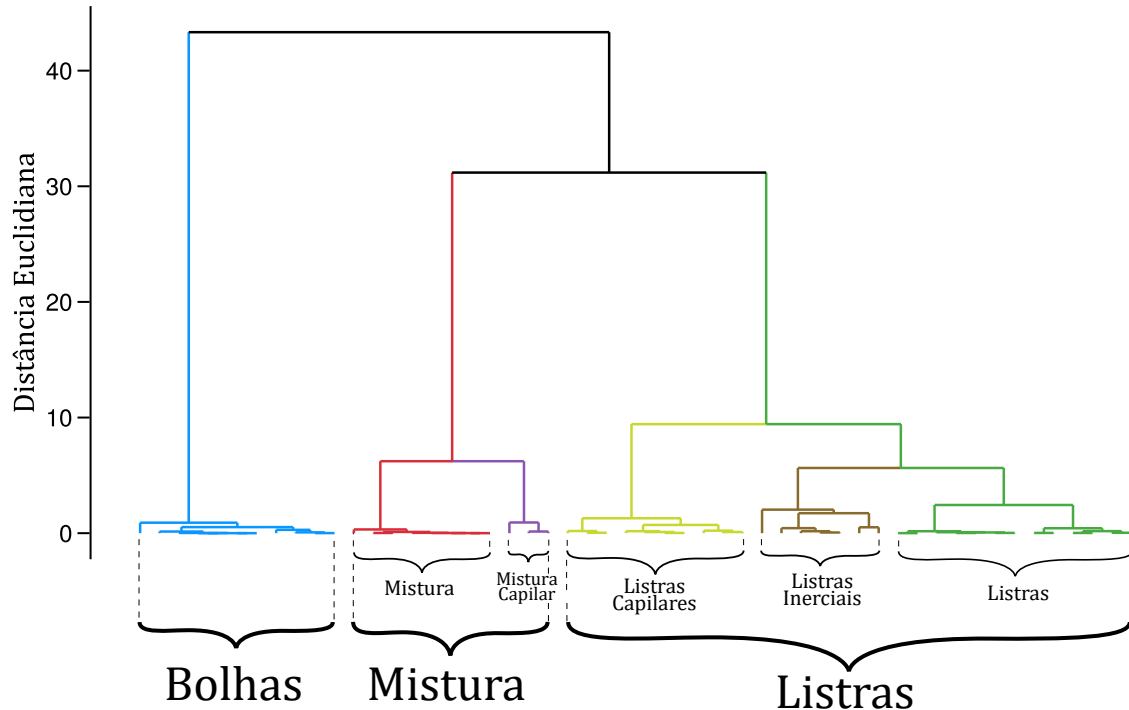
Fonte: Autor

A comparação visual dos casos de escoamento pertencentes aos mesmos regimes sugere maior pertinência de duas formas de agrupamento:

#### 1. Agrupamento Macro (3 Regimes Principais):

- a) **Bolhas** – Escoamentos onde a tensão superficial e as forças capilares são dominantes;
- b) **Listras** – Escoamentos em que as forças viscosas prevalecem, apresentando canais percolantes. Engloba desde listras laminares retilíneas até configurações sinuosas;
- c) **Mistura** – Escoamentos regidos sobretudo pelas forças inerciais, caracterizados pela alta fragmentação, embora abarque casos com influência capilar considerável.

Figura 12 – Dendrograma da Clusterização Hierárquica, ressaltando os cortes para  $K = 3$  e  $K = 6$ . A estrutura hierárquica evidencia que o macro-regime de Mistura contém o sub-regime de transição (Mistura Capilar), enquanto o macro-regime de Listras abarca as transições viscoso-capilares e viscoso-inerciais.



Fonte: Autor

## 2. Agrupamento Refinado (6 Regimes - Principais e de Transição):

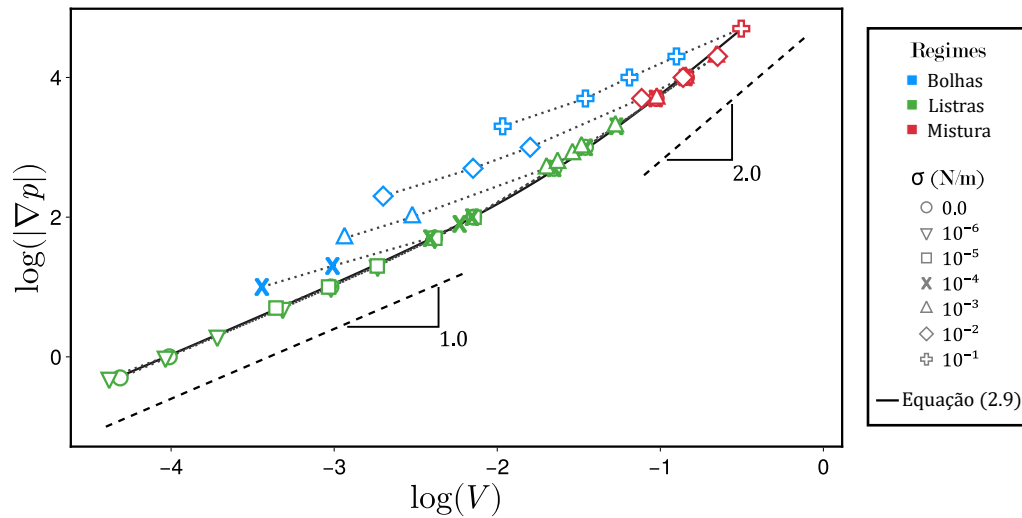
- a) **Bolhas** – Mantém a definição anterior;
- b) **Listras** – Refere-se estritamente aos casos listras com interfaces bem definidas e suaves, frutos de um regime efetivamente laminar;
- c) **Listras Capilares** – Regime de transição caracterizado pela competitividade entre forças capilares e viscosas. Observa-se a formação de listras espessas com interfaces rugosas, frequentemente após um longo período transiente;
- d) **Listras Inerciais** – Regime intermediário onde regiões localizadas do meio poroso apresentam turbulência ou instabilidade, mas o gradiente de pressão global ainda não é suficiente para promover a mistura completa das fases;
- e) **Mistura** – Domínio total das forças inerciais;
- f) **Mistura Capilar** – Regime com elevada contribuição inercial, mas onde a tensão superficial ainda exerce papel coesivo relevante. Resulta em uma menor fragmentação (menor número de clusters) e um aumento na razão área-perímetro comparado à mistura plena.

Para fins de clareza na discussão subsequente, priorizaremos a análise baseada nos três regimes macroscópicos, detalhando as subestruturas apenas quando as nuances das transições forem fisicamente relevantes.

## 4.2 Lei de Forchheimer

Ao montar o gráfico  $\nabla p \times V$ , observamos um seguimento parcial da Lei de Forchheimer. Para uma determinada tensão superficial  $\sigma$ , ao elevarmos o gradiente de pressão que empurra o fluido, há um crescimento anômalo acentuado da velocidade enquanto o fluido está no regime de bolhas. Contudo, ao transicionar para os regimes de listras ou mistura, com o aumento de  $\nabla p$ , as curvas de transporte colapsam consistentemente sobre a previsão da Equação de Forchheimer.

Figura 13 – Gráfico de  $\nabla p$  em função de  $V$  demonstrando o ajuste à Lei de Forchheimer nos regimes inerciais e viscosos.



Fonte: Autor

Os coeficientes  $k$  e  $\beta$  extraídos do ajuste quadrático (*fit*) desta curva são, considerando  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$  e viscosidade média  $\mu_m = 0.0015 \text{ kg/(m.s)}$ , respectivamente,

$$\begin{cases} k^{sim} = (1.40 \pm 0.03) \times 10^{-7} \text{ m}^2, \\ \beta^{sim} = 465 \pm 15 \text{ m}^{-1}. \end{cases} \quad (4.1)$$

Segundo a previsão teórica desses valores, realizada na Seção 2.2, dadas as devidas suposições e concessões das hipóteses simplificadoras ( $K_{CK} = 5$  e  $C_d = 1.2$ ), encontramos

$$\begin{cases} k^{teo} = 1.97 \times 10^{-7} \text{ m}^2, \\ \beta^{teo} = 326.5 \text{ m}^{-1}. \end{cases} \quad (4.2)$$

Comparando estes resultados, observamos um desvio quantitativo relevante que reflete as limitações do modelo analítico simplificado quando aplicado ao sistema bidimensional em questão.

A permeabilidade simulada ser menor que a teórica indica que a constante de Kozeny ( $K_{CK}$ ), assumida como 5 na teoria (valor típico para leitos 3D), possui um valor efetivo maior na geometria estudada. Ajustando a relação de Kozeny-Carman para o  $k^{sim}$  obtido, encontramos  $K_{CK} \approx 7.05$ .

Este resultado é consistente com a literatura para escoamento transversal a cilindros (2D), situando-se entre as previsões dos modelos clássicos. Para a porosidade estudada ( $\phi \approx 0.703$ ), o modelo de superfície livre de Happel (1959) prevê um  $K_{CK} \approx 6.22$ , enquanto modelos que consideram maior arrasto devido a contornos sólidos, como o de Kuwabara (1959) e o modelo de condução elétrica de Tomadakis e Robertson (2005), preveem valores mais elevados, de  $K_{CK} \approx 8.86$  e  $K_{CK} \approx 9.30$ , respectivamente. O aumento em relação ao valor padrão de 5 é, portanto, fisicamente justificado pela maior tortuosidade inerente a meios porosos 2D, em que o fluido não dispõe de rotas de contorno ortogonais ao plano para desviar dos obstáculos.

Similarmente, o fato de  $\beta^{sim}$  ser superior ao previsto sugere que a hipótese de soma de arrastos de corpos isolados subestima a dissipação de energia. Neste aspecto, este arranjo de porosidade  $\phi \approx 0.7$  deve ser considerado denso, pois os obstáculos estão próximos o suficiente para que suas esteiras de vórtices sejam acopladas, intensificando o efeito de bloqueio hidrodinâmico entre eles, o que amplifica significativamente o termo inercial.

Apesar das diferenças nos valores absolutos, a forma funcional das curvas confirma a física do transporte. Os escoamentos do tipo listras, por permitirem que cada fase escoe de forma quase independente, comportam-se majoritariamente segundo a Lei de Darcy – com influência inercial crescente para maiores  $\nabla p$  – visto que cada fase se comportaria individualmente dessa forma linear. Já os escoamentos de mistura, por entrelaçarem as fases, comportam-se como um fluido quase homogêneo que, estando em altas velocidades, seguiria de forma mais proeminente a parte inercial da Equação de Forchheimer.

Por fim, a lei de transporte mais intrigante ocorre no regime de bolhas, sugerindo a necessidade da adição de um termo de correção à Lei de Darcy-Forchheimer (Equação 2.9), correspondente à influência capilar na queda de pressão. Embora o número de simulações neste regime não seja suficiente para uma estimativa robusta, os dados sugerem uma lei de potência

$$\nabla p = -A(\sigma)V^\alpha - \frac{\mu}{k}V - \beta\rho V^2, \quad (4.3)$$

na qual  $\alpha < 1$  pode ser uma constante ou uma função da tensão superficial  $\sigma$ . Há precedentes para esse comportamento não-linear na literatura, não somente em regimes de escoamento chamados pré-darcianos (Bloshanskaya *et al.*, 2016), mas também em experimentos de escoamentos bifásicos de bolhas (Tallakstad *et al.*, 2009a), indicando que a deformação de interfaces impõe uma barreira energética adicional ao escoamento. A lei de potência também é utilizada como conceito base na abordagem computacional de Lenormand *et al.* (1988), ao associar regimes de escoamento viscoso instável ao *Dielectric Breakdown Model* (DBM) (Niemeyer *et al.*, 1984).

### 4.3 Diagrama de Fases

Tendo calculado os números adimensionais segundo a Equação 3.9, construímos diagramas de fases no espaço  $Ca \times Fo$ , considerando agrupamentos em  $K = 3$  e  $K = 6$  regimes (Figura 14). A utilização de escalas logarítmicas permite a representação inclusive dos casos limites onde a tensão superficial é nula ( $Ca \rightarrow \infty$ ). A comparação entre os gráficos evidencia que a subdivisão hierárquica de três para seis grupos salienta as zonas de transição e as nuances geométricas dentro de cada regime macroscópico.

Observa-se que o regime de bolhas é caracterizado pela predominância das forças capilares (valores baixos de  $Ca$  e  $Fo$ ), o regime de listras pelo domínio das forças viscosas (elevado  $Ca$  e baixo  $Fo$ ) e a mistura ocorre quando as forças inerciais governam a dinâmica (elevados valores de  $Fo$  e  $Ca$ ).

Com o objetivo de determinar a fronteira de transição entre os regimes, analisamos a razão entre a soma das forças desestabilizadoras (viscosas e inerciais) e as forças estabilizadoras (capilares), no que se refere à estabilidade das bolhas. Essa relação pode ser expressa pela soma dos números adimensionais

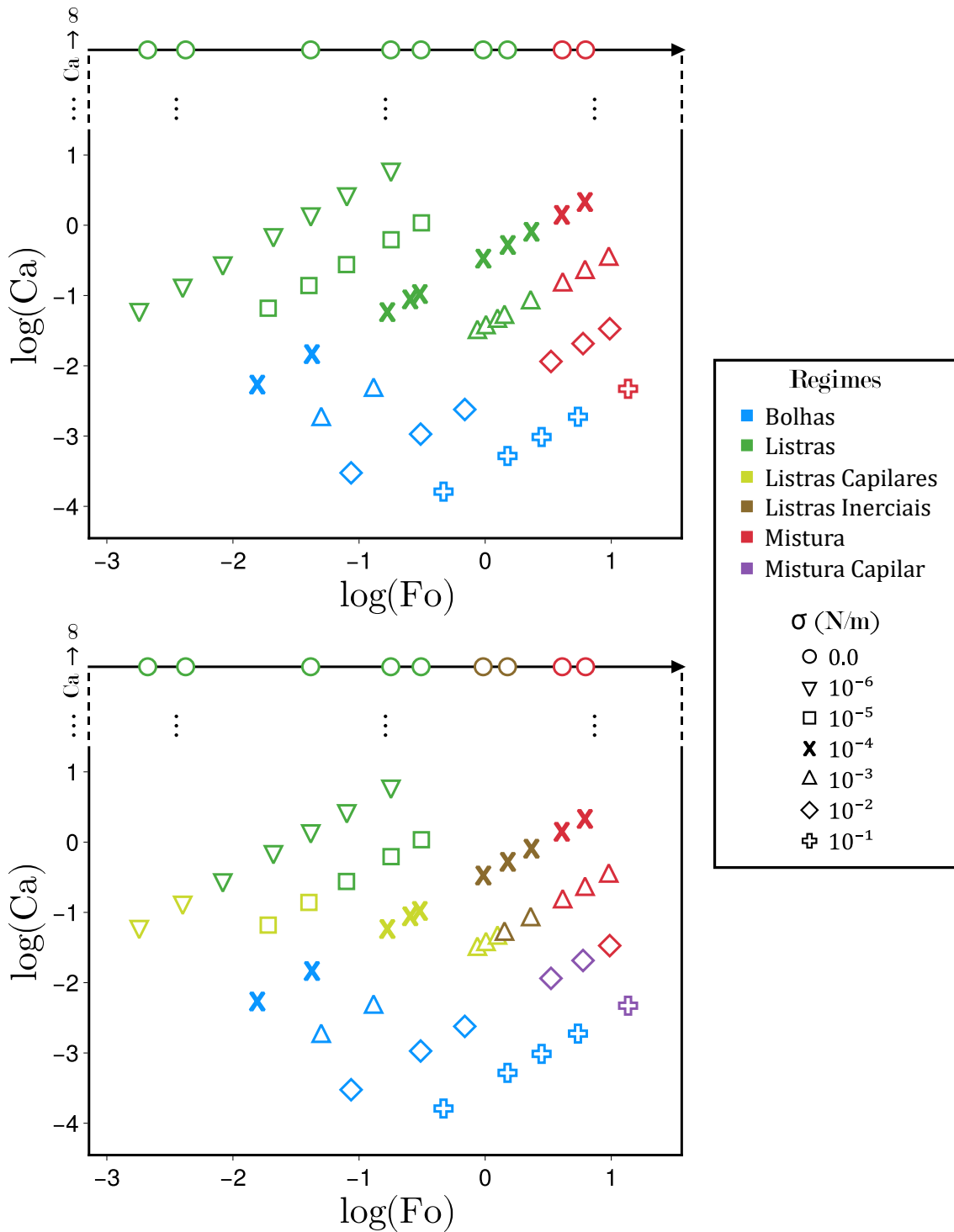
$$\frac{F_{vis} + F_{iner}}{F_{cap}} = \frac{F_{vis}}{F_{cap}} + \frac{F_{iner}}{F_{cap}} = Ca + We^*, \quad (4.4)$$

em que  $We^*$  é o Número de Weber modificado, definido a partir do Número de Forchheimer (Equação 3.9). Ao igualarmos essa soma a uma constante crítica  $\Gamma$ , no intervalo

$$Ca + We^* = \Gamma; \quad -1.75 < \log(\Gamma) < -1.45, \quad (4.5)$$

obtemos uma família de curvas que delimita com precisão o regime de bolhas em relação aos demais, sendo a curva central aproximadamente  $\log(\Gamma) = -1.6$  (curva tracejada da Figura 15). Esta correspondência sugere que, quando a magnitude combinada das forças visco-inerciais

Figura 14 – Diagrama de fases  $\text{Ca} \times \text{Fo}$  com eixos logarítmicos, acima para  $K = 3$ , e abaixo para  $K = 6$ .

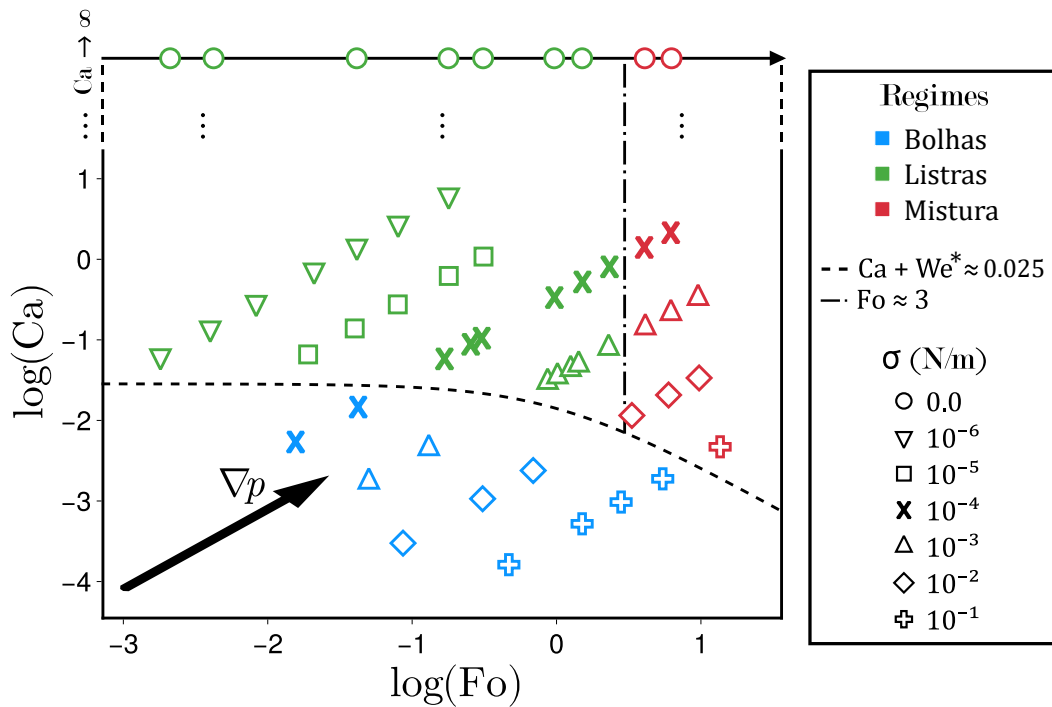


Fonte: Autor

supera a barreira de potencial capilar definida por  $\Gamma$ , o sistema transiciona, abandonando a morfologia do regime de bolhas.

A transição listras-mistura é mais difícil de ser caracterizada, pois seu comportamento

Figura 15 – Diagrama de fases  $Ca \times Fo$  com eixos logarítmicos com  $K = 3$  regimes. A transição entre os regimes de Bolhas e os demais está salientada pela curva tracejada, correspondente a um valor específico da soma dos números Capilar e de Weber. A interface entre os regimes de listras e bolhas é de difícil caracterização quando existe atuação relevante das forças capilares (proximidade ao ponto triplo), mas será tomada como  $Fo \approx 3$ , pois possui essa forma para alto  $Ca$ , onde somente as forças inerciais e viscosas são relevantes.



Fonte: Autor

próximo do ponto triplo não é bem compreendido. Contudo, a análise assintótica para altos valores de  $Ca$  (onde a tensão superficial é negligenciável) indica que a fronteira se estabelece em  $Fo \approx 3$ . Como essa reta vertical acaba por separar os casos físicos de cada regime, será utilizada como uma primeira estimativa de formato desta transição. Fisicamente, esse valor corresponde a uma situação onde o termo inercial quadrático da Equação de Forchheimer contribui com aproximadamente 75% da queda de pressão total, marcando o ponto onde a inércia desestabiliza o escoamento laminar estratificado das listras.

#### 4.4 Resultado das Máquinas de Boltzmann

A aplicação das Máquinas de Boltzmann sobre os 52 casos físicos simulados, com discretização de  $n = 20$  spins, demonstrou a eficácia do algoritmo de treinamento na inferência dos parâmetros  $\{h_i, J_{ij}\}$ . Em todas as instâncias, o modelo convergiu, reproduzindo com precisão as médias dos primeiros (magnetização) e segundos (correlações de pares) momentos observados

nas amostras.

No entanto, a validação do aprendizado através dos momentos de terceira ordem (tripletos) revelou limitações fundamentais na capacidade de generalização do modelo. Ao confrontar as médias dos tripletos da amostra com as previsões da máquina, constatou-se que a maioria das configurações não foi adequadamente representada.

Considerando a classificação em  $K = 6$  regimes estabelecida na Figura 14, observou-se um comportamento distinto apenas para as **listras capilares** e para as **listras inerciais** de baixo número Capilar ( $Ca$ ). Nesses casos específicos, caracterizados por alta organização espacial das listras – que costumam ser mais espessas –, o modelo conseguiu prever os momentos de terceira ordem com exatidão ou, em alguns casos, com razoável acurácia.

Nos demais regimes, as previsões falharam sistematicamente. O modelo estimou valores de tripletos próximos a zero ou significativamente subestimados (cerca de metade da magnitude real), indicando uma captura apenas parcial das correlações.

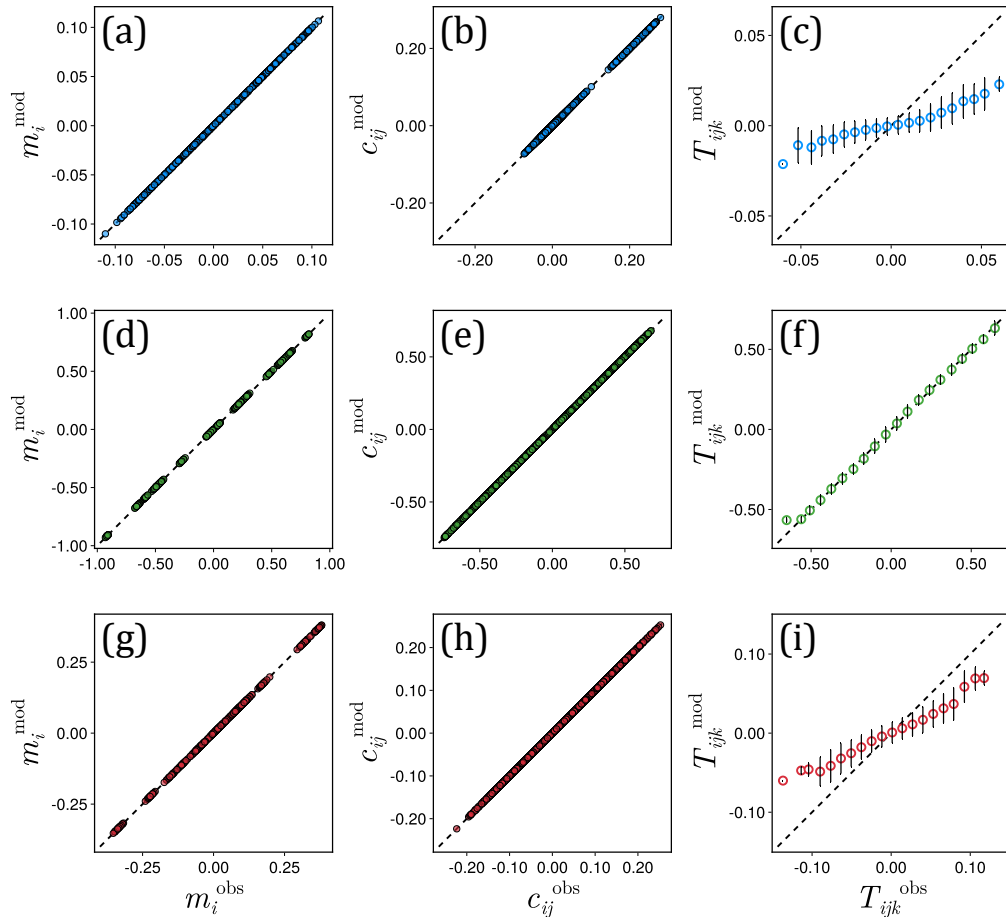
Isso significa que, ao menos para a estratégia de binarização adotada, o modelo como proposto por Bialek (2012) – restrito a interações de pares – não é suficiente para representar a complexidade estatística intrínseca da maioria dos casos físicos. A discrepância nos momentos de terceira ordem sugere que a física desses escoamentos é governada por correlações de muitos corpos (*many-body interactions*) irreduzíveis. Enquanto regimes laminares estratificados (listras espessas) possuem uma estrutura de correlação simples que pode ser decomposta em pares vizinhos, regimes com curvatura interfacial acentuada (bolhas) ou com caos inercial (mistura) exigem informações de ordem superior para serem descritos estatisticamente, escapando, portanto, do escopo de um Hamiltoniano quadrático.

Portanto, o resultado da previsão dos tripletos indica em cada caso se o Hamiltoniano do sistema foi de fato aprendido ou se o modelo SK fornece apenas uma aproximação de campo médio efetiva em reproduzir os parâmetros  $\{h_i, J_{ij}\}$ .

Apesar das limitações na captura de correlações de ordem superior, o modelo efetivo de pares ainda permite uma caracterização termodinâmica do sistema. Mediante o cálculo exato das médias térmicas via soma exaustiva das configurações, construímos os gráficos do calor específico em função da temperatura hipotética auxiliar  $T$ , a fim de situar o ponto de operação de cada escoamento.

Comparando a temperatura de operação da máquina ( $T_{op} = 1$ , parâmetro do modelo estatístico sem relação com a temperatura termodinâmica do fluido) com a temperatura crítica

Figura 16 – Aprendizagem das Máquinas de Boltzmann, expressa pela reprodução das magnetizações e correlações de pares e pela tentativa de previsão dos tripletos. Uma situação física de cada regime foi escolhida, priorizando aquelas com melhor previsão dos terceiros momentos. Nos três casos,  $\sigma = 10^{-4}$  N/m. (a-c)  $\nabla p = 20.0$  Pa/m, regime de Bolhas; (d-f)  $\nabla p = 50.0$  Pa/m, regime de Listras; (g-i)  $\nabla p = 5000.0$  Pa/m, regime de Mistura.



Fonte: Autor

de transição de fase ( $T_c$ , definida pelo pico de  $C_v$ ) em cada gráfico, analisamos a temperatura reduzida  $t_{rel}$ , dada por

$$t_{rel} = \frac{T_{op} - T_c}{T_c}. \quad (4.6)$$

Cabe notar que a temperatura hipotética  $T$  do modelo guarda uma analogia conceitual com o *flow derivative* introduzido por Hansen *et al.* (2023), variável conjugada à área ocupada pelo fluido molhante na *REA*. Em ambos os casos, trata-se de uma grandeza intensiva que caracteriza a sensibilidade do sistema a variações na distribuição das fases fluidas. No presente trabalho, essa distribuição é capturada pela binarização vertical da fração de fluido em cada coluna, tornando a temperatura do modelo estatisticamente análoga ao papel desempenhado pelo *flow derivative* no formalismo pseudo-termodinâmico.

Considerando a divisão macroscópica em  $K = 3$  regimes (Figura 14), observamos que as **Bolhas** operam em um regime supercrítico (“quente”), com  $t_{rel}$  geralmente entre 1.3 e 3.3. As **Misturas** apresentam temperaturas relativas ainda mais elevadas, variando entre 1.5 e 7, com alguns casos extremos atingindo  $t_{rel} \approx 10$ . Isso reflete o alto grau de desordem e entropia dessas configurações.

As **Listras**, por sua vez, segregam-se novamente em função da espessura, separadas aproximadamente por  $\log(\text{Ca}) \approx -0.6$ . As máquinas de Boltzmann treinadas em simulações com listras finas operam em temperaturas altas ( $t_{rel}$  entre 2 e 7), assemelhando-se estatisticamente às misturas.

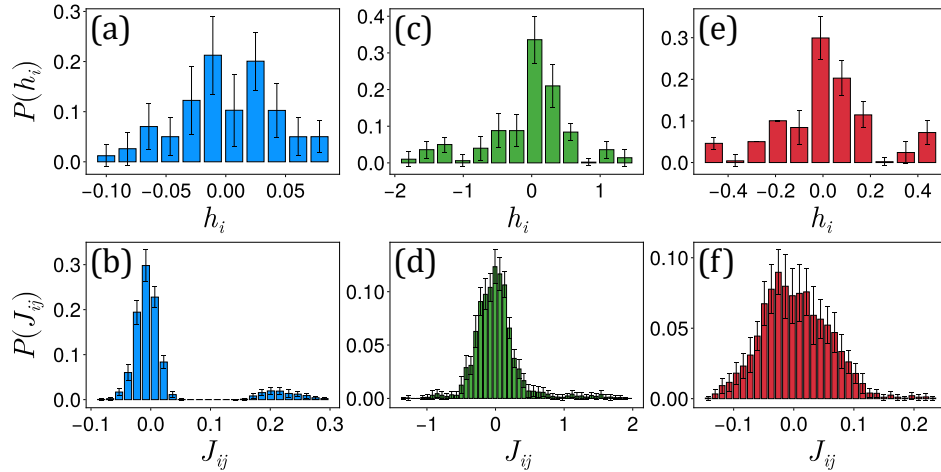
Já as listras espessas (listras capilares e listras inerciais de baixo Ca) operam próximas ao ponto crítico ou no regime subcrítico (“frio”), apresentando valores negativos de  $t_{rel}$  (entre  $-0.4$  e  $-0.1$ ). Alguns casos situam-se tão próximos da transição de fase ( $|t_{rel}| \approx 0.02$ ) que podem ser considerados críticos. Isso indica que, relativamente ao parâmetro de ordem da binarização (distribuição vertical das fases do fluido), as listras espessas representam configurações ordenadas, tipicamente sensíveis a perturbações do sistema (susceptibilidade magnética alta).

Notavelmente, há uma correlação direta entre o regime de temperatura e a fidelidade do modelo. São justamente os casos mais ordenados (próximos à transição de fase ou subcríticos) que permitem uma boa previsão dos tripletos. Conclui-se que escoamentos que operam em “altas temperaturas” – traduzidos em amostras binárias com alta variância e entropia – são governados por interações de ordem superior irreduzíveis. Em contrapartida, sistemas próximos ao pico do calor específico possuem uma estrutura de correlação que é adequadamente descrita por interações de pares, validando o uso do modelo de Bialek (2012) (Schneidman *et al.*, 2006; Tkačik *et al.*, 2014; Tkačik *et al.*, 2015).

Quanto à estrutura dos Hamiltonianos  $\{h_i, J_{ij}\}$ , as simulações que operam a altas temperaturas possuem distribuições de coeficientes mais estreitas, o que resulta em picos de Calor Específico pronunciados e transições de fase abruptas. As **bolhas** apresentam uma peculiaridade: a distribuição de  $J_{ij}$  é geralmente bimodal (Figura 17), sugerindo a existência de duas escalas de interação características – inter-bolha (distribuição estreita e centrada em 0) e intra-bolhas (distribuição larga com valores positivos, correspondentes às interações de spins vizinhos). Já as listras grossas exibem as distribuições mais largas, tanto em  $h_i$  quanto em  $J_{ij}$ . A presença de campos locais  $h_i$  intensos nestes últimos casos atua como um campo externo que “quebra” a simetria do sistema, suavizando a curva de transição de fase – efeito de *crossover* (Goldenfeld,

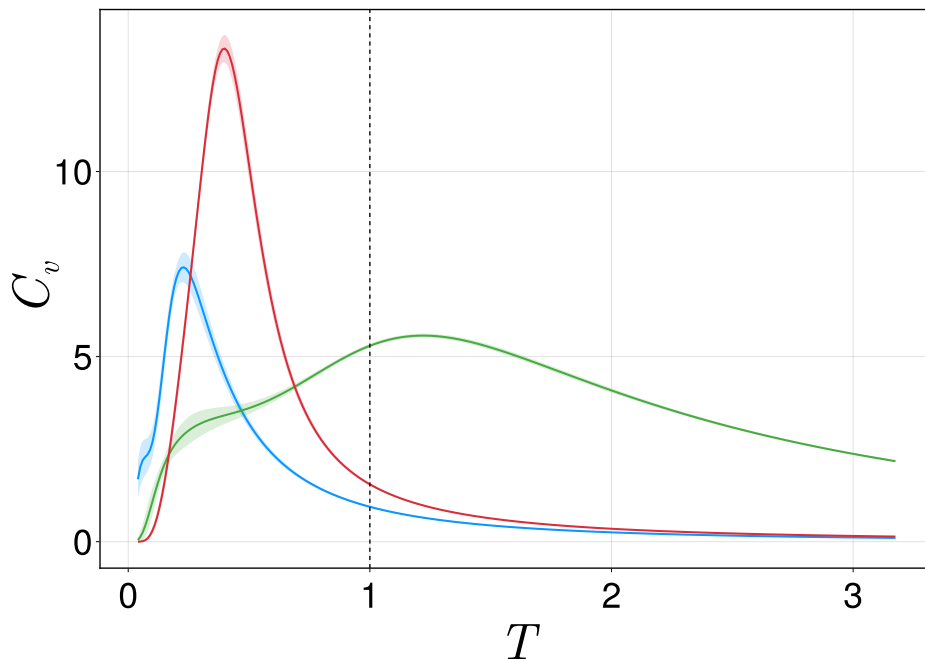
1992) –, conforme observado na Figura 18.

Figura 17 – Distribuições dos coeficientes  $h_i$  e  $J_{ij}$  dos Hamiltonianos de três casos representativos. O caso de Bolhas (a-b) destaca-se pela distribuição bimodal de  $J_{ij}$ . As Misturas (c-d) tendem a possuir distribuições estreitas, enquanto alguns casos de Listras (e-f) apresentam maior variância nos parâmetros.



Fonte: Autor

Figura 18 – Gráfico de  $C_v$  em função de  $T$  para um caso físico de cada regime. Bolhas e Misturas (curvas com picos acentuados à esquerda de  $T_{op} = 1$ ) operam no regime supercrítico (alta temperatura relativa). Já a curva das Listras é mais suave devido ao campo local intenso, operando frequentemente próxima ou abaixo da temperatura crítica.



Fonte: Autor

## 5 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho, realizamos diversas simulações numéricas *CFD* em geometria porosa utilizando o modelo de arranjo aleatório de discos sem superposição, com as quais reproduzimos os principais regimes de escoamento bifásico, frutos dos diferentes cenários na competição entre as forças viscosas, capilares e inerciais do sistema.

Por meio da técnica de *Machine Learning* de Agrupamento Hierárquico (*HCA*), conseguimos validar objetivamente a classificação visual dos regimes, segregando-os não somente em três tipos principais (Bolhas, Listras, Mistura) – em que cada um é regido primordialmente pelas forças capilares, viscosas e inerciais, respectivamente –, mas identificando sub-regimes de transição (Listras Capilares, Listras Inerciais, Mistura Capilar), baseados em parâmetros geométricos especificamente escolhidos.

Verificamos, por meio do gráfico entre o gradiente de pressão aplicado e a velocidade de Darcy média do escoamento, que os macrorregimes de Listras e Mistura seguem a lei de Forchheimer, que consiste na lei de Darcy corrigida por um termo inercial quadrático. Os casos simulados pertencentes ao regime de Bolhas apresentam um desvio notável em relação à curva prevista. Esse resultado sugere a possibilidade da adição de um novo termo de correção à Lei de Darcy-Forchheimer, relativo à resistência adicional imposta pela alta tensão superficial neste regime.

Utilizando os parâmetros adimensionais do Número Capilar ( $Ca$ ) e do Número de Forchheimer ( $Fo$ ) – como alternativa ao Número de Reynolds –, que expressam a competição entre as forças internas do escoamento, geramos um diagrama de fases dos regimes de escoamento observados. Percebemos que a transição entre as Bolhas e os demais regimes é caracterizada por um valor constante de  $\Gamma = Ca + We^*$ , e que, para elevado Número Capilar, a transição listras-mistura é marcada por  $Fo \approx 3$ , destacando que o regime de misturas apresenta contribuição inercial maior que 75% na Equação de Forchheimer.

Realizamos um mapeamento das imagens do escoamento em sistema de spins, com base na fração de fluido em cada ponto do sistema. Nestes dados binários, aplicamos o algoritmo da Máquina de Boltzmann, para conferir ao sistema uma temperatura de operação e identificar seus viéses locais e interações pares, por meio do aprendizado dos coeficientes  $h_i$  e  $J_{ij}$  do Hamiltoniano do Modelo de Sherrington-Kirkpatrick com a abordagem de Bialek (2012).

Para o número de spins escolhido ( $n = 20$ ), a Máquina de Boltzmann reproduziu exatamente os primeiros momentos (magnetização) e segundos momentos (correlação de pares),

mas em geral falhou na previsão dos terceiros momentos (tripletos) presentes nas amostras.

Concluimos que os regime de bolhas e mistura possuem interações de muitos corpos (*many-body interactions*) irreduzíveis. Ou seja, a estatística desses escoamentos, seguindo o critério de binarização escolhido, não pode ser escrita apenas por interações de pares, exigindo um hamiltoniano de ordem superior. O modelo só funcionou bem para as listras espessas (mais ordenadas).

Não obstante, segundo a análise dos Hamiltonianos aprendidos, verificamos que as bolhas, misturas e listras pouco espessas operam em altas temperaturas relativas do modelo ( $t_{rel} \gg 0$ ), longe da temperatura de transição de fase, enquanto que os regimes ordenados com relação a fração de fluido por coluna (Listras espessas) operam muito próximos da temperatura crítica ( $t_{rel} \approx 0$ ). Isso sugere uma relação profunda entre a ordem espacial hidrodinâmica e a proximidade de pontos críticos no espaço de configurações de spins — resultado que encontra eco no formalismo pseudo-termodinâmico de Hansen *et al.* (2023), onde uma variável análoga, o *flow derivative*, desempenha papel conjugado à distribuição das fases no espaço poroso.

Como perspectivas para trabalhos futuros, sugere-se a realização de um conjunto mais amplo de simulações no regime de bolhas, visando a caracterização robusta do termo de correção capilar na lei de transporte macroscópico. A validação analítica deste termo permitirá a proposição de novos números adimensionais generalizados, definidos diretamente pela razão entre os termos da lei constitutiva corrigida, analogamente ao Número de Forchheimer. No âmbito da modelagem estatística, recomenda-se a exploração de estratégias de binarização mais sofisticadas, que incorporem não apenas a fração de fase, mas também informações do campo de velocidades, enriquecendo a descrição dinâmica dos microestados. Por fim, para superar as limitações observadas na representação dos regimes de alta entropia, propõe-se a extensão da arquitetura da Máquina de Boltzmann para incluir tensores de interação de três corpos ( $K_{ijk}$ ), com o objetivo de capturar as correlações de ordem superior intrínsecas à física dos regimes de bolhas e mistura.

## REFERÊNCIAS

- ACKLEY, D. H.; HINTON, G. E.; SEJNOWSKI, T. J. A learning algorithm for boltzmann machines. **Cognitive Science**, v. 9, n. 1, p. 147–169, 1985. ISSN 0364-0213.
- ANDERSON, J. D. **Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications**. New York: McGraw-Hill, 1995.
- ANSYS Inc. **ANSYS Fluent User’s Guide**. Canonsburg, PA, 2023. Release 2023 R1.
- BEAR, J. **Dynamics of Fluids in Porous Media**. New York: American Elsevier, 1972. Republicado por Dover Publications em 1988.
- BEDEAUX, D. The effective shear viscosity for two-phase flow. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 121, n. 1, p. 345–361, 1983. ISSN 0378-4371. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0378437183902613>. Acesso em: 27 mar. 2026.
- BIALEK, W. **Biophysics: Searching for Principles**. Princeton, NJ: Princeton University Press, 2012. ISBN 9780691138916.
- BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Transport Phenomena**. 2nd. ed. New York: John Wiley & Sons, 2007.
- BISHOP, C. M. **Pattern Recognition and Machine Learning**. New York: Springer, 2006.
- BLOSHANSKAYA, L.; IBRAGIMOV, A.; SIDDIQUI, F.; SOLIMAN, M. Productivity index for darcy and pre-/post-darcy flow (analytical approach). <http://arxiv.org/pdf/1512.06971v1.pdf>, v. 20, jan 2016.
- BLUNT, M. J. **Multiphase Flow in Permeable Media: A Pore-Scale Perspective**. [S. l.]: Cambridge University Press, 2017.
- BRACKBILL, J. U.; KOTHE, D. B.; ZEMACH, C. A continuum method for modeling surface tension. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 100, n. 2, p. 335–354, 1992.
- CARMAN, P. Fluid flow through granular beds. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 75, p. S32–S48, 1997. ISSN 0263-8762. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876297800032>. Acesso em: 27 mar. 2026.
- DARCY, H. **Les fontaines publiques de la ville de Dijon**. Paris: Victor Dalmont, 1856.
- DULLIEN, F. A. L. **Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure**. 2nd. ed. [S. l.]: Academic Press, 2012.
- DYKE, M. V. **An Album of Fluid Motion**. Stanford, California: Parabolic Press, 1982.
- EDWARDS, S. F.; OAKESHOTT, R. B. S. Theory of powders. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v. 157, n. 1, p. 1080–1090, 1989.
- FORCHHEIMER, P. Wasserbewegung durch boden. **Ver. Dtsch. Ing.**, v. 45, p. 1782–1788, 1901.
- FOX, R. W.; MCDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introdução à mecânica dos fluidos**. 7th. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

GEMAN, S.; GEMAN, D. Stochastic relaxation, gibbs distributions, and the bayesian restoration of images. **IEEE Transactions on pattern analysis and machine intelligence**, IEEE, n. 6, p. 721–741, 1984.

GENNES, P.-G. de. Wetting: statics and dynamics. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 57, n. 3, p. 827–863, 1985.

GOLDENFELD, N. **Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group**. Reading: Addison-Wesley, 1992.

GUYON, E.; HULIN, J.-P.; PETIT, L.; MITESCU, C. D. **Physical Hydrodynamics**. 2nd. ed. [S. l.]: Oxford University Press, 2015.

HAN, J.; PEI, J.; KAMBER, M. **Data mining: concepts and techniques**. 3rd. ed. [S. l.]: Elsevier, 2011.

HANSEN, A.; FLEKKØY, E. G.; SINHA, S.; SLOTTE, P. A. A statistical mechanics framework for immiscible and incompressible two-phase flow in porous media. **Advances in Water Resources**, v. 171, p. 104336, 2023. ISSN 0309-1708.

HAPPEL, J. Viscous flow relative to arrays of cylinders. **AIChE Journal**, Wiley Online Library, v. 5, n. 2, p. 174–177, 1959.

HIRT, C.; NICHOLS, B. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. **Journal of Computational Physics**, v. 39, n. 1, p. 201–225, 1981. ISSN 0021-9991. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021999181901455>. Acesso em: 27 mar. 2026.

HOERNER, S. F. **Fluid-Dynamic Drag: Theoretical, Experimental and Statistical Information**. Brick Town, New Jersey: Hoerner Fluid Dynamics, 1965.

HOSHEN, J.; KOPELMAN, R. Percolation and cluster distribution. i. cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. **Physical Review B**, APS, v. 14, n. 8, p. 3438, 1976.

JOHNSON, S. C. Hierarchical clustering schemes. **Psychometrika**, Springer, v. 32, n. 3, p. 241–254, 1967.

KAUR, J.; DEEP, G. A review: Comparative study of image clustering algorithms. nov 2019.

KAVIANY, M. **Principles of Heat Transfer in Porous Media**. 2nd. ed. New York: Springer, 1995.

KOCH, D. L.; LADD, A. J. C. Moderate reynolds number flows through periodic and random arrays of aligned cylinders. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 349, p. 31–66, 1997.

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**, The Physical Society of Japan, v. 14, n. 4, p. 527–532, 1959.

LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. **Fluid Mechanics**. 2nd. ed. Oxford: Pergamon Press, 1987. v. 6. (Course of Theoretical Physics, v. 6).

LENORMAND, R.; TOUBOUL, E.; ZARCONI, C. Numerical models and experiments on immiscible displacements in porous media. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 189, p. 165–187, 1988.

MÉZARD, M.; PARISI, G.; VIRASORO, M. A. **Spin Glass Theory and Beyond: An Introduction to the Replica Method and Its Applications**. Singapore: World Scientific, 1987. v. 9. (World Scientific Lecture Notes in Physics, v. 9). ISBN 978-9971-5-0115-0.

NAVIER, C.-L. Mémoire sur les lois du mouvement des fluides. **Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France**, v. 6, p. 389–440, 1822.

NIEMEYER, L.; PIETRONERO, L.; WIESMANN, H. J. Fractal dimension of dielectric breakdown. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 52, n. 12, p. 1033–1036, 1984.

PARISI, G. Infinite number of order parameters for spin-glasses. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 43, n. 23, p. 1754–1756, 1979.

PATHRIA, R. K.; BEALE, P. D. **Statistical Mechanics**. 3rd. ed. Oxford: Academic Press, 2011.

PROBSTEIN, R. F. **Physicochemical Hydrodynamics: An Introduction**. 2nd. ed. Hoboken: John Wiley & Sons, 2005.

QIAN, J.-y.; LI, X.-j.; WU, Z.; JIN, Z.-j.; SUNDEN, B. A comprehensive review on liquid-liquid two-phase flow in microchannel: flow pattern and mass transfer. **Microfluidics and Nanofluidics**, Springer, v. 23, n. 10, p. 116, 2019.

REYNOLDS, O. XXIX. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London**, n. 174, p. 935–982, dez 1883. ISSN 0261-0523. Disponível em: <https://doi.org/10.1098/rstl.1883.0029>. Acesso em: 27 mar. 2026.

ROUSSEEUW, P. J. Silhouettes: a graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, Elsevier, v. 20, p. 53–65, 1987.

RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning representations by back-propagating errors. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 323, n. 6088, p. 533–536, 1986.

RUTH, D.; MA, H. On the derivation of the forchheimer equation by means of the averaging theorem. **Transport in Porous Media**, Springer, v. 7, n. 3, p. 255–264, 1992.

SAHIMI, M. **Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock**. 2nd. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2011.

SALES, J. M. A.; SEYBOLD, H. J.; OLIVEIRA, C. L. N.; ANDRADE, J. S. Bubble dynamics in stationary two-phase flow through disordered porous media. **Frontiers in Physics**, v. 10, 2022. ISSN 2296-424X.

SCHLICHTING, H.; GERSTEN, K. **Boundary-Layer Theory**. 9th. ed. Berlin: Springer, 2016.

SCHNEIDMAN, E.; BERRY, M. J.; SEGEV, R.; BIALEK, W. Weak pairwise correlations imply strongly correlated network states in a neural population. **Nature**, v. 440, p. 1007–1012, abr 2006. ISSN 0028-0836. Disponível em: <https://www.nature.com/articles/nature04701>. Acesso em: 27 mar. 2026.

SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable model of a spin-glass. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 35, n. 26, p. 1792–1796, 1975.

STOKES, G. G. On the theories of the internal friction of fluids in motion, and of the equilibrium and motion of elastic solids. **Transactions of the Cambridge Philosophical Society**, v. 8, p. 287–319, 1845.

TALLAKSTAD, K.; LØVOLL, G.; KNUDSEN, H.; RAMSTAD, T.; FLEKKØY, E.; MÅLØY, K. Steady-state, simultaneous two-phase flow in porous media: An experimental study. **Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics**, v. 80, p. 036308, set 2009.

TALLAKSTAD, K. T.; KNUDSEN, H. A.; RAMSTAD, T.; LØVOLL, G.; MÅLØY, K. J.; TOUSSAINT, R.; FLEKKØY, E. G. Steady-state two-phase flow in porous media: Statistics and transport properties. **Phys. Rev. Lett.**, American Physical Society, v. 102, p. 074502, fev 2009. Disponível em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.074502>. Acesso em: 27 mar. 2026.

TKAČIK, G.; MORA, T.; MARRE, O.; AMODEI, D.; BERRY, M. J.; BIALEK, W. Thermodynamics for a network of neurons: Signatures of criticality. jul 2014.

TKAČIK, G.; MORA, T.; MARRE, O.; AMODEI, D.; PALMER, S. E.; BERRY, M. J.; BIALEK, W. Thermodynamics and signatures of criticality in a network of neurons. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Academy of Sciences, v. 112, p. 11508–11513, set 2015. ISSN 0027-8424. Disponível em: <https://pnas.org/doi/full/10.1073/pnas.1514188112>. Acesso em: 27 mar. 2026.

TOMADAKIS, M. M.; ROBERTSON, T. J. Viscous permeability of random fiber structures: comparison of electrical and diffusional estimates with experimental and analytical results. **Journal of Composite Materials**, Sage Publications, v. 39, n. 2, p. 163–188, 2005.

VALAVANIDES, M. S.; CONSTANTINIDES, G. N.; PAYATAKES, A. C. Mechanistic model of steady-state two-phase flow in porous media based on ganglion dynamics. **Transport in Porous Media**, Springer, v. 30, n. 3, p. 267–299, 1998.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 2nd. ed. Harlow: Pearson Education, 2007.

WARD, J. H. Hierarchical grouping to optimize an objective function. **Journal of the American Statistical Association**, Taylor & Francis, v. 58, n. 301, p. 236–244, 1963.

WHITAKER, S. The forchheimer equation: A theoretical development. **Transport in Porous Media**, v. 25, n. 1, p. 27–61, out 1996. ISSN 1573-1634. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF00141261>. Acesso em: 27 mar. 2026.

ZENG, Z.; GRIGG, R. A criterion for non-darcy flow in porous media. **Transport in Porous Media**, v. 63, n. 1, p. 57–69, abr 2006. ISSN 1573-1634. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11242-005-2720-3>. Acesso em: 27 mar. 2026.

## APÊNDICE A – UNICIDADE DO MÁXIMO DE VEROSSIMILHANÇA

Neste apêndice, demonstramos que a função de log-verossimilhança para o modelo utilizado por Bialek (2012) (do tipo SK estendido e, por extensão, para qualquer modelo da família exponencial totalmente visível (Bishop, 2006)) é uma função côncava em relação aos seus parâmetros. Essa propriedade assegura que a superfície de verossimilhança é unimodal, garantindo que algoritmos de ascensão de gradiente convirjam para o máximo global independentemente das condições iniciais.

Considere a probabilidade de uma configuração  $\mathbf{s}$  dada pela distribuição de Boltzmann

$$P(\mathbf{s}|\boldsymbol{\theta}) = \frac{e^{-H(\mathbf{s};\boldsymbol{\theta})}}{Z(\boldsymbol{\theta})}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $Z(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\mathbf{s}} e^{-H(\mathbf{s};\boldsymbol{\theta})}$  é a função de partição e  $\boldsymbol{\theta}$  representa o vetor de parâmetros ajustáveis. O Hamiltoniano é expresso como uma combinação linear de operadores conjugados

$$H(\mathbf{s}; \boldsymbol{\theta}) = - \sum_{\mu} \theta_{\mu} O_{\mu}(\mathbf{s}), \quad (\text{A.2})$$

onde  $\theta_{\mu}$  denota um acoplamento específico (como os campos locais  $h_i$  ou as interações  $J_{ij}$ ) e  $O_{\mu}(\mathbf{s})$  é a variável conjugada associada. Para os campos e acoplamentos usuais, os operadores são  $s_i$  e  $s_i s_j$ , respectivamente.

A log-verossimilhança média por amostra é definida como

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \langle \ln P(\mathbf{s}|\boldsymbol{\theta}) \rangle_{obs} = \sum_{\mu} \theta_{\mu} \langle O_{\mu} \rangle_{obs} - \ln Z(\boldsymbol{\theta}). \quad (\text{A.3})$$

Para analisar a curvatura da função, calculamos inicialmente o gradiente. A derivada em relação a um parâmetro genérico  $\theta_{\nu}$  é dada por

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_{\nu}} = \langle O_{\nu} \rangle_{obs} - \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \theta_{\nu}}. \quad (\text{A.4})$$

Utilizando a identidade  $\frac{\partial Z}{\partial \theta_{\nu}} = \sum_{\mathbf{s}} O_{\nu}(\mathbf{s}) e^{-H(\mathbf{s})} = Z \langle O_{\nu} \rangle_{mod}$ , recuperamos a regra de aprendizado clássica das Máquinas de Boltzmann (Ackley *et al.*, 1985)

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_{\nu}} = \langle O_{\nu} \rangle_{obs} - \langle O_{\nu} \rangle_{mod}. \quad (\text{A.5})$$

A curvatura da função é determinada pela Matriz Hessiana  $\mathcal{H}$ , composta pelas segundas derivadas  $\mathcal{H}_{\nu\lambda} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}}{\partial \theta_{\nu} \partial \theta_{\lambda}}$ . Derivando a Equação A.5 em relação a um segundo parâmetro  $\theta_{\lambda}$ , e notando que o termo  $\langle O_{\nu} \rangle_{obs}$  independe dos parâmetros do modelo, obtemos

$$\mathcal{H}_{\nu\lambda} = - \frac{\partial \langle O_{\nu} \rangle_{mod}}{\partial \theta_{\lambda}}. \quad (\text{A.6})$$

Para calcular explicitamente a derivada da média do modelo, aplicamos a regra da derivada do produto à definição de média no *ensemble* canônico. O cálculo resulta na relação entre a suscetibilidade do modelo e as flutuações dos observáveis:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle O_v \rangle_{mod}}{\partial \theta_\lambda} &= \langle O_v O_\lambda \rangle_{mod} - \langle O_v \rangle_{mod} \langle O_\lambda \rangle_{mod} \\ &= \text{Cov}(O_v, O_\lambda). \end{aligned} \tag{A.7}$$

Portanto, a Matriz Hessiana é dada pelo negativo da matriz de covariância:

$$\mathcal{H}_{v\lambda} = -\text{Cov}(O_v, O_\lambda). \tag{A.8}$$

A matriz de covariância é, por definição, positiva semi-definida, uma vez que a variância de qualquer combinação linear de variáveis aleatórias é não-negativa. Consequentemente, a Matriz Hessiana é negativa semi-definida em todo o espaço de parâmetros. Isso demonstra que a função de log-verossimilhança é côncava, assegurando que qualquer máximo local encontrado pelo algoritmo é, de fato, um máximo global.