

Laboratório Nacional de Computação Científica
Programa de Pós Graduação em Modelagem Computacional

**Método de *lattice* Boltzmann em hemodinâmica
computacional: interações fluido-estrutura e modelos
acoplados 1D-3D**

Por

Daniel Reis Golbert

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2013

MÉTODO DE *LATTICE* BOLTZMANN EM HEMODINÂMICA
COMPUTACIONAL: INTERAÇÕES FLUIDO-ESTRUTURA E
MODELOS ACOPLADOS 1D-3D

Daniel Reis Golbert

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO LABORATÓRIO NACIONAL
DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS
EM MODELAGEM COMPUTACIONAL

Aprovada por:

Prof. Pablo Javier Blanco, D.Sc.

(Presidente)

Prof. Gilson Antônio Giraldi, D.Sc.

Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior, Ph.D.

Prof. Gustavo Carlos Buscaglia, Ph.D.

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL
ABRIL DE 2013

Golbert, Daniel Reis

G617m Método de *lattice* Boltzmann em hemodinâmica computacional: interações fluido-estrutura e modelos acoplados 1D-3D / Daniel Reis Golbert. Petrópolis, RJ. : Laboratório Nacional de Computação Científica, 2013.

xx, 237 p. : il. (algumas color.); 29 cm

Orientadore(s): Pablo Javier Blanco e Raúl Antonino Feijóo

Tese (Doutorado) – Laboratório Nacional de Computação Científica, 2013.

1. Mecânica dos fluidos. 2. Lattice Boltzmann. 3. Sistema cardiovascular. 4. Hemodinâmica computacional. 5. Interações fluido-estrutura. 6. Modelos dimensionalmente heterogêneos. I. Blanco, Pablo Javier. II. Raúl Antonino Feijóo. III. MCT/LNCC. IV. Título.

CDD – 532

“A mente que se abre a uma nova idéia
jamais voltará ao seu tamanho original.”
(Albert Einstein)

A minha amada esposa Daiane.

Agradecimentos

Agradeço a minha família por todo amor, apoio e incentivo que sempre me proporcionaram.

Em especial a minha esposa Daiane por estar sempre ao meu lado.

Ao meu orientador Pablo Javier Blanco por trilhar, junto comigo, no desenvolvimento deste trabalho e por sua constante dedicação.

Ao professor Raúl Antonino Feijóo pela excelente co-orientação.

Aos colegas de trabalho e colaboradores que me auxiliaram no decorrer do trabalho.

Aos membros da banca avaliadora, por suas importantes contribuições no fechamento de um lindo trabalho.

Ao Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) e aos professores e funcionários pelo ótimo convívio.

Este trabalho foi realizado com apoio financeiro da Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ).

Resumo da Tese apresentada ao LNCC/MCT como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

**MÉTODO DE *LATTICE* BOLTZMANN EM HEMODINÂMICA
COMPUTACIONAL: INTERAÇÕES FLUIDO-ESTRUTURA E
MODELOS ACOPLADOS 1D-3D**

Daniel Reis Golbert

Abril , 2013

Orientador: Pablo Javier Blanco, D.Sc.

Co-orientador: Raúl Antonino Feijóo, D.Sc.

O objetivo deste trabalho é estudar a modelagem do escoamento de fluidos incompressíveis, visando modelar a hemodinâmica presente no sistema cardiovascular humano. Para tanto, vamos usar método de *lattice* Boltzmann (LBM), baseado na cinética mesoscópica, que permite simular o comportamento macro-contínuo da dinâmica de fluidos. Acoplado a este método, será usado um método de fronteira imersa para modelar as interações entre fluido e estrutura (como ocorre entre o sangue e a parede arterial). Ainda, visando a modelagem de condições fisiológicas realistas, será empregada uma abordagem de acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos. Para isto serão desenvolvidos algoritmos para acoplar o LBM com um método de diferenças finitas, para a modelagem unidimensional do escoamento de sangue em vasos deformáveis. Serão detalhados diversos aspectos e desenvolvimentos teóricos dos métodos introduzidos e faremos estudos de caráter numérico, através de simulações de problemas estacionários e transientes, cujas características são similares às encontradas na modelagem do escoamento sanguíneo em artérias. Visando prover técnicas e orientações para a modelagem do escoamento sanguíneo no sistema arterial em regime fisiológico de forma acurada e computacionalmente eficiente por meio do uso do LBM.

Abstract of Thesis presented to LNCC/MCT as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Sciences (D.Sc.)

**LATTICE BOLTZMANN METHOD IN COMPUTATIONAL
HEMODYNAMICS: FLUID-STRUCTURE INTERACTIONS AND
1D-3D COUPLED MODELS**

Daniel Reis Golbert

April, 2013

Advisor: Pablo Javier Blanco, D.Sc.

Co-advisor: Raúl Antonino Feijóo, D.Sc.

The goal of this work is to study the modeling of incompressible fluid flows, aiming to model the hemodynamics that takes place in the human cardiovascular system. For that, we will use the lattice Boltzmann method (LBM), based on a mesoscopic description of kinetics, which allows the simulation of the macro-continuum behavior of the fluid dynamics. Coupled to this method, an immersed boundary method will be used to model the fluid-structure interactions (as it happens between the blood and the arterial wall). Further, with the modeling of realistic physiological boundary conditions in mind, an approach will be developed for the coupling of dimensionally-heterogeneous models. To accomplish this task we will develop algorithms to couple the LBM to a finite difference method to simulate one-dimensional blood flows in compliant vessels. We will detail several aspects and theoretical developments of these methods and, as well, we will perform numerical studies, through simulations of stationary and transient problems, whose characteristics resemble to those found in the modeling of the blood flow in arteries. Always with the aim of providing techniques and orientations about the blood flow modeling in the arterial system at physiological regimes, with an accurate and computationally efficient approach by means of the LBM.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Motivação	2
1.2	Método de <i>lattice</i> Boltzmann	3
1.3	Modelagem de interações fluido-estrutura	5
1.4	Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos	7
1.5	Objetivos	8
1.6	Produção científica derivada deste trabalho	10
1.6.1	Publicações em revistas científicas	10
1.6.2	Publicações em congressos	11
2	Aspectos teóricos do método de <i>lattice</i> Boltzmann	14
2.1	Introdução ao Método de <i>lattice</i> Boltzmann (LBM)	15
2.2	Equação de <i>lattice</i> Boltzmann (LBE)	18
2.3	<i>Lattices</i>	22
2.4	Distribuições de equilíbrio	26
2.5	Condições de contorno	29
2.5.1	Condições de contorno de velocidade	30
2.5.2	Condições de contorno de pressão	33
2.6	Análise assintótica	38
3	Modelagem de escoamentos incompressíveis	47
3.1	Parâmetros do modelo	48

3.2	Validação e exemplos numéricos em 2D	51
3.2.1	Escoamento de Poiseuille	52
3.2.2	Cavidade quadrada	53
3.2.3	Escoamento de Womersley	57
3.3	Validação e exemplos numéricos em 3D	61
3.3.1	Cavidade cúbica	62
3.3.2	Escoamento de Womersley	65
3.4	Modelagem do escoamento sanguíneo	69
3.4.1	Vaso arterial com anastomose	70
3.4.2	Escoamento sanguíneo na artéria vertebral	72
3.4.3	Estudo da hemodinâmica em geometria tipo aneurisma	77
3.5	Análise de estabilidade e modelos de distribuição de equilíbrio	82
3.5.1	Uma distribuição de equilíbrio mais geral	83
3.5.2	Análise de estabilidade de von Neumann	86
3.5.3	Análise numérica de estabilidade	88
3.6	Paralelização e desempenho da implementação do LBM	90
3.6.1	Paralelização híbrida MPI-OpenMP	92
3.6.2	Escalabilidade	93
3.6.3	Comparação da acurácia e do desempenho contra o FEM	96
4	Modelagem de interações fluido-estrutura	112
4.1	Introdução	113
4.2	Método acoplado de <i>lattice</i> Boltzmann e Fronteira Imersa	115
4.2.1	Modelo contínuo	115
4.2.2	Acoplamento entre os métodos LB e IB	117
4.3	Validações e exemplos numéricos	122
4.3.1	Membrana pressurizada com deformação inicial	122
4.3.2	Escoamento de Womersley em 3D	125
4.4	Propagação de ondas de pressão em vasos	128
4.4.1	Propagação de ondas de pressão em 2D	128

4.4.2	Propagação de ondas de pressão em 3D	131
4.5	Investigação numérica do esquema de acoplamento	134
4.6	Modelagem do efeito da pressão hidrostática	140
4.6.1	Estratégia de decomposição da pressão	141
4.6.2	Validação e análise numérica	145
5	Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos	155
5.1	Introdução	156
5.2	Modelo 1D	157
5.2.1	Equações de balanço	157
5.2.2	Esquema de diferenças finitas	159
5.3	Perfil de velocidade composto	163
5.3.1	Composição das soluções de Womersley	164
5.3.2	Esquema iterativo para obter o perfil de velocidade	165
5.4	Validações e exemplos numéricos do modelo 1D	168
5.4.1	Escoamento de Poiseuille	168
5.4.2	Escoamento de Womersley	170
5.5	Acoplamento entre o modelo 1D e o modelo 3D	173
5.5.1	Esquemas numéricos de acoplamento	175
5.5.2	Acoplamento entre os métodos de DF e LB	176
5.6	Validações e exemplos numéricos do modelo acoplado 1D-3D	180
5.6.1	Escoamento de Womersley em tubo rígido	180
5.6.2	Escoamento de Womersley em tubo quase rígido	183
5.7	Modelagem 1D-3D de escoamentos sanguíneos	185
5.7.1	Escoamento sanguíneo na artéria cerebral média	186
5.7.2	Escoamento sanguíneo na aorta abdominal	193
6	Conclusão	206
6.1	Discussão	206
6.2	Principais contribuições	210

6.3	Trabalhos futuros	211
-----	-----------------------------	-----

Referências Bibliográficas	213
-----------------------------------	------------

Apêndice

A	Pseudo-códigos e otimizações dos algoritmos	230
A.1	Implementação do LBM	230
A.1.1	Pseudo-código	231
A.1.2	Otimizações	232
A.2	Implementação do método acoplado LB-IB	234
A.2.1	Pseudo-código	234
A.2.2	Otimizações	236

Lista de Figuras

Figura

2.1	Fluxograma das etapas do LBM	21
2.2	Modelo de <i>lattice</i> $D2Q9$ (8 velocidades não nulas) e seus pesos.	24
2.3	Modelo de <i>lattice</i> $D3Q19$, com 18 velocidades não nulas.	26
2.4	Condição de contorno de velocidade do tipo interpolação	32
2.5	Condição de contorno de pressão do tipo colisão na célula em 2D.	35
3.1	Ilustração do esquema para o escoamento de Poiseuille.	52
3.2	Comparações dos resultados do escoamento de Poiseuille	54
3.3	Ilustração do esquema para o problema da cavidade quadrada.	54
3.4	Componentes u_x e u_y e linhas de corrente na cavidade quadrada	56
3.5	Ilustração do esquema para o escoamento de Womersley em 2D.	58
3.6	Magnitude da velocidade em 4 instantes para $Wo = 15$	59
3.7	Componente u_x ao longo de uma linha vertical para $Wo = 15$	60
3.8	Distribuições de partículas no escoamento de Womersley em 2D	62
3.9	Figura ilustrativa do esquema para o escoamento na cavidade cúbica.	63
3.10	Componentes u_x e u_y no problema da cavidade cúbica	65
3.11	Figura ilustrativa do esquema para o escoamento de Womersley em 3D.	66
3.12	Perfis de velocidade em canais com relações de aspecto distintas	69
3.13	Componente u_x do escoamento de Womersley em 3D	70
3.14	Descrição da geometria do vaso arterial com anastomose.	71
3.15	Perfis de velocidade das simulações em vasos com anastomose	72

3.16	Linhas de corrente no vaso com anastomose (LBM e <i>in vitro</i>)	72
3.17	Ilustração do segmento de artéria vertebral e condições de contorno	73
3.18	Perfis de velocidade sobre linhas ao longo da artéria vertebral	76
3.19	Perfis de velocidade tridimensionais ao longo da artéria vertebral . .	76
3.20	Tensão cisalhante sobre a parede da artéria vertebral	77
3.21	Componente viscosa da tensão cisalhante sobre a parede da artéria vertebral	78
3.22	Ilustração da geometria representando um vaso cilíndrico com um aneurisma sacular esférico.	79
3.23	Isosuperfícies de velocidade e escoamento secundário em torno do aneurisma	79
3.24	Principal componente da vorticidade média em torno do aneurisma	81
3.25	Limites da componente principal da vorticidade e a dependência da principal frequência de ressonância sobre o número de Reynolds . .	82
3.26	Mapa de estabilidade linear para a equação de <i>lattice</i> Boltzmann bidimensional	89
3.27	Ilustração do esquema para o escoamento de Poiseuille.	89
3.28	Máximos Reynolds no escoamento de Poiseuille	91
3.29	Erros relativos máximos no escoamento de Poiseuille	92
3.30	Fluxograma da paralelização híbrida da implementação do LBM. . .	94
3.31	Curvas de desempenho da implementação do LBM no cluster Bull .	95
3.32	Curvas de desempenho no cluster do ANL.	97
3.33	Decaimento quadrático dos erros relativos médios	100
3.34	Erros relativos obtidos por FEM e LBM sobre planos	101
3.35	Componentes da velocidade plotadas sobre linhas no cubo	102
3.36	Linhas de corrente da velocidade projetada sobre dois planos no cubo	103
3.37	Dois conjuntos de linhas de corrente tridimensionais da velocidade .	104
3.38	Valor divergência do campo de velocidade normalizada no cubo . .	105
3.39	Erro relativo médio no problema transiente via LBM e FEM	106

3.40	Escalabilidade forte da implementação do LBM no cluster Bull	107
3.41	Tempo de parede da simulação do problema transiente via LBM e FEM	108
3.42	Tempos de simulação em relação ao erro médio e ao espaçamento .	109
3.43	Escalabilidade fraca das implementações do LBM e FEM no cluster Bull	109
4.1	Ilustração do mapeamento da força para as células vizinhas	118
4.2	Fluxograma das rotinas do método acoplado LB-IB implícito	121
4.3	Ilustração da geometria da membrana esticada imersa em 2D	123
4.4	Variação dos dois raios da membrana imersa até a fase estacionária.	124
4.5	Oscilações de pressão no ponto central C até a fase estacionária. . .	124
4.6	Ilustração do escoamento de Womersley com paredes modeladas por estrutura	126
4.7	Perfis de velocidade tridimensionais do escoamento de Womersley com paredes quase rígidas	127
4.8	Fluxos no tubo com paredes quase rígidas do escoamento de Womersley em 3D	127
4.9	Ilustração do problema bidimensional de propagação de ondas	129
4.10	Formato da onda de pressão ao longo do canal	130
4.11	Deslocamento da onda de pressão ao longo de dois períodos	130
4.12	Ilustração do problema tridimensional de propagação de ondas	132
4.13	Curva de ajuste das velocidades das ondas de pressão	133
4.14	Fluxograma das rotinas do método acoplado LB-IB explícito	135
4.15	Fluxo de entrada e saída do vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$ em função do tempo	136
4.16	Volume do vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$ em função do tempo	137
4.17	Perfis de velocidade na saída do vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$	137
4.18	Pressão máxima no vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$ em função do tempo .	138
4.19	Gradiente e pressão hidrostática na aorta abdominal	142

4.20	Gradiente e pressão hidrostática na artéria cerebral média	142
4.21	Ilustração do efeito da pressão hidrostática sobre um vaso.	143
4.22	Fluxos e erros ao dilatar e contrair um vaso com frequência de 2Hz	147
4.23	Fluxos e erros ao dilatar e contrair um vaso com frequência de 4Hz	148
4.24	Fluxos e erros ao dilatar e contrair um vaso com frequência de 8Hz	149
4.25	Fluxos ao oscilar p_G à 16Hz e p_H à 2Hz, 4Hz e 8Hz	151
4.26	Fluxos ao oscilar p_G à 8Hz e p_H à 2Hz, 4Hz e 8Hz	151
4.27	Fluxos ao oscilar p_G à 4Hz e p_H à 2Hz, 4Hz e 8Hz	152
4.28	Fluxos ao oscilar p_G à 2Hz e p_H à 2Hz, 4Hz e 8Hz	153
5.1	Ilustração dos nós onde são calculados a pressão e o fluxo no modelo 1D	160
5.2	Figura ilustrativa do escoamento de Womersley em 3D e sua simplificação para um segmento 1D	164
5.3	Fluxograma do esquema para estimar o perfil de velocidade transiente em um escoamento unidimensional.	167
5.4	Figura ilustrativa do escoamento de Poiseuille em 1D.	169
5.5	Curvas de fluxo da solução numérica com perfil parabólico e da solução analítica do escoamento de Womersley	170
5.6	Valores dos termos α e ζ no escoamento de Womersley	171
5.7	Valores do termo ζ^* no escoamento de Womersley	172
5.8	Fluxo do modelo 1D com perfil de Womersley	172
5.9	Fluxograma das rotinas do método acoplado 1D-3D	177
5.10	Ilustração do acoplamento 1D-3D no escoamento de Womersley em tubos rígidos	181
5.11	Ilustração do acoplamento 1D-3D no escoamento de Womersley em tubos quase rígidos	183
5.12	Fluxos no escoamento de Womersley 1D-3D com paredes quase rígidas	184
5.13	Pressão ao longo do vaso na modelagem 1D-3D do escoamento de Womersley em tubos quase rígidos	184

5.14	Número de iterações no escoamento de Womersley em tubos quase rígidos	185
5.15	Pressão hidrostática e gradiente de pressão na artéria cerebral média	187
5.16	Fluxo na artéria cerebral média do modelo 1D de diferenças finitas .	187
5.17	Fluxo na artéria cerebral média dos modelos 1D e 3D	188
5.18	Fluxo na artéria cerebral média dos modelos 1D, 3D e 1D-3D	189
5.19	Ilustração do acoplamento feito na modelagem da artéria cerebral .	190
5.20	Fluxo na artéria cerebral média dos modelo 1D, 3D e 1D-3D com diferentes particionamentos do domínio	190
5.21	Curvas de área e fluxo ao longo da artéria cerebral média	191
5.22	Número de iterações no escoamento na artéria cerebral média . . .	192
5.23	Pressão hidrostática e gradiente de pressão na aorta abdominal . . .	193
5.24	Fluxo obtido na modelagem 1D com perfil parabólico do escoamento em um segmento da aorta abdominal.	194
5.25	Fluxos do modelo 1D e 3D na aorta abdominal	195
5.26	Perfis de velocidade do escoamento na aorta abdominal	196
5.27	Coefficientes dos senos e cossenos na decomposição da curva de fluxo em frequências discretas de até 150Hz.	197
5.28	Curva de fluxo recuperada da decomposição frequências e o erro da aproximação	198
5.29	Perfis de velocidade dos modelos 1D e 3D na aorta abdominal . . .	199
5.30	Valores dos termos ζ e ζ^* na aorta abdominal	200
5.31	Fluxos do modelo 1D com dois perfis de velocidade e do modelo 3D na aorta abdominal	201
5.32	Fluxos do modelo 1D com dois perfis de velocidade e dos modelos 3D e 1D-3D na aorta abdominal	202
5.33	Curvas de área e fluxo ao longo da aorta abdominal	203
5.34	Número de iterações no escoamento na aorta abdominal	204

Lista de Tabelas

Tabela

2.1	Modelos de <i>lattice</i> tridimensionais	26
3.1	Técnicas para o ajuste de parâmetros em simulações transientes via LBM	50
3.2	Posição dos centros dos vórtices na cavidade quadrada	57
3.3	Erro relativo e erro de compressibilidade no escoamento de Womersley	67
3.4	Erros de compressibilidade e proporção θ_r	68
3.5	Malhas do teste de comparação entre LBM e FEM	99
3.6	Erros dos problemas estacionário e transiente nas malhas testadas. .	107
4.1	Velocidade de propagação da onda de pressão em um canal bidimensional	131
4.2	Valor máximo de $\Delta t_s/\Delta t_f$ na propagação de ondas	139
4.3	Desempenho em MLUPS da simulação de propagação de ondas em 3D	140
5.1	Custo computacional e erro máximo dos esquemas numéricos	181
5.2	Número de iterações para cada sub-relaxação	182

Lista de Siglas, Abreviaturas e Símbolos

Siglas e Abreviaturas:

- 2D: duas dimensões
- 3D: três dimensões
- AR: relação de aspecto geométrica
- BGK: referente ao trabalho de Bhatnagar et al. (1954)
- DF: método de diferenças finitas
- FEM: método de elementos
- IBM: método de fronteira imersa
- LB: *lattice* Boltzmann
- LBE: equação de *lattice* Boltzmann
- LBGK: *lattice* BGK
- LBM: método de *lattice* Boltzmann
- LB-IB: *lattice* Boltzmann e fronteira imersa
- LGCA: *Lattice-Gas* Autômato Celular
- N-S: Navier–Stokes
- SCVH: sistema cardiovascular humano

Símbolos:

- A : área da seção transversal do vaso
- c_s : velocidade do som
- \mathbf{e}_i : direção das distribuições de partículas no LBM
- E : coeficiente de elasticidade linear
- f_i : distribuição de partículas do LBM
- f_i^{eq} : distribuição de equilíbrio do LBM
- \mathbf{f} : força da estrutura sólida imersa atuando sobre o fluido
- \mathbf{F} : força que a estrutura exerce
- h : espessura da estrutura
- \hat{i} : unidade imaginária
- L : comprimento característico
- M : número de Mach
- P : pressão normalizada
- p : pressão
- R : raio do vaso
- Re : número de Reynolds
- \mathbf{s} : comprimento de fibra (área em 3D) do segmento de estrutura
- T : período característico
- \mathbf{u} : velocidade do fluido
- \mathbf{U} : velocidade dos nós da estrutura
- v : módulo da velocidade das partículas do LBM
- \mathbf{X} : posição espacial dos nós da estrutura
- Δt : espaçamento entre instantes no domínio temporal
- Δx : espaçamento do *lattice* no domínio espacial
- ℓ : número de direções do *lattice*
- Ω_f : domínio do fluido
- κ : número de Womersley
- ν : viscosidade cinemática do fluido
- μ : viscosidade do fluido
- η : frequência de oscilação
- ρ : densidade do fluido
- τ : parâmetro de relaxamento do LBM
- τ_w : magnitude da tensão cisalhante
- σ : tensor de tensão em fluidos
- ω_i : pesos da distribuição de equilíbrio
- θ_r : relação entre o tempo característico e o de propagação da onda sonora sobre o comprimento característico
- \mathcal{S}_f : relação constitutiva da estrutura
- Γ_b : domínio da fronteira imersa
- $\delta(\cdot)$: função delta de Dirac
- α : fator de forma do momento
- ζ : fator de forma da velocidade

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho estudamos a modelagem do escoamento incompressível de fluidos, visando modelar a hemodinâmica presente no sistema cardiovascular humano (SCVH). Mais especificamente, desenvolvemos, adaptamos e analisamos o uso de métodos numéricos do tipo *lattice* Boltzmann na modelagem do escoamento sanguíneo em vasos arteriais deformáveis através de modelos dimensionalmente heterogêneos.

Começamos este capítulo introdutório com a motivação desta modelagem e a contextualização do problema na Seção 1.1. Nas seções seguintes fazemos uma breve introdução aos métodos numéricos encontrados na literatura em cada tópico, sendo maiores detalhes de cada método encontrados nos capítulos referentes. Na Seção 1.2 introduzimos o método de *lattice* Boltzmann (LBM), adotado para modelagem do escoamento incompressível de fluidos, e fazemos uma revisão dos principais avanços neste tipo de metodologia. A importância da modelagem de interações entre fluido e estrutura em problemas hemodinâmicos e as formas encontradas na literatura para realizar tal modelagem são descritas na Seção 1.3. Na Seção 1.4 destacamos as vantagens que o acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos proporciona na modelagem de redes arteriais, assim como, revisamos trabalhos que mostram sua viabilidade, acurácia e eficiência computacional. Por fim, explanamos os objetivos gerais e específicos deste trabalho na Seção 1.5 e as publicações científicas derivadas do mesmo na Seção 1.6.

1.1 Motivação

Ao longo das últimas duas décadas a comunidade científica tem reconhecido que o desenvolvimento de diversas patologias no sistema cardiovascular humano (SCVH) está intimamente relacionado com fatores hemodinâmicos. Entre elas, podemos destacar a aterosclerose, principal causa de doenças coronárias, que são a maior causa de mortes no mundo hoje e, segundo Garcia-Garcia et al. (2010), continuarão a ser a maior causa até 2030. Diversos autores [Giannoglou et al. (2002), Coskun et al. (2006), Morbiducci et al. (2007)] correlacionam a localização de placas de ateroma com condições hemodinâmicas específicas, como: baixo valor médio da tensão cisalhante e tensão cisalhante oscilatória na parede arterial, alto tempo de residência de partículas, entre outros. Por isso, uma descrição detalhada da hemodinâmica que ocorre em distritos vasculares de interesse de um paciente específico pode servir como ferramenta auxiliar no prognóstico e diagnóstico de patologias, assim como, no planejamento cirúrgico.

As formas de se obter informações da hemodinâmica que ocorre em distritos vasculares de pacientes específicos são através de medições invasivas e não invasivas feitas no paciente ou através de simulações via experimentos *in vitro* ou experimentos numéricos. As medições não invasivas feitas em pacientes podem ser tomadas em vasos próximos da epiderme, onde se pode obter informações como o fluxo¹ e a pressão local, sem detalhamento espacial. As medições invasivas podem ser feitas em um conjunto mais amplo de segmentos arteriais e com maior precisão, porém são mais custosas e podem gerar complicações à saúde do paciente. Por outro lado, a construção de experimentos *in vitro* também apresenta custo elevado, em especial se quisermos estudar a geometria de um segmento arterial de um paciente específico.

Com isso, a alternativa que se apresenta viável, quando desejamos obter informações detalhadas da hemodinâmica em segmentos arteriais, é a modelagem e simulação computacional do escoamento sanguíneo. Nesses procedimentos,

¹ neste trabalho usamos a denominação fluxo no sentido de vazão.

a geometria dos vasos pode ser obtida pela segmentação de imagens médicas (ressonância magnética, tomografia computadorizada, entre outros) e o sangue e a parede arterial podem ser modelados de distintas formas. Algumas das dificuldades enfrentadas com este tipo de modelagem são a complexidade do comportamento das paredes arteriais e do sangue e a obtenção de condições de contorno a serem impostas nas extremidades dos segmentos. Estas últimas, têm um papel fundamental, pois determinam o ambiente hemodinâmico ao qual está submetido o escoamento em um dado local de interesse.

A hemodinâmica do SCVH envolve fenômenos de natureza hidrodinâmica, mecânica, biológica e química. Neste trabalho serão modelados os fenômenos hidrodinâmicos e mecânicos, considerando o sangue como um fluido incompressível e as paredes arteriais como estruturas mecânicas deformáveis com comportamento elástico.

1.2 Método de *lattice* Boltzmann

Como mencionado na seção anterior, a forma mais viável de obtermos uma descrição detalhada dos campos de pressão e velocidade em um segmento arterial de interesse se dá pela modelagem computacional (no espaço tridimensional) do escoamento sanguíneo que ali ocorre. Neste trabalho, tal modelagem, será realizada através do método numérico de *lattice* Boltzmann (LBM), o qual tem sido aplicado com sucesso, nos últimos anos, na modelagem de várias aplicações da hemodinâmica [Pelliccioni et al. (2007), Dupin et al. (2008), Schelin et al. (2009), He et al. (2009b)].

Diferindo dos métodos tradicionais, que se baseiam na discretização das equações de Navier–Stokes para modelar o escoamento de fluidos, o LBM obedece a equações da cinética mesoscópica que representam a dinâmica de distribuições de micro-partículas. O LBM foi derivado a partir do método *lattice-gas* autômato celular (LGCA) [Rothman (2004)] e da equação de Boltzmann [Abe (1997)]. Este é um método explícito onde são descritas as colisões e deslocamentos de

distribuições de partículas (com densidade contínua) na mesoescala, com direções de deslocamento, tempo e espaço discretos. Onde, a equação que governa o LBM (denominada equação de *lattice* Boltzmann) aproxima as equações de Navier–Stokes através de uma expansão assintótica em multiescala de Chapman Enskog He e Luo (1997b).

Este método foi introduzido na década de 1980 e, desde então, passou por uma série de refinamentos e extensões que o levaram ao ponto onde é possível simular com sucesso vários fenômenos complexos, variando desde a fenomenologia da turbulência homogênea de fluidos incompressíveis até escoamentos multifásicos em meios porosos [Benzi et al. (1992), Qian et al. (1995b), Qian et al. (1995a)]. Além disso, o LBM também tem sido empregado na modelagem do escoamento sanguíneo em artérias cerebrais [He et al. (2009b)], em válvulas cardíacas mecânicas [Pelliccioni et al. (2007), Krafczyk et al. (1998)], em aneurismas [Hirabayashi et al. (2006)], na aorta abdominal [Artoli et al. (2006b)], além de regiões de micro circulação [Hyakutake et al. (2006)], modelagem de hemácias [Dupin et al. (2008)], formação de trombos [Schelin et al. (2009)], entre outros.

Neste trabalho propomos e analisamos formas de modelar o escoamento sanguíneo nos principais vasos arteriais do SCVH. Muitos dos trabalhos mencionados acima não tratam de condições de contorno fisiológicas (pressões ou fluxos obtidos através de medições ou de uma modelagem global do SCVH) e assumem geometrias arteriais idealizadas. Aqui, analisamos exemplos onde as condições de contorno são extraídas de modelagens globais do SCVH (além de casos que possuem características semelhantes de escoamento), onde o escoamento é simulado em uma geometria obtida a partir da segmentação de imagens médicas. Também fazemos simulações de escoamentos em geometrias idealizadas, onde visamos validar a implementação e analisar os parâmetros envolvidos.

A versão escolhida do LBM utiliza um parâmetro de relaxamento simples e uma distribuição de equilíbrio voltada para minimizar efeitos de compressibilidade artificial [He e Luo (1997b)]. Além disso, trabalhamos com um conjunto de direções

de movimento que permitirá que as partículas se desloquem a cada passo temporal para um conjunto determinado de células imediatamente vizinhas. Esta escolha foi baseada nos resultados já obtidos na literatura com modelos semelhantes ao descrito acima, na simplicidade de sua implementação e na eficiente paralelização que sua implementação permite. Existem na literatura modelos mais complexos que fazem uso de relaxações múltiplas e de espaços de velocidade mais completos que os adotados neste modelo [Shan e He (1998), Philippi et al. (2006) e Shan (2006)]. Entretanto, a dificuldade que tais modelos introduzem na definição das condições de contorno faz com que não sejam viáveis em função dos objetivos do trabalho.

1.3 Modelagem de interações fluido-estrutura

A modelagem da interação fluido-estrutura que ocorre entre o sangue e as paredes arteriais é de grande importância para que os fenômenos de propagação de ondas e a complacência dos vasos sejam representados de forma correta.

Como a versão do LBM escolhida utiliza malha fixa, encontramos na literatura métodos dos tipos de grade Cartesiana [Kirkpatrick et al. (2003), Russell e Jane Wang (2003), Zhou et al. (2007), Wu e Shu (2009), Zhou e Shu (2012)] e métodos de fronteira imersa [Fang et al. (2002b), Hoekstra et al. (2004), Shu et al. (2007), Cheng e Zhang (2010)] que acoplados ao LBM permitem a modelagem da interface entre fluido e estrutura.

Nos métodos de grade Cartesiana, as células de fluido passam a ser cortadas pela estrutura. Porém, devido às estruturas irregulares das células cortadas, o cálculo dos fluxos nestas interfaces requer um tratamento complexo. Isto aumenta a complexidade da implementação e pode afetar sua eficiência computacional [Wu e Shu (2009)].

Os métodos de fronteira imersa (IBM) apresentam uma forma simples de modelar a interação entre fluido e estrutura. Neles, a estrutura com descrição Lagrangeana se encontra imersa no domínio do fluido, sem alterar sua malha ou

cortar as células. O IBM foi introduzido por Peskin (1977), quando estudava o escoamento sanguíneo no coração humano. Desde então, diversas modificações e melhorias foram propostas [Goldstein et al. (1993), Goldstein et al. (1995), Kim et al. (2001), Lima E Silva et al. (2003)], tornando o método bastante aceito na comunidade acadêmica. Recentemente, este é visto como um método geral para a modelagem computacional de sistemas biológicos interagindo com fluidos [Cheng e Zhang (2010)]. Encontramos na literatura a modelagem de escoamentos no coração humano 3D [McQueen e Peskin (2000), Lemmon e Yoganathan (2000b), Lemmon e Yoganathan (2000a)], na dinâmica de filamentos imersos [Zhu e Peskin (2002)], na agregação de hemácias [Zhang et al. (2007), Zhang et al. (2008)] e no processamento de biofilmes [Dillon et al. (1996)].

Neste trabalho propomos um método acoplado LB-IB baseado nos trabalhos de Shu et al. (2007) (acoplamento explícito) e Cheng e Li (2007) (acoplamento implícito), estendendo-os para problemas 3D com o uso de estruturas bidimensionais. Esta escolha se deve ao grau de desenvolvimento atual (com a possibilidade de acoplamentos explícitos e implícitos, quando necessário) e a simplicidade de implementação destes métodos, além dos vários exemplos de aplicações mencionados, possibilitando um amplo espectro de aplicações futuras.

Não encontramos na literatura trabalhos que modelem as paredes arteriais fazendo uso do LBM e do IBM. Neste tipo de modelagem temos a vantagem de não necessitar criar ou destruir células de fluido, como ocorre em outros métodos onde a fronteira não está imersa no fluido. Ainda, os efeitos da introdução de um fluido externo ao vaso (por conta da imersão da estrutura no fluido) podem ser minimizados em problemas onde a estrutura sofre deformações lentas.

Apesar da complexidade dos materiais biológicos, é possível modelar o comportamento das paredes arteriais, quando submetidas a valores de pressão fisiológicos, através de abordagens elásticas e isotrópicas [Weizsacker e Pinto (1988)]. Esta abordagem é viável, em especial, quando se deseja modelar o fenômeno propagatório no sistema cardiovascular. Por isso, modelamos a parede

arterial como um material puramente elástico.

Também não estão disponíveis na literatura formas de introduzir as grandes variações de pressão encontradas no SCVH em simulações via o LBM, de forma que não seja necessário aplicar refinamentos significativos da malha para manter a estabilidade numérica. Por isso, propomos uma forma de introduzir as variações de pressão através de uma decomposição da mesma.

1.4 Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos

O sistema cardiovascular humano (SCVH) pode ser considerado como a integração de diferentes partes em distintas escalas geométricas e temporais e diferentes mecanismos fisiológicos em um sistema completo com complexo comportamento estrutural e funcional [Blanco et al. (2010)]. Mesmo que algumas análises possam ser feitas de forma isolada em segmentos extraídos deste sistema, muitas análises dependem de um forte acoplamento entre os sistemas global e local e suas interações.

Por conta do alto custo computacional e dos limitados métodos disponíveis para aquisição de imagens médicas, resulta quase impraticável modelar e simular computacionalmente de maneira detalhada (3D) a hemodinâmica que ocorre em todo SCVH. Além disso, como mencionamos, ao modelar tridimensionalmente segmentos arteriais isolados estamos ignorando as interações com o sistema global e surgem, naturalmente, incertezas sobre as condições de contorno a serem impostas nos contornos artificiais do distrito isolado.

Por isso, diante da necessidade de uma modelagem acurada de escoamentos locais em distritos específicos de interesse levando em consideração a dinâmica do sistema completo, foram introduzidos os recentemente modelos acoplados 1D-3D em Formaggia (2001), Formaggia et al. (2003), Urquiza et al. (2006), Vignon-Clementel et al. (2006), Blanco et al. (2007) e Blanco et al. (2010). Onde são modelados de maneira detalhada (3D) os segmentos arteriais de maior interesse (hemodinâmica local) e de maneira simplificada (1D) o restante do sistema

(hemodinâmica global).

Este tipo de abordagem ainda não foi feita utilizando método do tipo *lattice* Boltzmann, sendo que os trabalhos mencionados utilizam abordagens de elementos finitos. Por isso, propomos um modelo de acoplamento 1D-3D sendo que na parte unidimensional usamos um método de diferenças finitas e na parte 3D usamos o método de *lattice* Boltzmann (LBM). Escolhemos um método explícito de diferenças finitas (assim como o LBM), proposto por Kufahl e Clark (1985), para o modelo unidimensional, visto que este usará um passo temporal ao menos tão pequeno quanto o do LBM.

Neste tema, fazemos um estudo focado no acoplamento entre estes modelos e suas peculiaridades. Em especial no que tange à condição de acoplamento, à modelagem equivalente dos comportamentos estruturais, à estabilidade numérica do acoplamento e à redução do custo computacional introduzido pelo mesmo.

1.5 Objetivos

Assim sendo, o objetivo geral deste trabalho é estudar, desenvolver e implementar técnicas de modelagem e simulação baseadas no método de *lattice* Boltzmann visando, de forma aditiva, (i) modelar fenômenos fluidodinâmicos de interação fluido-estrutura em segmentos arteriais e (ii) desenvolver técnicas de acoplamento de modelos 3D de *lattice* Boltzmann e modelos 1D de diferenças finitas para possibilitar o acoplamento dos fenômenos hemodinâmicos locais e globais, respectivamente.

Mais especificamente, os objetivos particulares do presente trabalho são detalhados a seguir:

- Primeiramente, procura-se estudar os aspectos teóricos do LBM de forma a discernir a classe de modelos mais adequada à aplicação que se deseja abordar. Na sequência, objetiva-se analisar os aspectos numéricos envolvidos no LBM, com o intuito de estabelecer critérios e procedimentos que nos permitam realizar a calibração dos parâmetros envolvidos no

modelo, a fim de representar fielmente as características físicas de um dado problema. De fato, este processo de calibração constitui uma etapa crucial quando se pretende realizar simulações que, em primeiro lugar, sejam estáveis e, em segundo lugar, sejam confiáveis. Toda esta parte do estudo se encontra acompanhada das correspondentes implementações computacionais do método em duas e três dimensões, as quais constituem a base para a experimentação numérica realizada. Assim como, visa-se paralelizar a implementação deste método para possibilitar a simulação de problemas complexos em tempo hábil e também para comparar seu desempenho e acurácia com uma implementação bem estabelecida de um método de elementos finitos (FEM).

- Visa-se também adaptar da literatura, assim como, propor formas de modelar as interações do tipo fluido-estrutura com o uso de métodos de fronteira imersa acoplados ao LBM. Através das quais se possa modelar, em especial, as interações entre o sangue e a parede arterial de forma acurada e computacionalmente eficiente. Aqui, se torna essencial a correta escolha dos parâmetros introduzidos por este acoplamento. Também será necessário garantir que o método acoplado se mantenha numericamente estável diante das grandes variações de pressão do SCVH.
- Por fim, para realizar o acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos temos como primeiro objetivo a análise, implementação e validação de um método que possa modelar de forma unidimensional escoamentos em vaso deformáveis, como ocorre nas artérias do SCVH. O segundo objetivo está na proposição e análise de uma forma de acoplamento deste método (1D) com o LBM (3D), de forma que se tenha consistência, acurácia e estabilidade numérica no acoplamento. O terceiro objetivo é a modelagem do escoamento sanguíneo em vasos arteriais através deste modelo acoplado 1D-3D, onde busca-se substituir segmentos tridimensionais por segmentos unidimensionais equivalentes para reduzir o

custo computacional.

Para cumprir tais objetivos, este trabalho foi dividido da seguinte forma. No Capítulo 2 abordamos a teoria do Método de *lattice* Boltzmann (LBM), em especial, no que tange à modelagem da colisão de partículas, imposição de condições de contorno e a correta aproximação das equações de Navier–Stokes. Na sequência, no Capítulo 3, tratamos da modelagem computacional do escoamento incompressível de fluidos, voltada para problemas da área de hemodinâmica, destacando aspectos práticos da modelagem computacional e simulação numérica do escoamento de fluidos, assim como, suas aplicações a diversos problemas de interesse. No Capítulo 4 tratamos da modelagem da interação fluido-estrutura, sendo que o fluido será modelado pelo método de *lattice* Boltzmann e a estrutura por um método do tipo Fronteira Imersa (IB), que será acoplado ao LBM de forma implícita ou explícita quando conveniente. No Capítulo 5 propomos um modelo acoplado dimensionalmente heterogêneo para simular o escoamento em vasos a um custo computacional reduzido. Por fim, fechamos o texto com as conclusões e considerações finais no Capítulo 6.

1.6 Produção científica derivada deste trabalho

As publicações científicas estão divididas em publicações em revistas científicas com processo de revisão e publicações em congressos.

1.6.1 Publicações em revistas científicas

- Revista: Medical engineering & physics

Autores: D.R. Golbert, P.J. Blanco, A. Clausse, R.A. Feijóo

Título: Tuning a lattice-Boltzmann model for applications in computational hemodynamics

Ano: 2012

Volume: 34

Páginas: 339-349

Qualis: A1

Fator de impacto: 2.019

- Revista: Medical engineering & physics
Autores: P.J. Blanco, D.R. Golbert, R.A. Feijóo
Título: Computational hemodynamics using Lattice-Boltzmann models:
Fluid-structure interaction and 3D-1D coupling
Etapa: Submetido
- Autores: D.R. Golbert, P.J. Blanco, A. Clausse, R.A. Feijóo
Título: On improving the stability of the lattice Boltzmann method for
incompressible flows
Etapa: Em elaboração

1.6.2 Publicações em congressos

- Evento: First Brazil-China Conference on Scientific Computing
(BCSciComp)
Autores: D.R. Golbert, P.J. Blanco, R.A. Feijóo
Título: A Lattice Boltzmann model for simulating the blood flow in large
vessels
Formato: Poster
Data: 21-25/09/2009
Local: Petrópolis - RJ
- Evento: Workshop do Sistema Nacional de Processamento de Alto
Desempenho (SINAPAD)
Autores: D. R. Golbert, P. Ziemer
Título: O Sistema HeMoLab: Simulação Numérica de Larga Escala na
Modelagem do Sistema Cardiovascular Humano
Formato: Apresentação Oral
Data: 29-30/10/2009

Local: São Paulo - SP

- Evento: Congresso Ibero-Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE)

Autores: D.R. Golbert, P.J. Blanco, R.A. Feijóo

Título: Lattice Boltzmann simulations in computational hemodynamics

Formato: Artigo completo e apresentação oral

Data: 08-11/11/2009

Local: Búzios - RJ

- Evento: International Conference on Particle-Based Methods (PARTICLES)

Autores: D.R. Golbert, P.J. Blanco, R.A. Feijóo

Título: Simulation of 2D and 3D incompressible fluid flows via a Lattice Boltzmann model

Formato: Resumo estendido e apresentação oral

Data: 25-27/11/2009

Local: Barcelona - Espanha

- Evento: III Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional

Autores: D.R. Golbert, P.J. Blanco, R.A. Feijóo

Título: Modelagem do Escoamento de Fluidos Incompressíveis via Método de Lattice Boltzmann

Formato: Resumo e Apresentação oral

Data: 12-13/01/2010

Local: Petrópolis - RJ

- Evento: Simulation and Modeling of Biological Flows (SIMBIO)

Autores: D.R. Golbert, P.J. Blanco, R.A. Feijóo

Título: Study of a Lattice-Boltzmann Immersed Boundary Coupled Method for Fluid-Structure Interactions in Hemodynamics

Formato: Artigo completo e apresentação oral

Data: 21-23/09/2011

Local: Bruxelas - Bélgica

- Evento: XXXII Congresso Ibero-Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE)

Autores: Marcelo Collares, Eduardo Camargo, Sérgio Kostin, Raquel Coelho Gomes Pinto, Daniel Golbert

Título: Using GPUs for Improving the Performance of the Numerical Simulation and Scientific Visualization of the Human Cardiovascular System

Formato: Artigo completo

Data: 13-16/11/2011

Local: Ouro Preto - MG

Capítulo 2

Aspectos teóricos do método de *lattice* Boltzmann

Neste capítulo abordamos a teoria do Método de *lattice* Boltzmann (LBM), adotado para aproximar as equações de Navier–Stokes que governam a dinâmica de escoamentos monofásicos incompressíveis. Em particular, tratamos de aspectos relacionados a métodos numéricos explícitos de forma geral, assim como, diversos aspectos específicos do LBM no que tange à modelagem da colisão de partículas, imposição de condições de contorno e à correta aproximação das equações de Navier–Stokes. Os modelos apresentados neste capítulo estão restritos a domínios espaciais que permanecem inalterados (domínios fixos no tempo) e condições de contorno clássicas (velocidade e pressão). Outros aspectos, necessários na área da hemodinâmica computacional, tais como interação fluido-estrutura e acoplamento de modelos de diferente dimensionalidade, são tratados no Capítulo 4 e no Capítulo 5, respectivamente.

O presente capítulo começa com uma introdução do LBM (Seção 2.1), revendo seu histórico de desenvolvimento e as principais referências bibliográficas. Seguido de uma breve dedução e caracterização da equação de *lattice* Boltzmann (LBE) com aproximação BGK e relaxamento simples (Seção 2.2), a qual governa a dinâmica de distribuições de micro partículas sobre um *lattice* ou malha (Seção 2.3) com colisões definidas pelo modelo de distribuição de equilíbrio (Seção 2.4). Na Seção 2.5, revisamos os modelos de imposição de condições de contorno de pressão

e velocidade. O capítulo é concluído com o desenvolvimento formal da expansão assintótica de Chapman–Enskog da LBE para aproximar as equações de Navier–Stokes (Seção 2.6).

2.1 Introdução ao Método de *lattice* Boltzmann (LBM)

Diferentemente dos métodos numéricos convencionais baseados na discretização das equações contínuas macroscópicas, o método de *lattice* Boltzmann é baseado em modelos microscópicos e equações que governam a cinética em um nível mesoscópico. Sua idéia fundamental é construir modelos cinéticos simplificados que incorporem a física essencial de processos microscópicos, ou mesoscópicos, tais que as propriedades na escala macroscópica obedçam a equações desejadas. De acordo com Kadanoff (1986), a premissa básica para usar estes métodos simplificados para modelar o escoamento de fluidos em uma escala macroscópica é que “a dinâmica macroscópica de um fluido é o resultado do comportamento coletivo de várias partículas microscópicas do sistema e, além disso, a dinâmica macroscópica não é sensível aos detalhes subjacentes da física microscópica”.

Historicamente, encontra-se a idéia de usar uma equação cinética simplificada, com um único módulo de velocidade característico do modelo, para simular escoamentos de fluidos no trabalho de Broadwell (1964). De fato, pode-se ver o modelo de Broadwell simplesmente como uma equação de *lattice* Boltzmann unidimensional. Porém, neste modelo, apesar de encontrarmos a velocidade das partículas discretizadas, o espaço e o tempo eram variáveis contínuas. O modelo completamente discreto denominado HPP, onde encontramos espaço e tempo discretizados em um *lattice* (ou malha) quadrado, foi proposto por Hardy et al. (1976) para estudar propriedades de transporte dos fluidos. Este tipo de modelo ficou conhecido como *Lattice-Gas* ou *Lattice-Gas* Autômato Celular (LGCA) devido a sua natureza discreta. Somente dez anos depois, no trabalho inspirador do método LGCA para hidrodinâmica bidimensional, Frisch et al. (1986)

reconheceram a importância da simetria do *lattice* para recuperar as equações de Navier–Stokes (N-S). Assim, pela primeira vez, foram obtidas as equações de N-S a partir de um método LGCA, o qual ficou conhecido como modelo FHP, fazendo uso de um *lattice* hexagonal. Outro trabalho importante para o LGCA, também desta época, foi o estudo de um modelo tridimensional usando um *lattice* hipercúbico centrado nas faces, denominado FCHC [D’Humières et al. (1986)].

O LBM é um método originário historicamente do método LGCA e considera uma dinâmica molecular de partículas fictícias (mais precisamente, distribuições de partículas) na qual o espaço, o tempo e as velocidades das partículas são discretos, porém a velocidade e densidade resultantes em um nó do *lattice* variam de forma contínua. Esta continuidade se deve ao fato de enxergarmos as distribuições contínuas das micro-partículas, por estarmos trabalhando em um nível mesoscópico. Devido ao fato da forma cinética continuar a mesma do LGCA, as vantagens da localidade são mantidas, levando à fácil implementação computacional do método através do paradigma de computação paralela. Por outro lado, dois trabalhos independentes [He e Luo (1997a) e Abe (1997)] mostraram que se pode também ver o LBM como uma forma simplificada da equação cinética de Boltzmann na qual todos os detalhes do movimento molecular são removidos, exceto aqueles que são essenciais para se recuperar o comportamento macroscópico desejado. Uma breve derivação da equação de *lattice* Boltzmann a partir da equação simplificada de Boltzmann é exposta na Seção 2.2. Além disso, encontram-se na literatura derivações para casos que consideram escoamentos compressíveis e problemas termo-hidráulicos [Shan e He (1998), Philippi et al. (2006) e Shan (2006)], assuntos que não serão tratados neste trabalho.

Uma importante simplificação do LBM foi feita por Higuera e Jiménez (1989), onde o operador de colisão foi linearizado assumindo que a distribuição está próxima ao estado de equilíbrio local. Um operador de colisão melhorado, com estabilidade linear, foi proposto no mesmo ano por Higuera et al. (1989). Uma versão bastante utilizada do operador de colisão é a aproximação denominada

BGK (em referência ao trabalho de Bhatnagar et al. (1954)), que utiliza um termo de relaxamento em direção ao equilíbrio local. Esta versão foi sugerida independentemente nos trabalhos de Qian (1990) e Chen et al. (1991). Neste modelo denominado *lattice* BGK (LBGK), a distribuição de equilíbrio local foi escolhida de forma que se possam recuperar as equações de N-S através de uma expansão assintótica [Qian et al. (1992), Chen et al. (1992)]. Ao desenvolver uma versão simplificada da equação cinética, evita-se ter que resolver equações cinéticas complexas como a equação de Boltzmann em sua forma mais completa e, além disso, não é necessário seguir cada partícula como em simulações de dinâmica molecular [Chen e Doolen (1998)].

Destacam-se como pontos positivos do LBM em aspectos práticos e físicos: paralelismo intrínseco, fácil adaptação a geometrias grossamente irregulares (e.g., meios porosos), melhor representação de interações microscópicas, fácil implementação e descrição física clara. Como pontos negativos sobressaem-se os seguintes: necessidade de uma malha uniforme (podendo-se contornar com refinamentos locais, o que demanda adaptação das equações), tratamento de condições de contorno e o surgimento de instabilidades numéricas quando o parâmetro de relaxamento é menor que um limitante (dependente das características do problema) [Succi (1997)]. Devido à atual tendência do uso de sistemas computacionais com processamento em paralelo, o uso de um método com características intrínsecas de paralelismo é algo bastante vantajoso.

Ao longo dos últimos anos, o LBM tem-se tornado um esquema numérico promissor para simular a dinâmica de fluidos nas mais diversas aplicações. Desde sua introdução nos anos 80 ele passou por uma série de refinamentos e extensões que o levaram ao ponto no qual é possível simular com sucesso vários fenômenos complexos, indo desde a turbulência homogênea de fluidos incompressíveis até escoamentos multifásicos em meios porosos [Benzi et al. (1992), Qian et al. (1995b) e Qian et al. (1995a)]. Em particular, o LBM também tem sido empregado de forma sistemática em diversas aplicações no âmbito da hemodinâmica computacional. Por

exemplo, na simulação de escoamentos sanguíneos em artérias cerebrais [He et al. (2009b)], em válvulas cardíacas mecânicas [Pelliccioni et al. (2007)], em aneurismas [Hirabayashi et al. (2006)], entre outros. Uma lista mais detalhada das aplicações do LBM encontra-se no Capítulo 1.

2.2 Equação de *lattice* Boltzmann (LBE)

O método de *lattice* Boltzmann obedece a equações da cinética mesoscópica, conforme mostraremos a seguir, por ser derivado a partir da equação de Boltzmann [Abe (1997)]. Chegaremos à equação que governa o LBM a partir de uma versão simplificada da equação de Boltzmann, com aproximação BGK no termo integral (referenciando o trabalho de Bhatnagar et al. (1954)):

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla g = \varpi (g^{\text{eq}} - g), \quad (2.1)$$

onde $g(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ é a densidade de partículas na posição \mathbf{x} , no instante t , com velocidade \mathbf{v} , ϖ é a frequência de colisão e g^{eq} é uma aproximação de ordem $\mathcal{O}(M^2)$ (onde $M = |\mathbf{u}|/c_s$ é o número de Mach, \mathbf{u} é a velocidade do fluido e c_s é a velocidade do som) da distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann [Koelman (1991)], da forma:

$$g^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi/3)^{D/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})}{c_s^2} \right] \left[1 + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})}{c_s^2} + \frac{1}{2} \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{c_s^4} - \frac{1}{2} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{c_s^2} \right], \quad (2.2)$$

onde ρ e \mathbf{u} são a densidade e velocidade resultantes em um ponto do domínio e D é a dimensão espacial. Para os modelos de *lattice* utilizados neste trabalho, a velocidade do som é calculada da forma $c_s = |\mathbf{v}|/\sqrt{3} = v/\sqrt{3}$ [Qian e Orszag (1993)].

Para chegarmos à equação de *lattice* Boltzmann a partir da equação (2.1), são necessárias três discretizações: no espaço de velocidades e nos domínios espacial e temporal. A discretização do espaço de velocidades visa tornar este espaço (de possíveis movimentos das partículas) de dimensão infinita em um espaço de

dimensão finita (com dimensão ℓ), cujos elementos serão denominados $v\mathbf{e}_i$, para $i = 1, \dots, \ell$. As distribuições de partículas que se encaminham nas direções indicadas por \mathbf{e}_i serão denominadas $f_i(\mathbf{x}, t) = W_i g(\mathbf{x}, v\mathbf{e}_i, t)$, onde W_i são os pesos da quadratura usada para aproximar as integrais:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int g(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \approx \sum_{i=1}^{\ell} W_i g(\mathbf{x}, v\mathbf{e}_i, t), \quad (2.3a)$$

$$\rho\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{v}g(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v} \approx \sum_{i=1}^{\ell} W_i v\mathbf{e}_i g(\mathbf{x}, v\mathbf{e}_i, t). \quad (2.3b)$$

Visto que \mathbf{e}_i e W_i são constantes, a função f_i satisfaz a mesma equação que g (ver equações (2.1) e (2.2)):

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v\mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i = \varpi (f_i^{\text{eq}} - f_i), \quad i = 1, \dots, \ell \quad (2.4)$$

com

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[1 + 3 \frac{(v\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{v^2} + \frac{9}{2} \frac{(v\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{v^4} - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{v^2} \right], \quad (2.5)$$

onde

$$\omega_i = W_i (2\pi/3)^{D/2} \exp \left[-\frac{3}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i) \right]. \quad (2.6)$$

O passo final para chegarmos à equação de *lattice* Boltzmann é a discretização espacial e temporal, isto é, nas variáveis \mathbf{x} e t , respectivamente. Para tanto, na equação (2.4) se aproxima a derivada temporal por um esquema de diferenças finitas do tipo Euler explícito e o termo convectivo ($v\mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i$) por um esquema de diferenças finitas *upwind* de primeira ordem [Cao et al. (1997)]. Assim, obtemos a equação para f_i :

$$\frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} + v\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i \frac{[f_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t)]}{\Delta x} = \varpi [f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.7)$$

onde Δt e Δx são o passo no tempo e o espaçamento do *lattice* (ou malha),

respectivamente. Como a velocidade das partículas será a velocidade do *lattice* ($v = \Delta x / \Delta t$), a partir da equação (2.7) obtém-se a equação de *lattice* Boltzmann com aproximação BGK:

$$f_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau} [f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.8)$$

onde f_i^{eq} é descrita pela equação (2.5) e $\tau = 1/(\Delta t \varpi)$ é denominado termo de relaxamento. Esta equação descreve a colisão e propagação de distribuições contínuas de partículas, onde o termo do lado direito da equação é denominado operador de colisão. Mais precisamente, podemos dividir a LBE nas etapas de colisão:

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{\tau} [f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell \quad (2.9)$$

e propagação:

$$f_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i, t + \Delta t) = \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t), \quad i = 1, \dots, \ell. \quad (2.10)$$

Para maior clareza, expomos na Figura 2.1 um fluxograma com as etapas do LBM, destacando a colisão (equação (2.9)), a propagação (equação (2.10)) e a imposição de condições de contorno (a ser detalhada na Seção 2.5). Os pseudo-códigos da implementação de cada etapa podem ser acompanhados no Apêndice A.

Note que a equação de *lattice* Boltzmann é explícita na variável temporal, e que a discretização realizada corresponde-se com uma abordagem completamente Lagrangeana da derivada material que aparece no lado esquerdo da equação (2.4) (definida sobre todas as direções de movimento \mathbf{e}_i). Na linguagem dos métodos numéricos na dinâmica de fluidos computacional (CFD), poderíamos classificar a LBE como um esquema de diferenças finitas totalmente explícito, de segunda ordem no espaço e primeira ordem no tempo.

A densidade e a velocidade do fluido são recuperadas a partir das

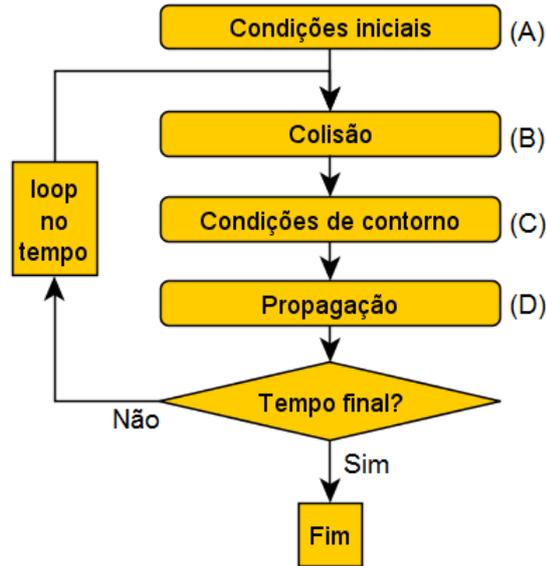


Figura 2.1: Fluxograma das etapas do método de *lattice* Boltzmann.

distribuições de partículas da forma:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} f_i(\mathbf{x}, t) \quad \text{e} \quad \rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathbf{v}_i f_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.11)$$

Através de expansões assintóticas de Chapman–Enskog, diversos autores [Qian et al. (1992), Chen et al. (1992), He e Luo (1997b), Yeomans (2006)] mostram que, para os diferentes modelos de *lattice* e de distribuições de equilíbrio, chega-se às equações de Navier–Stokes para escoamentos incompressíveis com as seguintes ordens de aproximação:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 & + \mathcal{O}(M^2), \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} & + \mathcal{O}(M^3), \end{cases} \quad (2.12)$$

onde a viscosidade cinemática do fluido Newtoniano é obtida como função do termo de relaxamento da forma:

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{\nu}{c_s^2 \Delta t}, \quad \text{i.e.,} \quad \nu = (2\tau - 1)c_s^2 \Delta t / 2, \quad (2.13)$$

e a pressão normalizada é calculada como função da densidade e da velocidade do som do modelo da forma $P = c_s^2 \rho / \rho_0$ (ρ_0 é a densidade média). O desenvolvimento

formal desta expansão será feito na Seção 2.6.

2.3 *Lattices*

O *lattice*, ou malha, descreve as direções de movimento das distribuições de partículas no LBM. Na Seção 2.2, vimos que a equação de Boltzmann com a aproximação BGK está constituída por um espaço de velocidades das distribuições de dimensão infinita (equação (2.1)). Entretanto, para levar a cabo as simulações numéricas via o LBM é preciso encontrar uma discretização apropriada para este espaço, a qual é dada pela definição do conjunto de direções \mathbf{e}_i , $i = 1, \dots, \ell$.

Parte essencial a ser verificada na escolha do *lattice* é a simetria que este apresenta. Em outras palavras, o espaço discreto de velocidades deve ser capaz de representar os fenômenos desejados preservando o momento angular, sem que haja uma direção preferencial de movimento das partículas. Em particular, para que o modelo possa representar as equações de Navier–Stokes, o *lattice* tem que preservar a simetria dos tensores de até quarta ordem, ou seja, deve estar de acordo com as seguintes condições [Frisch et al. (1986)]:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^{\ell} m_i &= C_0, \\
 \sum_{i=1}^{\ell} m_i \mathbf{e}_i &= 0, \\
 \sum_{i=1}^{\ell} m_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i &= C_2 \mathbf{I}, \\
 \sum_{i=1}^{\ell} m_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i &= 0, \\
 \sum_{i=1}^{\ell} m_i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i &= C_4 \mathbf{\Lambda},
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

onde os vetores \mathbf{e}_i representam as direções de movimento, as constantes C_0 , C_2 e C_4 são dependentes do *lattice* escolhido e dos pesos impostos às direções do mesmo, os quais são denominados m_i 's, “ \otimes ” denota o produto tensorial, \mathbf{I} é tensor identidade

de segunda ordem, e definimos o tensor de quarta de ordem

$$[\mathbf{\Lambda}]_{\alpha\beta\gamma\zeta} = (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\zeta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta}\delta_{\beta\gamma}), \quad (2.15)$$

onde δ é o delta de Kronecker.

Nos modelos mais utilizados, a notação empregada para denominar os *lattices* é $DXQY$, que indica um *lattice* no espaço X -dimensional com Y possibilidades de movimento para as distribuições de partículas, dentro das quais se encontra a possibilidade de velocidade nula, também conhecida como “partícula parada”. Não é o objetivo deste trabalho comparar os modelos de *lattice* existentes através de simulações, por isso adotamos o modelo mais adequado em função das justificativas apresentadas a seguir.

Os modelos mais comuns em duas dimensões são o $D2Q7$ (usado também no FHP em Frisch et al. (1986)) e $D2Q9$. Para realizar as simulações bidimensionais presentes neste trabalho, escolhemos o modelo de *lattice* quadrado $D2Q9$ (descrito em detalhes a seguir), por possuir um número maior de graus de liberdade para o movimento, ou equivalentemente por ter um espaço de velocidades discreto mais rico que o $D2Q7$, e por ser bastante aceito em trabalhos recentes na área de hemodinâmica computacional [Hirabayashi et al. (2006) e Pelliccioni et al. (2007), Liu (2012)]. Além disso, este *lattice* não apresenta problemas na imposição de condições de contorno, aspecto que se torna crítico ao aumentar a dimensão do espaço de velocidades das distribuições de partículas.

***lattice* $D2Q9$.** Este modelo possui oito direções não nulas de movimento e a possibilidade de ter uma partícula parada. Nele é necessária a utilização de pesos diferentes associados às direções (conforme a Figura 2.2) para que seja preservada a simetria exigida pela equação (2.14). Estes pesos m_i são englobados no cálculo das distribuições f_i e são dados por $m_{1-4} = 4$,

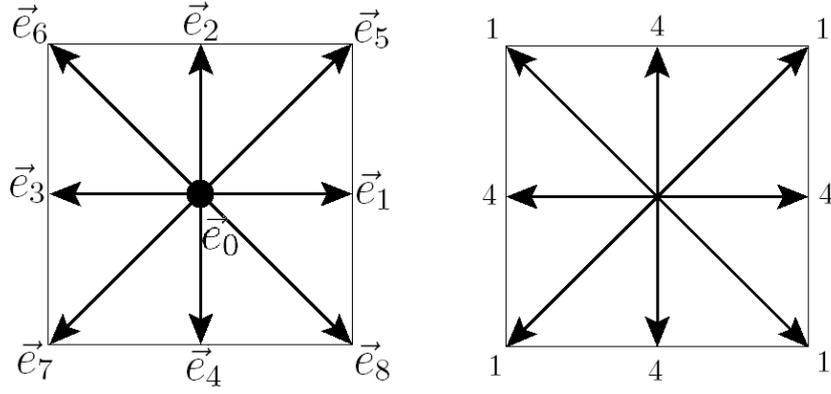


Figura 2.2: Modelo de *lattice* $D2Q9$ (8 velocidades não nulas) e seus pesos.

$m_{5-8} = 1$. Enquanto as direções de movimento são descritas por

$$\begin{aligned}
 \mathbf{e}_0 &= (0, 0), & \mathbf{e}_1 &= (1, 0), & \mathbf{e}_2 &= (0, 1), \\
 \mathbf{e}_3 &= (-1, 0), & \mathbf{e}_4 &= (0, -1), & \mathbf{e}_5 &= (1, 1), \\
 \mathbf{e}_6 &= (-1, 1), & \mathbf{e}_7 &= (-1, -1), & \mathbf{e}_8 &= (1, -1).
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Em *lattices* quadrados, como este, temos que introduzir duas velocidades para as partículas, de acordo com a distância a ser percorrida em um passo de tempo. Existem as velocidades “lentas” com módulo dado por $v = \Delta x / \Delta t$ nas direções vertical e horizontal ($\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_4$) e as velocidades “rápidas” com módulo $\sqrt{2}v$ nas direções diagonais ($\mathbf{e}_5, \dots, \mathbf{e}_8$). Claramente, isto é causado pelas diferentes distâncias que, em um mesmo intervalo de tempo, as distribuições devem viajar até as células vizinhas.

Ao calcular as constantes de simetria do *lattice* $D2Q9$, encontramos

$$C_0 = 20, \quad C_2 = 12, \quad C_4 = 4. \tag{2.17}$$

Os pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio (2.5), que satisfazem equações apresentadas na Seção 2.4, são

$$\omega_0 = \frac{4}{9}, \quad \omega_{1-4} = \frac{1}{9}, \quad \omega_{5-8} = \frac{1}{36}. \tag{2.18}$$

Em três dimensões os modelos mais comuns são o $D3Q15$, $D3Q19$ e $D3Q27$. Para realizar as simulações presentes neste trabalho, escolhemos o modelo de *lattice* cúbico $D3Q19$, por possuir um número de graus de liberdade maior que o modelo $D3Q15$, porém, como uma opção menos custosa que o modelo $D3Q27$, além do fato de ser um modelo bastante aceito em trabalhos recentes na área de hemodinâmica computacional [Artoli et al. (2007), Xiu-Ying et al. (2008) e He et al. (2009a)]. Segundo Keating et al. (2007), ao comparar os resultados obtidos em simulações numéricas a partir destes três *lattices*, foram encontrados indicativos de diferenças pequenas entre os resultados, especialmente para números de Reynolds altos.

***lattice* $D3Q19$.** O modelo de *lattice* cúbico denominado $D3Q19$ possui 18 possibilidades de movimento não-nulas, conforme ilustrado na Figura 2.3 e duas velocidades características v e $\sqrt{2}v$ associadas às direções \mathbf{e}_{1-6} e \mathbf{e}_{7-18} , respectivamente. Mais especificamente, as direções de movimento permitidas por este *lattice* são

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_0 &= (0, 0, 0), & \mathbf{e}_1 &= (1, 0, 0), & \mathbf{e}_2 &= (0, 1, 0), \\
\mathbf{e}_3 &= (-1, 0, 0), & \mathbf{e}_4 &= (0, -1, 0), & \mathbf{e}_5 &= (0, 0, -1), \\
\mathbf{e}_6 &= (0, 0, 1), & \mathbf{e}_7 &= (1, 1, 0), & \mathbf{e}_8 &= (-1, 1, 0), \\
\mathbf{e}_9 &= (-1, -1, 0), & \mathbf{e}_{10} &= (1, -1, 0), & \mathbf{e}_{11} &= (1, 0, -1), \\
\mathbf{e}_{12} &= (0, 1, -1), & \mathbf{e}_{13} &= (-1, 0, -1), & \mathbf{e}_{14} &= (0, -1, -1), \\
\mathbf{e}_{15} &= (1, 0, 1), & \mathbf{e}_{16} &= (0, 1, 1), & \mathbf{e}_{17} &= (-1, 0, 1), \\
\mathbf{e}_{18} &= (0, -1, 1).
\end{aligned} \tag{2.19}$$

As constantes de simetria deste *lattice*, tais que as condições expressas pela equação (2.14) sejam satisfeitas, são

$$C_0 = 24, \quad C_2 = 12, \quad C_4 = 4. \tag{2.20}$$

Os pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio (2.5), que

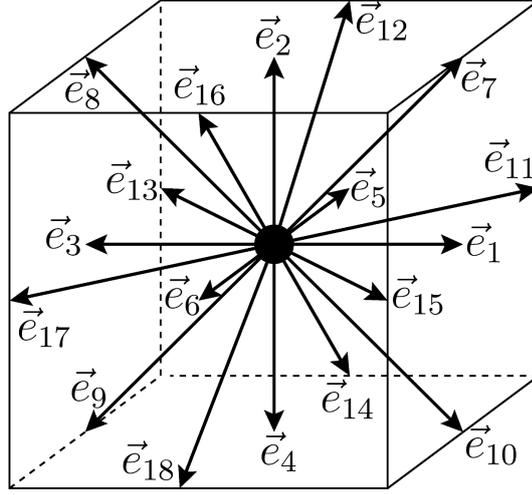


Figura 2.3: Modelo de *lattice* $D3Q19$, com 18 velocidades não nulas.

satisfazem as equações apresentadas na Seção 2.4, são

$$\omega_0 = \frac{1}{3}, \quad \omega_{1-6} = \frac{1}{18}, \quad \omega_{7-18} = \frac{1}{36}. \quad (2.21)$$

Para apresentar uma exposição clara e sucinta dos *lattices* tridimensionais mencionados, montamos a Tabela 2.1 com os valores das diferentes velocidades características de cada *lattice*, suas quantidades por célula e suas direções, além dos pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio (2.5).

velocid. (N ^o)	\mathbf{e}_i 's	$D3Q15$	$D3Q19$	$D3Q27$
parada (1)	(0,0,0)	$\omega_0 = 2/9$	$\omega_0 = 1/3$	$\omega_0 = 8/27$
v (6)	$(\pm 1, 0, 0), \dots$	$\omega_{1-6} = 1/9$	$\omega_{1-6} = 1/18$	$\omega_{1-6} = 2/27$
$\sqrt{2}v$ (12)	$(\pm 1, \pm 1, 0), \dots$	–	$\omega_{7-18} = 1/36$	$\omega_{7-18} = 1/54$
$\sqrt{3}v$ (8)	$(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$	$\omega_{7-15} = 1/72$	–	$\omega_{19-27} = 1/216$

Tabela 2.1: Sumário das informações necessárias para a implementação dos modelos de *lattice* tridimensionais mais comuns.

2.4 Distribuições de equilíbrio

Existem na literatura diferentes modelos de distribuição de equilíbrio para a equação de *lattice* Boltzmann com aproximação BGK (2.8). Como condição necessária para recuperar as equações de N-S corretamente, o termo de colisão e,

portanto, a distribuição de equilíbrio deve conservar a massa e os momentos de primeira, segunda e terceira ordem do *lattice*, ou seja, deve satisfazer as equações abaixo [Yeomans (2006)]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho, \\ \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i v = \rho \mathbf{u}, \\ \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^2 = p \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} = \rho c_s^2 \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}, \\ \left[\sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^3 \right]_{\alpha\beta\gamma} = \rho c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\gamma\alpha} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha). \end{array} \right. \quad (2.22)$$

O modelo mais utilizado na literatura para distribuição de equilíbrio (ao qual nos referiremos como modelo BGK) é da forma Qian e Orszag (1993):

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[1 + 3 \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{v^2} + \frac{9}{2} \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{v^4} - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{v^2} \right], \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.23)$$

onde os pesos ω_i (apresentados na Seção 2.3) dependem do *lattice* e são unicamente definidos pela equação (2.22).

Uma forma especial da distribuição de equilíbrio, introduzida por He e Luo (1997b) (à qual nos referiremos como modelo iBGK), visa minimizar efeitos de compressibilidade intrínsecos do LBM através da introdução de um termo constante de densidade. Esta distribuição de equilíbrio foi adotada para as simulações presentes neste trabalho pois estamos modelando escoamentos incompressíveis. Aqui, assume-se que as variações da densidade são $\mathcal{O}(M^2)$ e a forma da distribuição de equilíbrio é a seguinte:

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \left\{ \rho + \rho_0 \left[3 \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{v^2} + \frac{9}{2} \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{v^4} - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{v^2} \right] \right\}, \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.24)$$

onde ρ_0 é a densidade média (constante) e os pesos ω_i são os mesmos do modelo BGK, determinados unicamente pelo seguinte sistema [He e Luo (1997b)]

(semelhante ao sistema (2.22)):

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho, \\ \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i v = \rho \mathbf{u}, \\ \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^2 = p \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} = \rho c_s^2 \mathbf{I} + \rho_0 \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}, \\ \left[\sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^3 \right]_{\alpha\beta\gamma} = \rho_0 c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\gamma\alpha} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha), \end{array} \right. \quad (2.25)$$

onde a densidade e velocidade do fluido passam a ser calculadas através das fórmulas:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} f_i(\mathbf{x}, t) \quad \text{e} \quad \rho_0 \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} v \mathbf{e}_i f_i(\mathbf{x}, t). \quad (2.26)$$

Pensando em formas mais gerais da distribuição de equilíbrio, Yeomans (2006) introduziu distribuições da forma:

$$f_i^{\text{eq}} = \rho \left[A_\sigma + B_\sigma \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{v^2} + D_\sigma \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{v^4} + C_\sigma \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{v^2} \right], \quad \sigma = 0, 1, 2, 3, \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.27)$$

onde σ é 0 para as partículas paradas, 1 para as que se movem nas direções cartesianas, 2 e 3 para os conjuntos de direções diagonais (sendo que $\sigma = 3$ não está presente nos modelos $D2Q9$ e $D3Q19$). As constantes A_σ , B_σ , C_σ e D_σ são determinadas pelo sistema (2.22), porém não de forma única. Para os modelos de *lattice* $D2Q9$ e $D3Q19$ temos dois graus de liberdade (A_2 e C_2), conforme mostrado na Seção 3.5 do próximo capítulo. Nesta seção estudamos a estabilidade da LBE quando assumimos uma distribuição de equilíbrio semelhante à proposta por Yeomans (2006), porém visando minimizar efeitos de compressibilidade, da

forma:

$$f_i^{\text{eq}} = \rho A_\sigma + \rho_0 \left[B_\sigma \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{v^2} + D_\sigma \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{v^4} + C_\sigma \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{v^2} \right],$$

$$\sigma = 0, 1, 2, 3, \quad i = 1, \dots, \ell. \quad (2.28)$$

Para isto fazemos uma análise de estabilidade linearizada de von Neumann para estudar a relação dos graus de liberdade (A_2 e C_2) com a estabilidade da LBE. Interessantemente, encontramos parâmetros A_2 e C_2 que tornam algumas simulações do escoamento de Poiseuille bidimensional mais estáveis (para altos números de Reynolds) que quando são empregadas as distribuições de equilíbrio BGK (2.23) e iBGK (2.24). Repare que as distribuições de equilíbrio BGK e iBGK são casos particulares das distribuições (2.27) e (2.28), respectivamente.

2.5 Condições de contorno

A maneira de implementar as condições de contorno é um fator crucial nas simulações via LBM, pois estas têm influência direta na ordem do erro da aproximação e na estabilidade das simulações computacionais. Por isso, um grande esforço tem sido feito para desenvolver diferentes tratamentos para as condições de contorno [Yang (2010), Verschaeve e Müller (2010), Cheng et al. (2012), Najafi-Yazdi e Mongeau (2012), Yin e Zhang (2012)]. Como as variáveis do LBM são distribuições de partículas e as condições de contorno geralmente são imposições de variáveis macroscópicas como velocidade ou pressão, acaba-se tendo um número maior de incógnitas do que restrições nas fronteiras. Para fechar este sistema indeterminado, hipóteses adicionais devem ser introduzidas. As principais destas metodologias para se impor velocidade (Seção 2.5.1) e pressão (Seção 2.5.2) no contorno são discutidas a seguir, com o detalhamento das metodologias adotadas para as implementações em 2D e 3D. É importante ressaltar aqui que, devido às aplicações que temos em mente na área de hemodinâmica, as estratégias para impor condições de contorno no problema devem ser gerais, capazes de serem aplicadas

em superfícies arbitrárias.

2.5.1 Condições de contorno de velocidade

A idéia mais simples para a imposição de velocidade nula sobre um contorno vem do modelo clássico denominado modelo *Bounce-Back* [Cornubert et al. (1991)], onde as partículas são refletidas na direção oposta à qual chegaram na fronteira. Para incorporar velocidades não nulas às fronteiras, Ladd (1994) modificou este método ao adicionar um termo de ajuste. Porém, este método apresenta o problema de representar as fronteiras conforme o formato quadriculado da malha uniforme. Outra abordagem [Zou e He (1997)] impõe a velocidade exatamente nas células da malha e se baseia no reflexo das distribuições de não equilíbrio, mas sua implementação tem que ser feita levando-se em conta a orientação da fronteira. Para melhorar o aspecto quadriculado imposto a algumas fronteiras, Verberg e Ladd (2000) desenvolveram um modelo de subgrade, considerando a fração de volume associada a cada nó de fronteira. Por sua vez, este modelo apresenta maiores dificuldades de implementação.

Percebendo a limitação do modelo proposto por Ladd (1994), onde as partículas são refletidas no ponto intermediário entre duas células e a velocidade imposta é do local onde a fronteira real cruza esta conexão, Bouzidi et al. (2001) propuseram refletir as partículas levando em conta a posição da fronteira real. Por outro lado, Guo et al. (2002) propôs um esquema de extrapolação de informações do interior do domínio para impor a condição desejada no local exato da fronteira. Enquanto o trabalho de Yu et al. (2003) propõe uma divisão da etapa de colisão em duas partes para evitar dividir o processo de imposição da velocidade em dois casos (o que implica em mudanças mais expressivas na codificação).

Para realizar a simulações deste trabalho optamos por um esquema de interpolação (proposto por Guo et al. (2002)) para aplicarmos as condições de contorno de velocidade fora do centro das células do *lattice*, visando uma acurácia de segunda ordem. Isto é importante pois podemos impor condições de contorno

sobre domínios curvos mesmo com um *lattice* regular. Fato que melhora a representação geométrica no caso de domínios com contornos irregulares, como ocorre no caso de geometrias vasculares.

Vamos detalhar a seguir o procedimento utilizado neste modelo de imposição de velocidade em 2D (sendo uma extensão análoga para o caso 3D). Em primeiro lugar, é preciso definir as células de parede como aquelas que possuem ao menos uma de suas conexões cruzada pela linha de contorno e cujo centro encontra-se fora do domínio delimitado por tal contorno. Logo, a idéia básica do modelo consiste em estimar as f_i 's destas células de parede que apontem para células de fluido, a partir de uma interpolação linear entre o valor dado pela condição de contorno na interseção e informações da(s) célula(s) do interior do domínio conectada(s). O modelo baseia-se na estimativa das f_i 's nas células de parede, decompondo-as nas partes de equilíbrio (f_i^{eq}) e de não-equilíbrio (f_i^{ne}), a partir de interpolações de valores conhecidos.

Detalhando melhor o modelo, podemos observar na Figura 2.4 que a conexão entre a célula de parede (na posição \mathbf{x}^w) e a célula interna (na posição \mathbf{x}_i^f) cruza a fronteira física em \mathbf{x}_i^b e, observamos ainda, que $\mathbf{x}_i^f = \mathbf{x}^w + \Delta x \mathbf{e}_i$ (onde i corresponde à direção indicada) e $\mathbf{x}_i^b = \mathbf{x}_i^f - \Delta x_i \mathbf{e}_i$. Os valores do índice i variam de célula para célula, por exemplo, no caso da Figura 2.4, para a célula localizada em \mathbf{x}^w , o índice i assume os valores $i = 1, 2, 5, 8$ (considerando que adotamos o *lattice* $D2Q9$ com a numeração indicada pela Eq (2.16)). Assim, o cálculo das estimativas das distribuições f_i^{eq} e f_i^{ne} no ponto \mathbf{x}^w é feito de acordo com a proporção $\Delta_i = \Delta x_i / \Delta x$ para evitar instabilidades numéricas, conforme:

a) se $\Delta_i \geq 0,75$, então estimamos a velocidade na célula de parede como

$$\bar{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}^w) = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^b) + (\Delta_i - 1)\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^f)}{\Delta_i}, \quad (2.29)$$

onde $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^b)$ é a velocidade conhecida que se deseja impor, $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^f)$ é a velocidade da célula imediatamente vizinha, do lado do fluido, na direção indicada por i , $\bar{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}^w)$ é a velocidade que se quer estimar para tal fim. Assim, a f_i^{eq} no ponto \mathbf{x}^w é

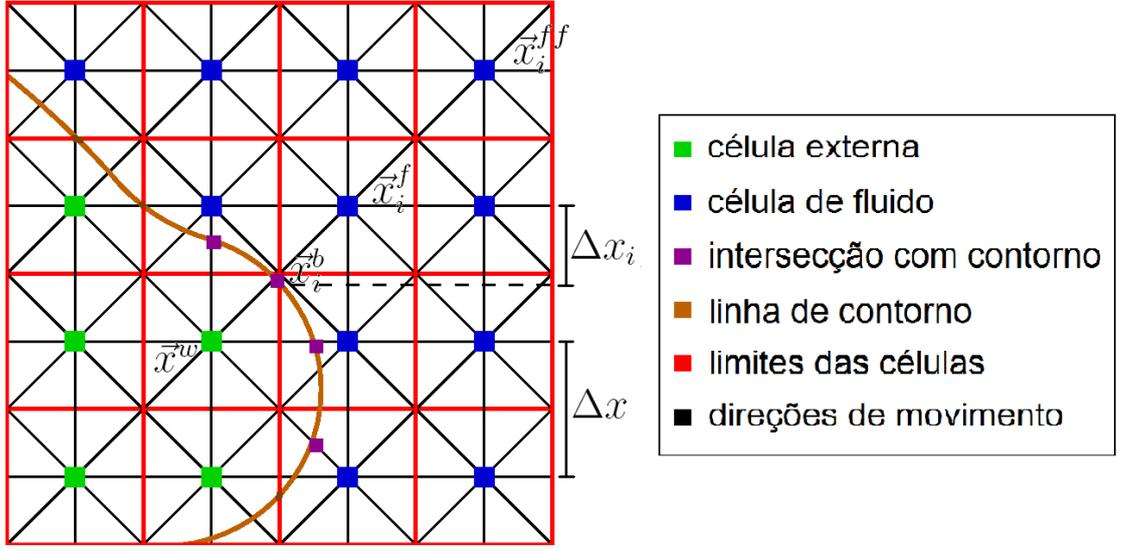


Figura 2.4: Condição de contorno de velocidade do tipo interpolação sobre uma linha curva.

aproximada por

$$\overline{f_i^{\text{eq}}}(\mathbf{x}^w) = \omega_i \left\{ \overline{\rho}_i(\mathbf{x}^w) + \rho_0 \left\{ 3 \frac{[v\mathbf{e}_i \cdot \overline{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}^w)]}{v^2} + \frac{9}{2} \frac{[v\mathbf{e}_i \cdot \overline{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}^w)]^2}{v^4} - \frac{3}{2} \frac{[\overline{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}^w) \cdot \overline{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}^w)]}{v^2} \right\} \right\}, \quad (2.30)$$

onde é feita a aproximação $\overline{\rho}_i(\mathbf{x}^w) = \rho(\mathbf{x}_i^f)$. Assim sendo, estimamos f_i^{ne} no ponto \mathbf{x}^w como

$$\overline{f_i^{\text{ne}}}(\mathbf{x}^w) = f_i^{\text{ne}}(\mathbf{x}_i^f); \quad (2.31)$$

b) se $\Delta_i < 0,75$, então estimamos a velocidade na célula de parede como

$$\overline{\mathbf{u}}_i(\mathbf{x}^w) = \left[\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^b) + (\Delta_i - 1)\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^f) \right] + \frac{(1 - \Delta_i)}{(1 + \Delta_i)} \left[2\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^b) + (\Delta_i - 1)\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^{ff}) \right], \quad (2.32)$$

onde $\mathbf{u}(\mathbf{x}_i^{ff})$ é a velocidade da célula localizada a uma distância de dois *lattices* na direção indicada por i (ver Figura 2.4). Assim, a f_i^{eq} no ponto \mathbf{x}^w é aproximada através da equação (2.30) e estimamos f_i^{ne} no ponto \mathbf{x}^w como

$$\overline{f_i^{\text{ne}}}(\mathbf{x}^w) = \Delta_i f_i^{\text{ne}}(\mathbf{x}_i^f) + (1 - \Delta_i) f_i^{\text{ne}}(\mathbf{x}_i^{ff}). \quad (2.33)$$

Embora este modelo seja o mais adequado que temos encontrado disponível na literatura e projetado para representar as condições de contorno em regiões curvas, o mesmo pode apresentar instabilidades quando o valor de Δ_i é pequeno [Guo et al. (2002)]. Além disso, deve-se tomar o cuidado de empregar as fórmulas (2.32) e (2.33), indicadas para $\Delta_i < 0,75$, somente quando existirem duas células interiores na direção \mathbf{e}_i , o que não ocorre, por exemplo, em quinas convexas com condição de contorno de velocidade em ambas as paredes.

2.5.2 Condições de contorno de pressão

É importante lembrar que no modelo de *lattice* Boltzmann escolhido, com relaxamento simples e distribuição de equilíbrio descrita pela equação (2.24), a pressão (denominada p) é linearmente relacionada com a densidade (denominada ρ), através de $p = \rho c_s^2$, onde $c_s = v/\sqrt{3}$ é a velocidade do som no modelo. Logo, a imposição de valores diferentes de pressão em contornos distantes implicará em valores de densidade diferentes, na mesma proporção, sobre tais contornos. Isto é, no caso trivial de um gradiente de pressão haverá um gradiente de densidade subjacente. Mas, como veremos na Seção 3.1, isto não é uma barreira, pois a velocidade do som é ajustada para minimizar as oscilações do campo de densidade.

O modelo escolhido para impor condições de contorno de pressão, proposto por Zou e He (1997), é do tipo colisão na célula, visto que este é adequado para impor valores de pressão sobre planos (ou retas em 2D) em um *lattice* regular. Além de ser um modelo de segunda ordem que preserva a massa no contorno, geralmente desejamos impor valores de pressão sobre cortes planos que são resultantes do isolamento de uma determinada região arterial de interesse do resto do sistema cardiovascular. Este é um dos modelos mais encontrados em implementações na literatura, por apresentar aspectos de implementação mais simples e com menos restrições do que outros modelos que buscam estender a imposição de pressão a superfícies mais complexas [Yang (2010)].

Neste modelo devem ser fornecidas a pressão e as componentes da velocidade

transversais ao plano em cada célula de parede onde será aplicada a condição de contorno. Em muitos casos, em simulações realizadas em vasos, é razoável impor velocidade nula na direção transversal nos extremos do vaso. Logo, esta imposição das componentes transversais da velocidade é, muitas vezes, mais uma informação do problema que estamos querendo modelar. Este modelo baseia-se na utilização das equações de conservação de massa e de quantidade de movimento (2.26), juntamente com a reflexão da parte de não-equilíbrio ($f_i^{\text{ne}} = f_i - f_i^{\text{eq}}$) de algumas f_i 's simétricas (escolhidas de acordo com o *lattice* e a forma local do contorno), para calcular as f_i 's e a componente normal da velocidade desconhecidas. Aqui faremos uma extensão análoga do modelo proposto por Zou e He (1997) para o modelo iBGK de distribuição de equilíbrio adotado (2.24).

Para um melhor entendimento do modelo, analisemos inicialmente um caso bidimensional. Tomemos como exemplo a imposição de uma condição de contorno de pressão e da componente vertical da velocidade (denominada u_y) nula na extremidade esquerda e plana de um canal. Usando o *lattice* $D2Q9$ (Figura 2.2), empregado neste trabalho, podemos verificar através da Figura 2.5 que depois da etapa de propagação são conhecidas as distribuições f_0, f_2, f_3, f_4, f_6 e f_7 , a componente vertical da velocidade (u_y) e a densidade (denominada ρ) em uma célula desta extremidade, ficando como incógnitas f_1, f_5, f_8 e a componente horizontal da velocidade (denominada u_x). Para calcular estas quatro incógnitas, usamos a equação da conservação de massa (2.26):

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho - (f_0 + f_2 + f_3 + f_4 + f_6 + f_7), \quad (2.34)$$

as equações de conservação da quantidade de movimento (2.26) na direção \mathbf{x} :

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho_0 \frac{u_x}{v} + (f_3 + f_6 + f_7) \quad (2.35)$$

e na direção \mathbf{y} :

$$f_5 - f_8 = -f_2 + f_4 - f_6 + f_7, \quad (2.36)$$

além do reflexo da parte de não-equilíbrio da distribuição f_3 :

$$f_1 - f_1^{\text{eq}} = f_3 - f_3^{\text{eq}}. \quad (2.37)$$

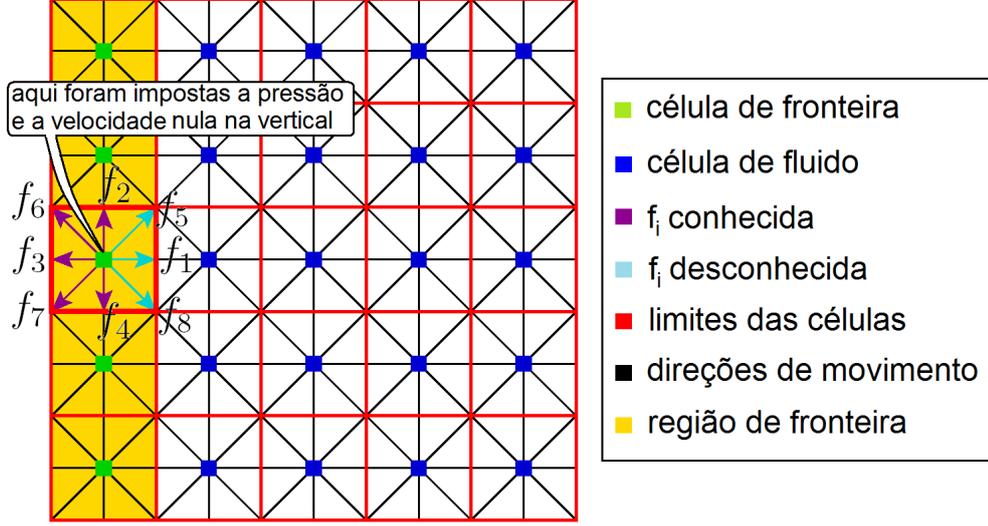


Figura 2.5: Condição de contorno de pressão do tipo colisão na célula em 2D.

A partir das equações (2.34)–(2.37) calculamos as incógnitas acima citadas como:

$$\begin{aligned} u_x &= \frac{\rho - [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)]}{\rho_0} v, \\ f_1 &= f_3 + \frac{2}{3} \rho_0 \frac{u_x}{v}, \\ f_5 &= f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{u_x}{v}, \\ f_8 &= f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{u_x}{v}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

A implementação das condições de contorno, através deste modelo de colisão na célula, para as demais extremidades ocorre de maneira semelhante.

Na versão tridimensional, vamos estimar as f_i 's e a componente da velocidade desconhecidas através da equação de conservação de massa (uma equação):

$$\rho(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{\ell} f_i(x, y, z, t), \quad (2.39)$$

onde ℓ representa o número de direções não nulas do *lattice*, além das equações de conservação de quantidade de movimento (três equações), onde é imposta a

velocidade da fronteira:

$$\rho_0 \mathbf{u}(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{\ell} f_i(x, y, z, t) v \mathbf{e}_i, \quad (2.40)$$

juntamente com a reflexão da parte de não-equilíbrio de algumas f_i 's simétricas (selecionadas de acordo com o *lattice* e a forma local do contorno).

Aos efeitos de ilustrar a metodologia, tomemos como exemplo a imposição de uma pressão fixa (p) e de velocidade nula nas direções \mathbf{y} e \mathbf{z} (denominadas u_y e u_z) na extremidade esquerda e plana de um canal horizontal (com eixo longitudinal na direção \mathbf{x}). Usando o *lattice* $D3Q19$ (Figura 2.3), empregado neste trabalho, podemos verificar que depois da etapa de propagação são conhecidas as distribuições $f_0, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_8, f_9, f_{12}, f_{13}, f_{14}, f_{16}, f_{17}$ e f_{18} , as velocidades u_y e u_z e a densidade ($\rho = p/c_s^2$) em uma célula desta extremidade, ficando como incógnitas f_1, f_7, f_{10}, f_{11} e f_{15} e a componente da velocidade na direção \mathbf{x} (denominada u_x). Para calcular estas seis incógnitas, temos quatro equações além das possíveis reflexões da parte de não-equilíbrio. Sendo assim, não há como escolher duas direções do *lattice* para que sejam feitas tais reflexões sem que acabemos quebrando a simetria do método. Logo, devemos seguir os seguintes passos:

a) usamos a equação da conservação de massa (2.39):

$$\begin{aligned} f_1 + f_7 + f_{10} + f_{11} + f_{15} = \rho - (f_0 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_8 + f_9 + f_{12} \\ + f_{13} + f_{14} + f_{16} + f_{17} + f_{18}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

e a equação da conservação da quantidade de movimento (2.40), na direção \mathbf{x} :

$$f_1 + f_7 + f_{10} + f_{11} + f_{15} = \rho_0 \frac{u_x}{v} + (f_3 + f_8 + f_9 + f_{13} + f_{17}), \quad (2.42)$$

para calcular u_x , ficando:

$$u_x = \frac{v}{\rho_0} \{ \rho - [f_0 + f_2 + f_4 + f_5 + f_6 + f_{12} + f_{14} + f_{16} + f_{18} + 2(f_3 + f_8 + f_9 + f_{13} + f_{17})] \}; \quad (2.43)$$

b) calculamos f_1 através do reflexo da parte de não-equilíbrio:

$$f_1 = f_3 + (f_1^{\text{ne}} - f_3^{\text{ne}}) = f_3 + \frac{1}{3} \rho_0 \frac{(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{u})}{v}; \quad (2.44)$$

c) calculamos valores auxiliares para f_7 , f_{10} , f_{11} e f_{15} através do reflexo da parte de não-equilíbrio:

$$\begin{aligned} f_7 &= f_9 + (f_7^{\text{ne}} - f_9^{\text{ne}}) = f_9 + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\mathbf{e}_7 \cdot \mathbf{u})}{v}, \\ f_{10} &= f_8 + (f_{10}^{\text{ne}} - f_8^{\text{ne}}) = f_{10} + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\mathbf{e}_{10} \cdot \mathbf{u})}{v}, \\ f_{11} &= f_{17} + (f_{11}^{\text{ne}} - f_{17}^{\text{ne}}) = f_{11} + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\mathbf{e}_{11} \cdot \mathbf{u})}{v}, \\ f_{15} &= f_{13} + (f_{15}^{\text{ne}} - f_{13}^{\text{ne}}) = f_{15} + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\mathbf{e}_{15} \cdot \mathbf{u})}{v}; \end{aligned} \quad (2.45)$$

d) calculamos uma densidade auxiliar como:

$$\rho_{\text{aux}} = \sum_{i=0}^{18} f_i \quad (2.46)$$

e, assim, adicionamos a massa necessária para que tenhamos conservação de massa (2.39), ou seja,

$$f_i = f_i + \frac{(\rho - \rho_{\text{aux}})}{4}, \quad i = 7, 10, 11, 15; \quad (2.47)$$

e) calculamos a projeção da velocidade auxiliar no plano YZ (plano transversal):

$$\mathbf{u}_{\text{aux}} = \text{proj}_{YZ} \left(\sum_{i=1}^{18} f_i v \mathbf{e}_i \right) \quad (2.48)$$

e adicionamos o momento necessário para que haja conservação da quantidade de

movimento (2.40) nas direções \mathbf{y} e \mathbf{z} , isto é,

$$f_i = f_i + \rho_0 \frac{[\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\text{aux}})]}{2v}, \quad i = 7, 10, 11, 15, \quad (2.49)$$

logo, temos o valor definitivo das f_7 , f_{10} , f_{11} e f_{15} , mediante a correção feita pelo segundo termo da equação acima.

A implementação das condições de contorno nos outros casos ocorre de maneira semelhante.

2.6 Análise assintótica

Nesta seção faremos o desenvolvimento formal da expansão assintótica de Chapman–Enskog que nos leva da equação de *lattice* Boltzmann:

$$f_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.50)$$

até as equações de Navier-Stokes:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.51a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (2.51b)$$

Faremos uso de uma expansão assintótica de Chapman–Enskog para a identificação das diferentes escalas do problema, particularizando a análise para um modelo de *lattice* Boltzmann no espaço tridimensional. Para tanto, utilizaremos a distribuição de equilíbrio incompressível, a qual fora introduzida por He e Luo (1997b), que foi adotada neste trabalho:

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \left\{ \rho + \rho_0 \left[3 \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{v^2} + \frac{9}{2} \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{v^4} - \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{v^2} \right] \right\}, \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.52)$$

A análise será restringida, sem perda de generalidade, ao uso do modelo de *lattice* tridimensional $D3Q19$ (ver Seção 2.3), o qual discretiza as possibilidades

de movimento das partículas em 18 direções mais a possibilidade das partículas permanecerem paradas.

No trabalho de He e Luo (1997b) encontramos esta aproximação das equações de Navier–Stokes com a utilização de um *lattice* bidimensional. Portanto, o que faremos aqui é uma extensão para o caso tridimensional, feita de forma similar ao caso bidimensional.

Para realizar a expansão de Chapman–Enskog introduzimos as seguintes expansões em potências que põem em evidência as diferentes escalas [He e Luo (1997b)]:

$$f_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} D_t^n f_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.53)$$

$$f_i(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n f_i^{(n)}(\mathbf{x}, t), \quad (2.54)$$

$$\partial_t = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \partial_{t_n}, \quad (2.55)$$

onde $\varepsilon = \Delta t$, $D_t = (\partial_t + v \mathbf{e}_i \cdot \nabla)$ e D_t^n indica a n -ésima aplicação de D_t , onde $D_t^0 = 1$.

Repare que a derivada temporal dada pela equação (2.55) é dividida em diferentes ordens (escalas) de ε . Esta expansão multiescala é necessária para captarmos os efeitos de convecção, em uma escala de tempo t_0 , e os efeitos de difusão, em outra escala de tempo mais lenta t_1 .

Assim, podemos reescrever a equação de *lattice* Boltzmann (2.50), em ordens consecutivas do parâmetro ε , como:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^0) : \quad & \frac{\varepsilon^0}{0!} D_t^0 f_i^{(0)} - \varepsilon^0 f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} [\varepsilon^0 f_i^{(0)} - f_i^{\text{eq}}] \\ \therefore \quad & f_i^{(0)} - f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} [f_i^{(0)} - f_i^{\text{eq}}] \\ \therefore \quad & f_i^{(0)} = f_i^{\text{eq}}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^1) : \quad & f_i + \varepsilon D_t f_i - f_i = -\frac{1}{\tau} [f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} - f_i^{\text{eq}}] \\ \therefore \quad & D_{t_0} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \end{aligned} \quad (2.57)$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}(\varepsilon^2) : \quad & f_i + \varepsilon D_t f_i + \frac{\varepsilon^2}{2!} D_t^2 f_i - f_i = -\frac{1}{\tau} [f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} - f_i^{\text{eq}}] \\
\therefore \quad & \varepsilon D_{t_0} (f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)}) + \varepsilon^2 \partial_t f_i^{(0)} + \frac{\varepsilon^2}{2} D_{t_0}^2 f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} [\varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)}] \\
\therefore \quad & D_{t_0} f_i^{(1)} + \partial_t f_i^{(0)} + \frac{1}{2} D_{t_0} \left(-\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right) = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \\
\therefore \quad & \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left(\frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) D_{t_0} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)},
\end{aligned} \tag{2.58}$$

onde $D_{t_n} = (\partial_{t_n} + v \mathbf{e}_i \cdot \nabla)$.

A função de distribuição f_i é uma solução da LBE, sujeita às restrições de conservação de massa e de quantidade de movimento (2.26) impostas da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\sum_i f_i^{(0)} &= \rho, \quad \sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} = \rho_0 \mathbf{u}, \\
\sum_i f_i^{(n)} &= 0 \quad \text{e} \quad \sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(n)} = 0, \quad n > 0.
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Definindo o tensor

$$\mathbf{E}^{(n)} = \sum_i \left[\omega_i \bigotimes_{k=1}^n (v \mathbf{e}_i) \right], \tag{2.60}$$

onde \bigotimes simboliza o produtório tensorial e os ω_i , $i = 0, \dots, 18$, estão definidos na equação (2.21). Podemos encontrar as seguintes propriedades do *lattice D3Q19*:

$$\left. \begin{aligned}
\sum_{i=1}^6 \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^2 &= 2v^2 \mathbf{I}^{(2)} \\
\sum_{i=7}^{18} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^2 &= 8v^2 \mathbf{I}^{(2)}
\end{aligned} \right\} \Rightarrow \mathbf{E}^{(2)} = \frac{1}{3} v^2 \mathbf{I}^{(2)}, \tag{2.61}$$

$$\left. \begin{aligned}
\sum_{i=1}^6 \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^4 &= 2v^4 \mathbf{I}^{(4)} \\
\sum_{i=7}^{18} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^4 &= 4v^4 (\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I}^{(4)})
\end{aligned} \right\} \Rightarrow \mathbf{E}^{(4)} = \frac{1}{9} v^4 \mathbf{\Lambda} \tag{2.62}$$

e

$$\mathbf{E}^{(2n+1)} = 0 \quad n \in \mathbb{N}, \tag{2.63}$$

onde os tensores $\mathbf{I}^{(2)}$ e $\mathbf{I}^{(4)}$ são os tensores identidade de segunda e quarta ordem, respectivamente, e o tensor de quarta ordem $\mathbf{\Lambda}$ foi definido na equação (2.15).

Com estas propriedades do tensor $\mathbf{E}^{(n)}$ podemos completar as restrições expostas nas equações (2.59) para $f_i^{(0)}$, resultando em:

$$\begin{aligned}
\sum_i f_i^{(0)} &= \rho, \\
\sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} &= \rho_0 \mathbf{u}, \\
\sum_i v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} &= \frac{1}{3} v^2 \rho \mathbf{I}^{(2)} + \rho_0 \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}, \\
\sum_i v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} &= \frac{1}{3} v^2 \rho_0 [\mathbf{I}^{(2)} \otimes \mathbf{u} + (\mathbf{I}^{(2)} \otimes \mathbf{u})^{1/T} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{I}^{(2)}],
\end{aligned} \tag{2.64}$$

onde a operação $(\cdot)^{1/T}$ indica a seguinte comutação de índices de um tensor \mathbf{R} de terceira ordem $\mathbf{R}^{1/T} = (R_{ijk})^{1/T} = R_{jki}$.

Os momentos de ordem 0 e 1 da equação (2.57) nos levam às equações de Euler, conforme demonstrado a seguir. Temos para o momento de ordem 0 da equação (2.57):

$$\begin{aligned}
\sum_i D_{t_0} f_i^{(0)} &= \sum_i \left[-\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right] \\
\therefore \sum_i \partial_{t_0} f_i^{(0)} + \sum_i (v \mathbf{e}_i \cdot \nabla) f_i^{(0)} &= -\frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(1)} \\
\therefore \partial_{t_0} \sum_i f_i^{(0)} + \nabla \cdot \left(\sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} \right) &= 0 \\
\therefore \partial_{t_0} \rho + \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{u}) &= 0,
\end{aligned} \tag{2.65}$$

e para o momento de ordem 1 da equação (2.57):

$$\begin{aligned}
\sum_i v \mathbf{e}_i D_{t_0} f_i^{(0)} &= \sum_i v \mathbf{e}_i \left[-\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right] \\
\therefore \partial_{t_0} \sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} + \nabla \cdot \left(\sum_i v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} \right) &= -\frac{1}{\tau} \sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(1)} \\
\therefore \partial_{t_0} (\rho_0 \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{(0)} &= 0,
\end{aligned} \tag{2.66}$$

onde o tensor de fluxo do momento de ordem zero é descrito por

$$\mathbf{\Pi}^{(0)} = \sum_i v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} = \frac{1}{3} v^2 \rho \mathbf{I}^{(2)} + \rho_0 \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}. \quad (2.67)$$

Agora, se reescrevemos as equações de Euler ((2.65) e (2.66)) em função da pressão normalizada $P = c_s^2 \rho / \rho_0$ e da velocidade do som $c_s = v / \sqrt{3}$, lembrando que $\nabla \rho_0 = 0$, chegamos às seguintes equações:

$$\frac{1}{c_s^2} \partial_{t_0} P + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.68)$$

e

$$\frac{\rho_0}{\rho_0} \partial_{t_0} \mathbf{u} + \nabla \cdot \left(\frac{1}{3} v^2 \frac{\rho}{\rho_0} \mathbf{I} + \frac{\rho_0}{\rho_0} \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} \right) = 0 \quad (2.69)$$

$$\therefore \partial_{t_0} \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P - \mathbf{u}(\nabla \cdot \mathbf{u}).$$

Diferentemente de outros modelos do tipo LBM, onde o termo divergente é cancelado exatamente, aqui o termo divergente, $\mathbf{u}(\nabla \cdot \mathbf{u})$, permanece na equação de momento. De qualquer forma, através da equação (2.68), encontramos que o termo divergente da equação (2.69) é de fato da ordem de $\mathcal{O}(M^3)$, o que o torna um termo de ordem mais alta em contraste com outros termos da mesma equação, logo este será desprezado mais adiante.

Por sua vez, os momentos da equação (2.58) nos levam às seguintes equações, tomando o momento de ordem 0 da equação (2.58):

$$\begin{aligned} & \sum_i \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left(\frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \sum_i D_{t_0} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(2)} \\ \therefore \partial_{t_1} \sum_i f_i^{(0)} + \left(\frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \left[\partial_{t_0} \sum_i f_i^{(1)} + \nabla \cdot \left(\sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(1)} \right) \right] &= 0 \quad (2.70) \\ \therefore \partial_{t_1} \rho &= 0, \end{aligned}$$

e tomando o momento de ordem 1 da equação (2.58):

$$\begin{aligned}
& \sum_i v \mathbf{e}_i \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left(\frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \sum_i v \mathbf{e}_i D_{t_0} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(2)} \\
\therefore & \partial_{t_1} \sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(0)} + \left(\frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \left[\partial_{t_0} \sum_i v \mathbf{e}_i f_i^{(1)} + \nabla \cdot \left(\sum_i v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i f_i^{(1)} \right) \right] = 0 \\
\therefore & \partial_{t_1} \rho_0 \mathbf{u} + \left(\frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{(1)} = 0,
\end{aligned} \tag{2.71}$$

onde o tensor de fluxo do momento de ordem 1 pode ser detalhado conforme:

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Pi}^{(1)} &= \sum_i v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i f_i^{(1)} = -\tau \sum_i v \mathbf{e}_i \otimes v \mathbf{e}_i D_{t_0} f_i^{(0)} \\
&= -\tau \left\{ \partial_{t_0} \mathbf{\Pi}^{(0)} + \frac{1}{3} v^2 \rho_0 [\nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{I}^{(2)} + \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \right\} \\
&= -\tau \left\{ \rho_0 \partial_{t_0} (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + c_s^2 \rho_0 [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \right\} \\
&= \tau \left\{ c_s^2 [\mathbf{u} \otimes \nabla \rho + (\mathbf{u} \otimes \nabla \rho)^T] + \rho_0 [\mathbf{u} \otimes (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}] \right. \\
&\quad \left. - c_s^2 \rho_0 [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \right\}. \tag{2.72}
\end{aligned}$$

Na equação acima, os termos da ordem de $\mathcal{O}(|\mathbf{u}|^3)$ devem ser negligenciados, para que sejamos consistentes com a expansão válida para baixas velocidades da f_i^{eq} até a ordem de $\mathcal{O}(|\mathbf{u}|^2)$ (note que $\mathcal{O}(|\mathbf{u}|) = \mathcal{O}(M)$, por isso tomamos a liberdade de trocar estas notações quando for conveniente). Logo, os termos contendo $\mathbf{u} \otimes \nabla \rho$ também devem ser negligenciados por serem da ordem de $\mathcal{O}(M^3)$. Assim, podemos reescrever o termo $[(2\tau - 1)/2\tau] \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{(1)}$, a partir da equação (2.72), como:

$$\begin{aligned}
\frac{(2\tau - 1)}{2\tau} \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{(1)} &= -\frac{\nu}{\Delta t} \rho_0 \nabla \cdot [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] + \mathcal{O}(M^3) \\
&= -\frac{\nu}{\Delta t} \rho_0 [\nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u})] + \mathcal{O}(M^3) \\
&= -\frac{\nu}{\Delta t} \rho_0 \nabla^2 \mathbf{u} + \mathcal{O}(M^3),
\end{aligned} \tag{2.73}$$

onde o termo $\nabla (\nabla \cdot \mathbf{u})$ foi cortado por ser da ordem de $\mathcal{O}(M^3)$ devido à

equação (2.68), e a viscosidade cinemática fica representada por

$$\nu = \frac{(2\tau - 1) \Delta x^2}{6 \Delta t}. \quad (2.74)$$

Combinando os resultados de ordem 0 (equações (2.68) e (2.69)) e os resultados de ordem 1 (equações (2.70), (2.71) e (2.73)), fazendo uso da notação $\partial_t = \partial_{t_0} + \varepsilon \partial_{t_1}$ e fazendo no limite o parâmetro $\varepsilon = 1$, chegamos às seguintes equações:

$$\frac{1}{c_s^2} \partial_t P + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 + \mathcal{O}(M^2), \quad (2.75)$$

$$\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathcal{O}(M^3). \quad (2.76)$$

Para o caso em que a pressão varia com o tempo, ou seja, $\partial_t P \neq 0$ precisamos de uma condição extra para obtermos a equação de continuidade correta (ver equação (2.51a)) das equações de N-S. Analisando a equação (2.75) em sua forma adimensional, vemos que:

$$\frac{1}{T} \partial_{t'} P' + \frac{c_s}{L} \nabla' \cdot \mathbf{u}' = 0 + \mathcal{O}(M^2), \quad (2.77)$$

onde $P' = P/c_s^2$, $t' = t/T$, $\nabla' = L\nabla$, $\mathbf{u}' = \mathbf{u}/c_s$ e L e T são o comprimento e o tempo característicos do problema, respectivamente. Assim, conclui-se que para o termo $\partial_{t'} P'$ ser negligenciado a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$T \gg \frac{L}{c_s}. \quad (2.78)$$

O significado desta condição é bastante claro fisicamente. Temos que o tempo (T) no qual o campo de pressão sofre uma mudança significativa (na escala do comprimento L) deve ser muito maior que o tempo (L/c_s) no qual o sinal de som leva para cruzar a distância L , transportando a informação desta mudança. A influência que a proporção entre o tempo característico (T) e o tempo em que o sinal de som leva para cruzar a distância L tem no comportamento do fluido será

estudada, através de exemplos numéricos, no Capítulo 3.

Feitas estas observações, demonstramos que a partir da equação de *lattice* Boltzmann foram recuperadas as equações de Navier-Stokes incompressíveis, com as precisões da ordem de $\mathcal{O}(M^2)$ na equação de continuidade e da ordem de $\mathcal{O}(M^3)$ na equação de momento, ou seja,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 + \mathcal{O}(M^2) \quad (2.79)$$

e

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathcal{O}(M^3). \quad (2.80)$$

Como conclusão, verificamos que a equação de *lattice* Boltzmann consegue aproximar assintoticamente as equações de N-S, nas ordens indicadas acima, baseando-se na utilização da distribuição de equilíbrio incompressível (2.52) e na premissa do número de Mach ser pequeno, além da condição apresentada na equação (2.78) para escoamentos transientes.

Contribuições do Capítulo

Este capítulo teve foco na revisão da teoria do LBM e no estudo e extensão dos modelos previamente desenvolvidos para a distribuição de equilíbrio, condições de contorno e modelos de *lattice*. Tendo isto em vista, as principais contribuições deste capítulo foram:

- a proposta de uma distribuição de equilíbrio mais geral voltada para escoamentos incompressíveis (equação (2.28)) na Seção 2.4;
- a extensão dos modelos de imposição de condições de contorno de velocidade e pressão para a distribuição de equilíbrio iBGK (equação (2.24)) na Seção 2.5;
- a extensão da expansão assintótica de Chapman–Enskog para o modelo de *lattice* tridimensional $D3Q19$ com modelo de distribuição de equilíbrio iBGK (equação (2.24)) na Seção 2.6.

Capítulo 3

Modelagem de escoamentos incompressíveis

A modelagem computacional do escoamento incompressível de fluidos, voltada para problemas da área de hemodinâmica é o tema deste capítulo. Aqui, estudamos aspectos práticos da modelagem computacional e simulação numérica do escoamento de fluidos, através do método de *lattice* Boltzmann (LBM), assim como, suas aplicações a diversos problemas de interesse. Diversos tópicos serão explorados, de forma que se possam realizar simulações estáveis, acuradas e computacionalmente eficientes de uma ampla gama de escoamentos.

O capítulo inicia com uma descrição detalhada dos parâmetros numéricos e físicos envolvidos na implementação do LBM e técnicas para sua correta escolha (Seção 3.1). Seguido da modelagem computacional de problemas teste, tanto em 2D (Seção 3.2) quanto em 3D (Seção 3.3), para fins de validação da implementação e estudo numérico dos parâmetros envolvidos. Na sequência, modelamos três cenários do escoamento sanguíneo em vasos arteriais (Seção 3.4), destacando as particularidades de tais problemas e explorando a influência de parâmetros adimensionais em quantidades hemodinâmicas de interesse. Visando melhorar a estabilidade deste método explícito, realizamos uma análise de estabilidade linearizada da equação que o governa e comparamos os resultados desta análise com outros esquemas através da modelagem do escoamento de Poiseuille (Seção 3.5). Por fim, concluímos o capítulo explorando aspectos de paralelismo e desempenho

da implementação do LBM (Seção 3.6), incluindo comparações com o desempenho e acurácia de uma implementação de um método clássico como o método de elementos finitos (FEM).

3.1 Parâmetros do modelo

Como a maioria dos métodos numéricos, o LBM requer uma seleção cuidadosa dos parâmetros numéricos para otimizar o compromisso entre o custo computacional e a precisão dos resultados. Para obter resultados acurados, temos que escolher (estimar) os parâmetros indicados e, em seguida, ajustá-los se necessário.

O principal parâmetro de controle é o parâmetro de relaxamento (τ), que determina a estabilidade numérica do esquema. O valor mínimo teórico deste parâmetro é 0,5, entretanto, aquele valor para o qual se mantém a estabilidade do método é dependente do problema, sendo especialmente afetado por altos gradientes de pressão e altos números de Reynolds. Obtivemos simulações estáveis em todos casos testados com $\tau > 0,52$. Sendo que $\tau = 0,5 + 3\nu\Delta t/\Delta x^2$, é importante salientar que este parâmetro diminui quando ν ou Δt diminuem e quando Δx aumenta, logo o refinamento do *lattice* é algumas vezes necessário para aumentar τ e manter a estabilidade. Além disso, o *lattice* deve ser refinado o suficiente para capturar os gradientes espaciais da solução. Por outro lado, é importante manter o número de Mach ($M = u_{max}/c_s$) baixo, já que a aproximação dada pelo LBM das equações de Navier–Stokes (2.12) se baseia nesta hipótese. Normalmente, mantendo o Mach menor que 0,15 já se garante que os momentos das distribuições de micro-partículas representem o comportamento macroscópico de um escoamento incompressível. Na Seção 3.3.1 apresentamos alguns testes da influência do número de Mach nos resultados da simulação do escoamento incompressível de um fluido em uma cavidade cúbica.

No contexto de problemas dependentes do tempo (transientes), o tempo característico (T), que pode ser um período de oscilação no caso de problemas

periódicos, tem que ser muito maior que o tempo de propagação (L/c_s) de uma onda sonora sobre o comprimento característico (L) do problema, para que não ocorram efeitos de compressibilidade espúrios, conforme indicado pela equação (2.78). Isto é, as variações temporais das condições de contorno (em velocidade e pressão) devem ocorrer de maneira muito mais lenta que a propagação das informações no *lattice* (associada à velocidade do som). Vamos nos referir a esta relação como:

$$\theta_r = \frac{T}{(L/c_s)}. \quad (3.1)$$

Outra hipótese da expansão assintótica da LBE para equações de N-S incompressíveis é baseada em valor alto de θ_r [He e Luo (1997b)]. Este é um ponto crucial em hemodinâmica computacional por causa das características geométricas dos domínios espaciais em que as simulações ocorrem, os quais evidenciam uma alta relação de aspecto. Os experimentos numéricos realizado neste trabalho indicam que θ_r deve ser maior que 30 (ver Seções 3.2 e 3.3).

O ajuste de parâmetros é feito baseado em modificações do passo temporal e do espaçamento do *lattice*. Na Tabela 3.1, está um resumo de como três técnicas básicas de ajuste afetam os principais parâmetros de uma problema dependente do tempo, com valores físicos constantes (viscosidade, dimensões, entre outros). Esta tabela é baseada na apresentada por Artoli et al. (2006a), com modificações nas técnicas e nos parâmetros analisados. As técnicas consistem em reduzir o passo temporal, refinar o *lattice* ou fazer ambos. Nesta tabela, o símbolo ' indica a mudança relativa em um parâmetro, $\tau_r = \tau - 0,5$, N_T e “custo” representam o número de passos temporais e um custo computacional relativo, respectivamente, da simulação de um período de tempo determinado (digamos um ciclo, em problemas periódicos), finalmente, (·) indica o caso 3D (somente mostrado quando difere do caso 2D). Esta tabela nos indica que reduzir o passo temporal tem um custo baixo, assim como, os benefícios de reduzir o número de Mach e aumentar θ_r , entretanto, o primeiro pode levar a instabilidades numéricas com a redução de τ_r . O que pode ser revertido com o refinamento do *lattice*, acarretando

um custo computacional maior. Entretanto, note que refinar o *lattice* sem reduzir o passo temporal não é conveniente, pois reduz θ_r e aumenta o número de Mach. Portanto, o mais indicado neste caso é refinar o *lattice* juntamente com a redução do passo temporal. Nas Seções 3.2, 3.3 e 3.4 temos a aplicação destas técnicas a diferentes problemas.

Técnica	N_T'	$\Delta t'$	células'	$\Delta x'$	θ_r'	τ_r'	Mach'	custo'
Reduzir Δt	n	$1/n$	1	1	n	$1/n$	$1/n$	n
Refinar <i>lattice</i>	1	1	n^2 (n^3)	$1/n$	$1/n$	n^2	n	n^2 (n^3)
Fazer ambos	n	$1/n$	n^2 (n^3)	$1/n$	1	n	1	n^3 (n^4)

Tabela 3.1: Técnicas para o ajuste de parâmetros em simulações transientes via LBM e seus efeitos nos demais parâmetros e no custo computacional. O símbolo ' indica uma mudança relativa no parâmetro, N_T representa o número de passo em um período fixo e (\cdot) indica o caso 3D.

Além da calibração dos parâmetros, é importante definir uma condição de parada. Isto é, um critério que estabeleça quando um sistema chegou ao estado estacionário ou quando o mesmo atingiu um regime permanente ou periódico (no caso de análises de casos com dinâmica periódica), tendo eliminado qualquer fenômeno espúrio decorrente da condição inicial. Como condição de parada, usualmente se exige que a variação média do campo de velocidade entre dois instantes de tempo (escolhidos de acordo com as características do problema) seja pequena, visando verificar a sua convergência. Para tanto, existem várias maneiras de medir a distância entre dois campos vetoriais sobre malhas regulares, sendo todas elas normas equivalentes. Aqui utilizaremos normas relativas, cujas definições são as seguintes:

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_l = \frac{\sum_{i=1}^N [|\mathbf{A}_i - \mathbf{B}_i| / |\mathbf{B}_i|]}{N}, \quad (3.2)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l^2} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N [(\mathbf{A}_i - \mathbf{B}_i)^2 / \mathbf{B}_i^2]}}{N}, \quad (3.3)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l/l} = \frac{\sum_{i=1}^N |\mathbf{A}_i - \mathbf{B}_i|}{\sum_{i=1}^N |\mathbf{B}_i|}, \quad (3.4)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l^2/l^2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\mathbf{A}_i - \mathbf{B}_i)^2}{\sum_{i=1}^N \mathbf{B}_i^2}}, \quad (3.5)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l/l^\infty} = \frac{\sum_{i=1}^N |\mathbf{A}_i - \mathbf{B}_i|}{\max_i(|\mathbf{B}_i|)N}, \quad (3.6)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l^2/l^\infty} = \frac{\sum_{i=1}^N (\mathbf{A}_i - \mathbf{B}_i)^2}{\max_i(|\mathbf{B}_i|)N}, \quad (3.7)$$

onde $\mathbf{A}_i^2 = (\mathbf{A}_i \cdot \mathbf{A}_i)$ e \mathbf{A}_i e \mathbf{B}_i são os vetores correspondentes a cada célula i dos campos vetoriais \mathbf{A} e \mathbf{B} , respectivamente.

A norma $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_l$ e a norma $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l^2}$ devem ser usadas com cautela, pois podem ocorrer divisões por zero ou divisões com quocientes muito pequenos. Por isso, na maioria das vezes utilizaremos as normas (3.4)–(3.7). As normas com termos quadráticos, (3.3), (3.5) e (3.7), apresentam a vantagem de ter custo computacional menor que as demais, pois apenas uma raiz quadrada é calculada.

3.2 Validação e exemplos numéricos em 2D

Nesta seção apresentaremos as implementações numéricas de três problemas típicos da dinâmica de fluidos incompressíveis. Primeiramente, apresentamos o problema estacionário do escoamento de Poiseuille, onde mostraremos comparações dos resultados numéricos com a solução analítica e analisaremos a convergência do erro em uma implementação do LBM.

Em seguida, mostraremos resultados do problema estacionário da cavidade quadrada, muito utilizado como caso de teste em dinâmica de fluidos computacional, e faremos comparações com dados encontrados na literatura para diferentes números de Reynolds.

Por último, dado que o maior interesse deste trabalho é a abordagem de problemas dependentes do tempo, analisaremos o problema transiente do escoamento de Womersley. Nesta parte, compararemos os resultados numéricos de uma simulação (com alto número de Womersley) com a solução analítica do problema.

Em todas as simulações realizadas nesta seção partimos de uma condição

inicial do escoamento dada pela distribuição de equilíbrio com velocidade nula e densidade média ρ_0 (definida em cada problema).

3.2.1 Escoamento de Poiseuille

O escoamento em regime estacionário de um fluido incompressível ao longo de um canal retangular, com paredes impermeáveis e não-eskorregadias, devido à diferença de pressão entre os extremos do canal é denominado escoamento de Poiseuille. O problema é ilustrado pela Figura 3.1, onde p_{in} é a pressão mantida na extremidade esquerda e p_{out} na direita, optamos por $p_{in} > p_{out}$.

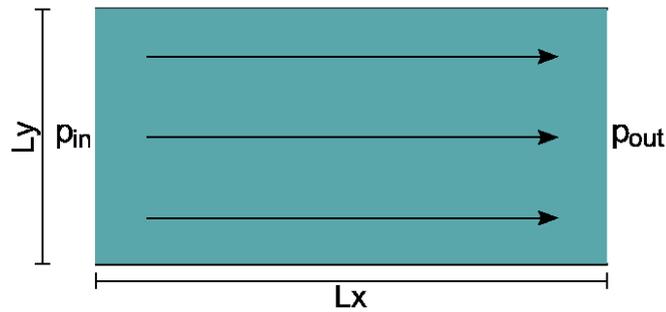


Figura 3.1: Ilustração do esquema para o escoamento de Poiseuille.

A solução das equações de Navier–Stokes pode ser achada de forma analítica neste caso simples e é descrita pelas seguintes equações

$$\begin{aligned} u_x(x, y) &= \frac{\Delta p}{2\nu\rho} \frac{y}{L_y} \left(1 - \frac{y}{L_y}\right), \\ u_y(x, y) &= 0, \\ p(x, y) &= p_{in} + x\Delta p, \end{aligned} \tag{3.8}$$

onde p é a pressão do fluido, $\Delta p = (p_{out} - p_{in})/L_x$ é o gradiente de pressão, ν é a viscosidade cinemática e u_x e u_y são as componentes horizontal e vertical da velocidade, respectivamente.

Este problema fica caracterizado pelo número adimensional de Reynolds (Re), o qual se mede como:

$$Re = L_y u_{max} / \nu, \tag{3.9}$$

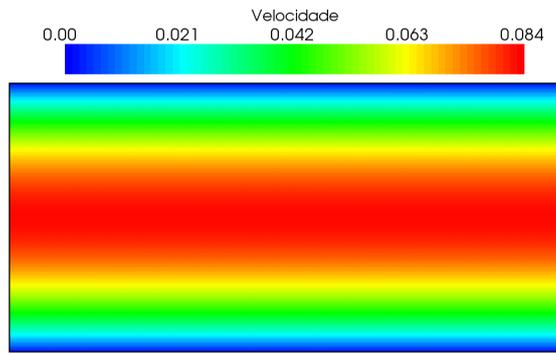
onde u_{max} corresponde à velocidade máxima obtida na equação (3.8).

Nas simulações numéricas implementamos as condições de contorno de pressão e de velocidade descritas na Seção 2.5 para impor as pressões $p_{in}=1,001$ e $p_{out}=1$ e a velocidade nula nas paredes. Simulamos casos com $Re=30$ constante em um canal com dimensões $L_x=2$ e $L_y=1$ e com densidade média do fluido $\rho_0=(p_{in}+p_{out})/(2c_s^2)$. Lembrando que a velocidade do som é definida no modelo escolhido como $c_s=\Delta x/(\sqrt{3}\Delta t)$, onde Δx é o espaçamento e Δt o passo no tempo. Realizamos a simulação sobre um tamanho de *lattice* inicial com poucos pontos e depois fomos refinando este *lattice* para analisar a convergência do erro definido pela equação (3.2), mantendo sempre o espaçamento e o passo no tempo iguais entre si (tais que $M=0,1$). Notemos que a medida de erro adotada não terá problemas numéricos pois teremos no quociente da equação valores conhecidos, e diferentes de zero, da solução exata.

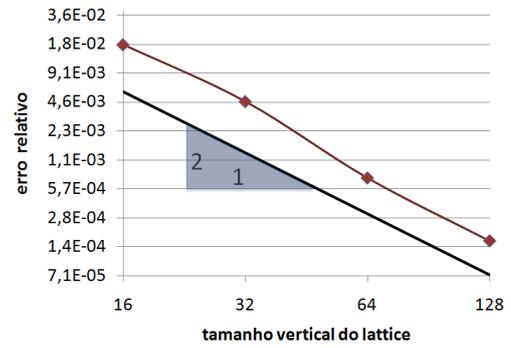
Na Figura 3.2 podemos ver o resultado da simulação numérica com um *lattice* de tamanho 256×128 e $Re=30$ comparado com a solução exata do problema. Também expomos na Figura 3.2(b) um gráfico em escala $\log_2 \times \log_2$ onde mostramos a convergência do erro a medida que refinamos o *lattice*. Pode-se observar que a convergência tem ordem próxima de 2, estando de acordo com a ordem do modelo escolhido e das condições de contorno adotadas. As Figuras 3.2(c) e 3.2(d) mostram a velocidade e a pressão, obtidas na simulação, ao longo das direções longitudinal e transversal (em linhas tracejadas), em comparação com a solução exata (em linhas coloridas). Observe que a solução aproximada obtida está em grande acordo com a solução exata.

3.2.2 Cavity quadrada

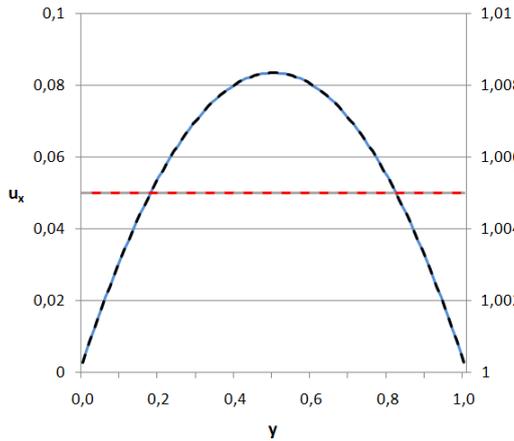
O problema da cavidade quadrada é amplamente utilizado na dinâmica de fluidos computacional, com o objetivo de avaliar novos esquemas numéricos e de testar suas convergências. O problema, representado pelo esquema da Figura 3.3, consiste em uma cavidade quadrada com paredes impermeáveis e não-



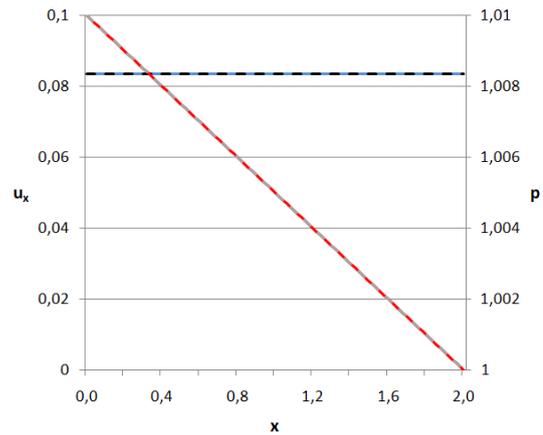
(a) Magnitude da velocidade



(b) Convergência do erro ao refinar o *lattice*



(c) Veloc. e pressão sobre linha longitudinal



(d) Veloc. e pressão sobre linha transversal

Figura 3.2: Comparações dos resultados da simulação do escoamento de Poiseuille com $Re = 30$ e *lattice* 256×128 com a solução exata.

eskorregadas, das quais somente a parede superior se desloca com velocidade constante para a direita (denotada por U_{max}), enquanto que as outras permanecem com velocidade nula. Logo, o escoamento em seu interior produz-se devido à difusão dos efeitos viscosos a partir do movimento da parede superior.

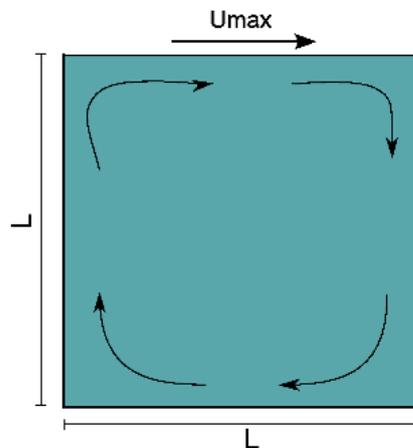


Figura 3.3: Ilustração do esquema para o problema da cavidade quadrada.

Este problema fica caracterizado pelo número adimensional de Reynolds, o qual se mede neste caso como

$$Re = \frac{LU_{max}}{\nu}, \quad (3.10)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido.

Simulamos diferentes casos deste problema para os números de Reynolds 100, 400 e 1000 em *lattices* de tamanhos 64×64 , 128×128 e 256×256 . Neste problema, o número de Reynolds influencia na posição dos centros dos vórtices, no número de vórtices gerados, nos campos de pressão e de velocidade, entre outros. As simulações foram feitas tomando-se o lado da cavidade e a velocidade máxima iguais a 1, o número de Mach ($M = U_{max}/c_s$) foi mantido em 0,17 (pois observamos pouca variação com valores de Mach mais baixos) e adotamos a densidade média $\rho_0 = 1$. Como neste caso não existe solução analítica, comparamos os resultados das simulações numéricas com referências da literatura, onde os resultados foram obtidos através de um método numérico implícito [Ghia et al. (1982)].

Na Figura 3.4 (coluna da esquerda) plotamos, para os diferentes números de Reynolds, a velocidade vertical (denotada por u_y) ao longo da linha horizontal que passa pelo centro geométrico da cavidade juntamente com a velocidade horizontal (denotada por u_x) ao longo de uma linha vertical que passa pelo mesmo centro. Aqui, utilizamos as notações LB64, LB128 e LB256 para nos referenciar aos resultados das simulações com *lattices* de tamanho 64×64 , 128×128 e 256×256 , respectivamente. Na mesma coluna da figura incluem-se os resultados obtidos por Ghia et al. (1982), para efeito de comparação. Além disso, na coluna direita da mesma Figura 3.4 plotamos algumas das linhas de corrente dos resultados obtidos com o *lattice* de tamanho 256×256 para ilustrar a estrutura do escoamento estacionário do fluido.

Como pode-se observar, para $Re = 100$ os resultados são bem próximos dos de Ghia et al. (1982) para todos os tamanhos de *lattice* testados. Para $Re = 400$ e $Re = 1000$ podemos observar que os resultados se aproximam consistentemente

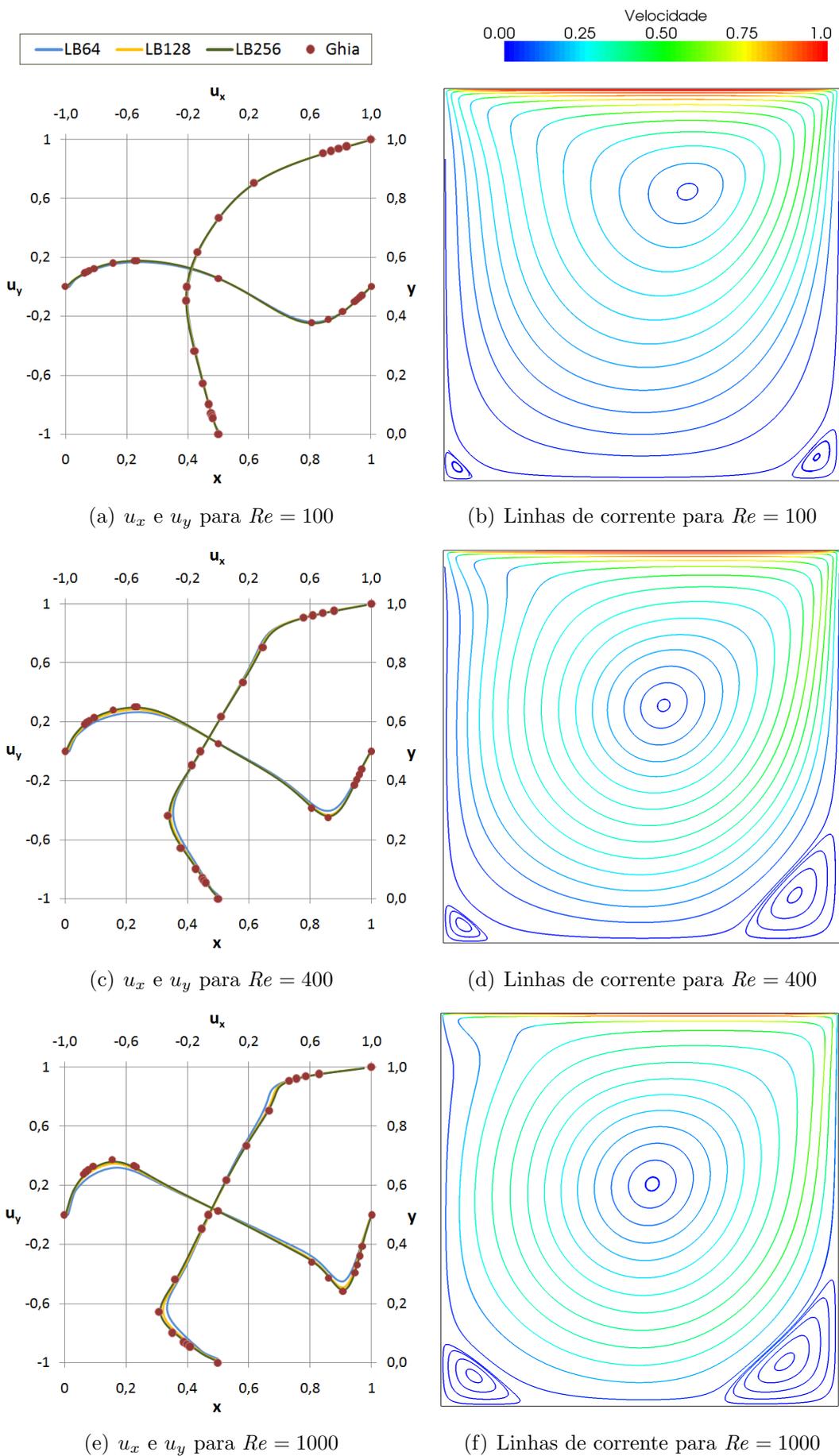


Figura 3.4: Componentes u_x e u_y da velocidade ao longo de linhas nas direções y e x e linhas de corrente dos campos de velocidade da cavidade quadrada.

dos de Ghia et al. (1982) à medida que refinamos o *lattice*.

A outra comparação realizada foi com respeito à posição dos centros dos vórtices característicos do escoamento. Para cada número de Reynolds as posições resultantes das simulações aqui realizadas são comparadas com dados obtidos da literatura e exibidos na Tabela 3.2 (junto com as referências respectivas). Como conclusão, observa-se que os resultados obtidos aqui estão em grande acordo com os resultados encontrados nas referências bibliográficas, apresentando desvio máximo na posição do vórtice central menor que 0,004 (em relação aos resultados de Ghia et al. (1982)).

Vórtices	Reynolds	100		400		1000	
	Referência	x	y	x	y	x	y
Central	LB64	0,617	0,736	0,561	0,606	0,536	0,566
	LB128	0,617	0,737	0,558	0,605	0,533	0,565
	LB256	0,616	0,737	0,556	0,605	0,532	0,565
	Tuann (1978)	0,61	0,722	0,56	0,583	—	—
	Ozawa (1975)	—	—	0,559	0,614	0,533	0,569
	Ghia (1982)	0,6172	0,7344	0,5547	0,6055	0,5313	0,5626
Esquerdo	LB64	0,0289	0,0295	0,0429	0,0393	0,0787	0,0703
	LB128	0,0325	0,0339	0,0494	0,0452	0,0816	0,0752
	LB256	0,0325	0,0352	0,0502	0,0464	0,0831	0,0771
	Ghia (1982)	0,0313	0,0391	0,0508	0,0469	0,0859	0,0785
Direito	LB64	0,946	0,0553	0,889	0,119	0,872	0,113
	LB128	0,943	0,0594	0,888	0,121	0,867	0,113
	LB256	0,943	0,0604	0,886	0,122	0,865	0,112
	Ghia (1982)	0,9453	0,0625	0,8906	0,1250	0,8594	0,1094

Tabela 3.2: Posição dos centros dos vórtices obtidos pelo presente trabalho e por Ghia et al. (1982).

3.2.3 Escoamento de Womersley

O problema do escoamento de Womersley é característico na dinâmica de fluidos, dado que é possível calcular a solução analítica das equações de Navier–Stokes [Fang et al. (2002a)] e assim avaliar o desempenho dos esquemas numéricos em um problema com forças externas dependentes do tempo. O problema é intrinsecamente transiente e possui um caráter periódico. Semelhante ao problema

de Poiseuille, confinamos um fluido incompressível entre duas paredes rígidas impermeáveis e mantemos uma pressão fixa na extremidade direita (P_{out}), enquanto na outra extremidade a pressão (P_{in}) varia periodicamente ao longo do tempo, conforme a Figura 3.5.

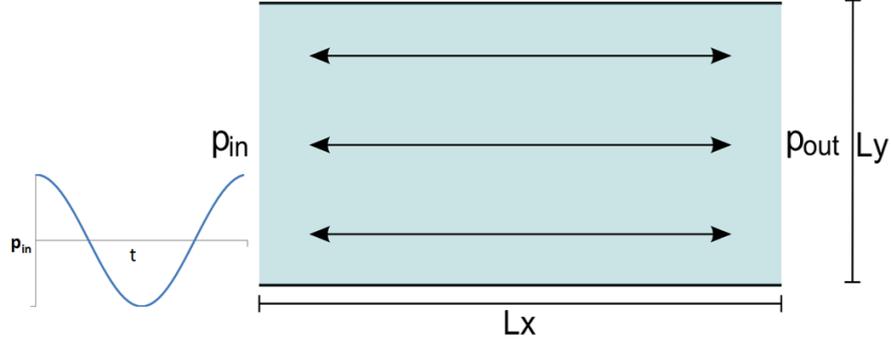


Figura 3.5: Ilustração do esquema para o escoamento de Womersley em 2D.

Nos exemplos aqui apresentados optamos por uma função cosseno para descrever a variação da pressão na extremidade esquerda, ficando o gradiente de pressão descrito por

$$\Delta p(t) = \frac{p_{out} - p_{in}(t)}{L_x} = -A \cos(\eta t), \quad (3.11)$$

onde $A = \max(\Delta p)$ é a amplitude do gradiente de pressão e $\eta = 2\pi/T$ é a frequência angular, sendo T o período de oscilação da condição de contorno.

Dadas as condições de contorno, a solução analítica do escoamento de Womersley, em termos da velocidade (com componentes denotadas por u_x e u_y) e da pressão (denotada por p), resulta:

$$\begin{aligned} u_x(x, y, t) &= -\text{Real} \left[\hat{i} \frac{A}{\eta \rho} \left(1 - \frac{\cos[\lambda(2y/L_y - 1)]}{\cos(\lambda)} \right) e^{\hat{i}\eta t} \right], \\ u_y(x, y, t) &= 0, \\ p(x, y, t) &= p_{in}(t) + x\Delta p, \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde ρ é a densidade, \hat{i} é a unidade imaginária, $\text{Real}(\cdot)$ indica a componente real do argumento (\cdot) e λ é dado em função do número adimensional de Womersley

(Wo), conforme:

$$\lambda^2 = -i Wo^2, \quad Wo = \frac{L_y}{2} \sqrt{\frac{\eta}{\nu}}. \quad (3.13)$$

Diferentemente do caso da cavidade quadrada, onde os fenômenos físicos eram governados pelo número de Reynolds, neste problema o número adimensional de interesse é o número de Womersley.

Realizamos simulações mantendo o número de Reynolds ($Re = L_y u_{max}/\nu$) fixo em 30 (onde u_{max} é a velocidade máxima obtida através da equação (3.12)), utilizando $\rho_0 = p_{out}/c_s^2$, $L_x = 2$, $L_y = 1$ e $Wo = 15$ (representando oscilações com alta frequência adimensional) em um *lattice* de tamanho 256×128 . Na Figura 3.6, mostramos a magnitude do campo de velocidade para 4 instantes diferentes do período. Na Figura 3.7 apresentamos o perfil da componente u_x da velocidade ao longo de uma linha vertical (na direção y) localizada no centro longitudinal do canal. Nesta figura a solução numérica obtida é comparada com a solução analítica (3.12) para diferentes instantes de tempo ao longo de um período.

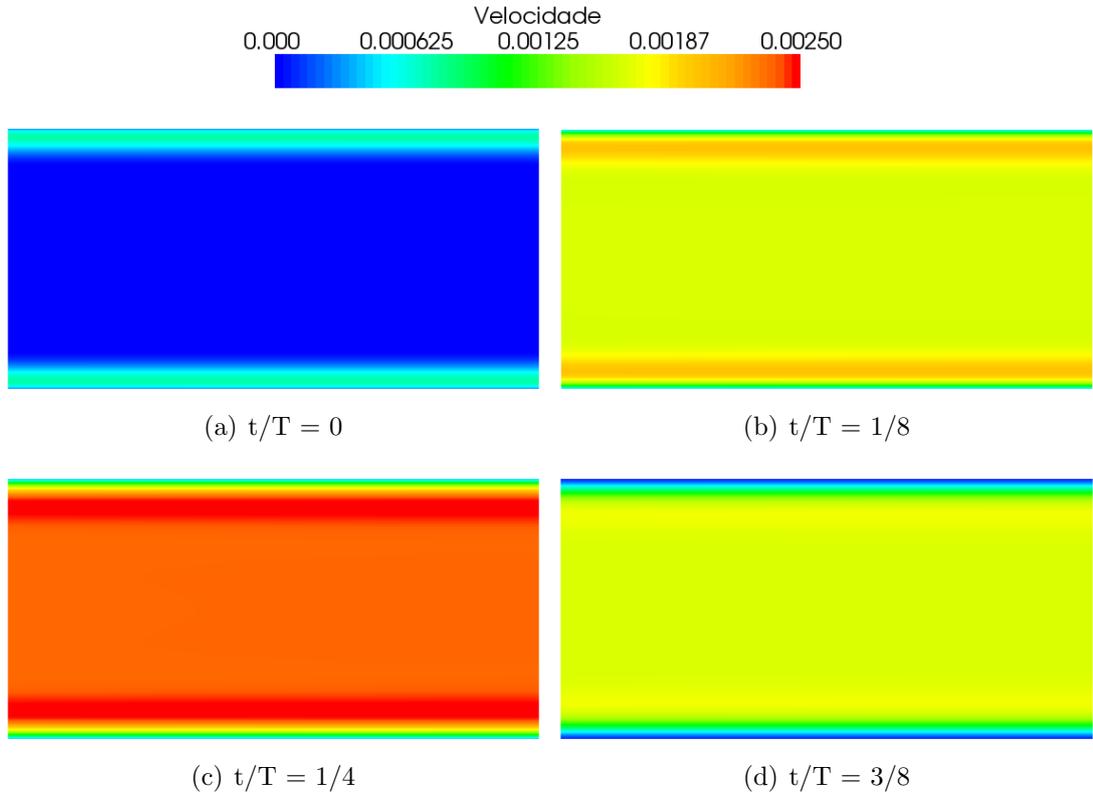


Figura 3.6: Magnitude da velocidade em 4 instantes para $Wo = 15$.

Da análise dos resultados, conclui-se que o método de *lattice* Boltzmann

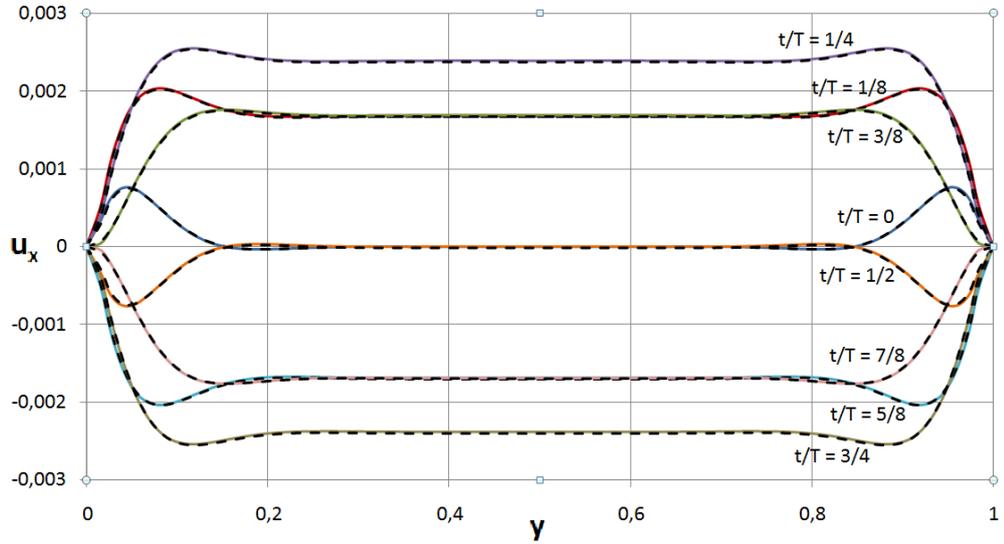


Figura 3.7: Componente u_x ao longo de uma linha vertical para $Wo = 15$ das soluções numérica (linhas coloridas) e analítica (linhas pontilhadas).

conseguiu prever acuradamente as características de um escoamento com $Wo = 15$ em um *lattice* de 256×128 pontos com 38.400 passos por período. Tal discretização foi necessária para capturar os altos gradientes de velocidade próximos à parede e, juntamente com o passo temporal adequado, garantir um erro de 0,79% (de acordo com a medida expressa pela equação (3.5)). A simulação foi considerada convergida quando a diferença relativa média (calculada através da equação (3.5)) entre a componente horizontal dos campos de velocidade (u_x) nos instantes de tempo t e $t - T$ fosse menor que 10^{-5} , isto ocorreu após 96 ciclos. Um estudo mais aprofundado sobre relações entre desempenho e acurácia das simulações será desenvolvido na próxima seção em simulações tridimensionais.

De forma complementar, analisamos o comportamento das distribuições de partículas em cada uma das nove direções do *lattice* bidimensional $D2Q9$. Para tanto, se torna interessante estudar como as distribuições de partículas em cada direção variam em torno da distribuição de equilíbrio (com $\mathbf{u} = 0$ e $\rho = \rho_0$), isto é, estudar as quantidades $f_i = f_i - f_i^{\text{eq}}(0, \rho_0)$, $i = 0, \dots, 8$. Pois, esta abordagem permite entender como as distribuições de partículas se alteram para representar as variações nos campos de velocidade e pressão.

Na Figura 3.8, mostramos as variações (f_i) de cada uma das nove

distribuições (f_0, \dots, f_8 , referentes às direções $\mathbf{e}_0, \dots, \mathbf{e}_8$, respectivamente, ver Figura 2.2) em uma célula no centro do canal (figura superior) e em outra próxima à parede inferior (figura inferior) ao longo de dois ciclos. Observamos a simetria esperada na figura superior, onde as distribuições f_0 , f_2 e f_4 sofrem pequenas oscilações (devido às variações de pressão neste ponto, pois a componente vertical da velocidade é nula), as distribuições f_1 , f_5 e f_8 aumentam (diminuem) na mesma proporção quando a velocidade aumenta (diminui) e as distribuições f_3 , f_6 e f_7 têm o comportamento oposto. Observe que as curvas mostradas nesta figura estão sobrepostas e divididas nos três grupos mencionados, isto acontece pois a componente vertical da velocidade e o gradiente espacial da velocidade são nulos neste ponto central. Enquanto na figura inferior, as distribuições f_0 , f_2 e f_4 se modificam da mesma forma (segundo as oscilações de pressão) e as demais distribuições são determinadas pela orientação da velocidade (como no caso anterior). Porém, não estão mais sobrepostas, porque próximo à parede inferior há um significativo gradiente espacial de velocidade na direção vertical. Note ainda que existe uma diferença na fase das oscilações que ocorrem nestes dois pontos, conforme já indicava a Figura 3.7.

3.3 Validação e exemplos numéricos em 3D

Nesta seção apresentaremos as implementações numéricas de dois problemas típicos da dinâmica de fluidos incompressíveis em 3D. O problema estacionário da cavidade cúbica foi uma das problemáticas escolhidas para ser estudada. Por não existir solução analítica para o problema, iremos comparar os resultados obtidos com outros encontrados na literatura. Além disso, iremos analisar como o refinamento da malha e a redução do número de Mach influenciam nos resultados para diferentes números de Reynolds.

A segunda implementação selecionada foi o problema transiente, com regime periódico, do escoamento de Womersley, em um tubo cilíndrico. Como no caso bidimensional, este problema possui solução analítica e a mesma é caracterizada

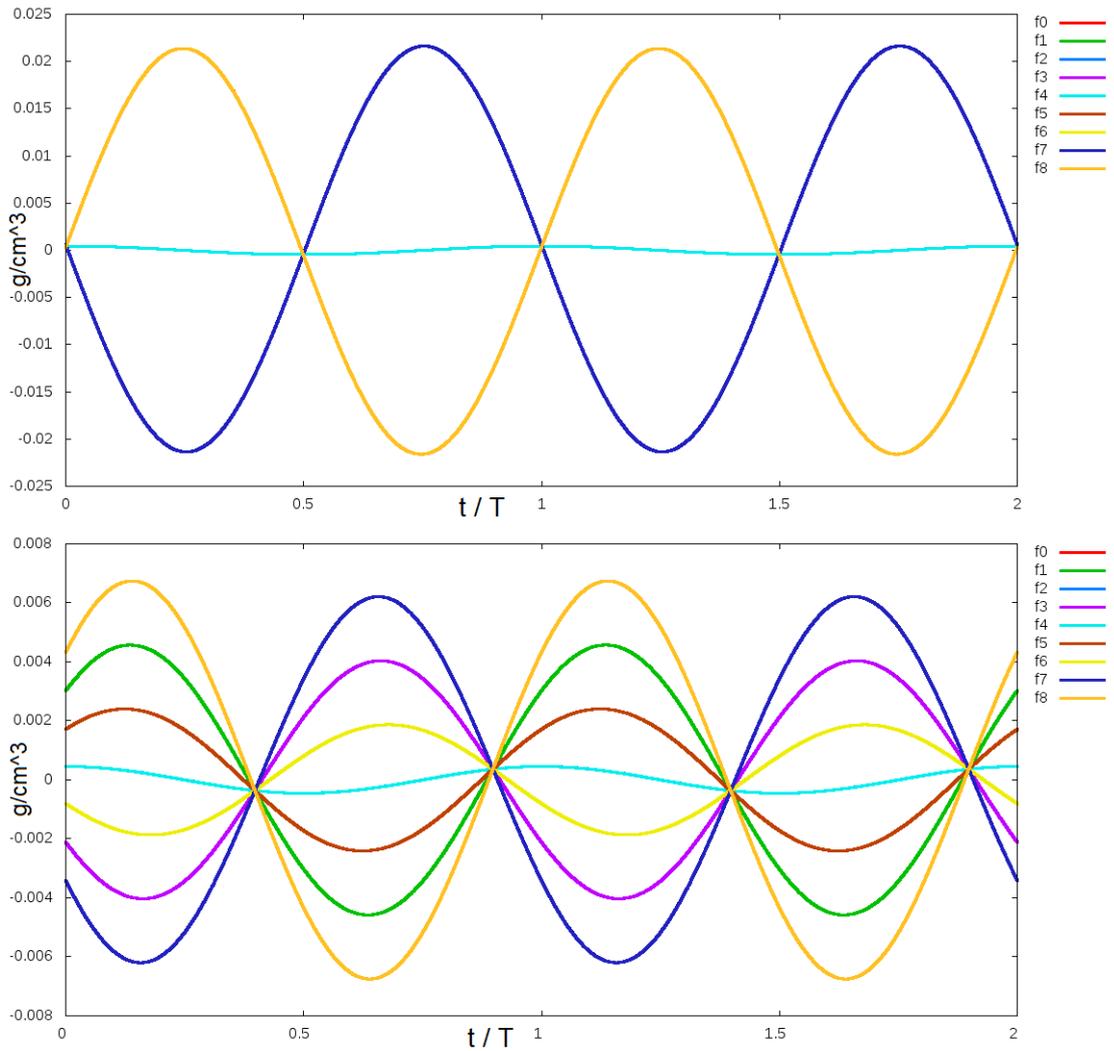


Figura 3.8: Variações das distribuições de partículas, em cada direção do *lattice* $D2Q9$, em torno da distribuição de equilíbrio (com $\mathbf{u} = 0$ e $\rho = \rho_0$) em uma célula no centro (figura superior) e em outra próxima da parede inferior (figura inferior) do canal, ao longo de dois ciclos do escoamento de Womersley.

pele número adimensional de Womersley. Através de simulações deste problema verificaremos como o número de passos realizados por período e comprimento do cilindro estão associados a erros de compressibilidade. Esta relação é de nosso interesse, pois visamos a modelagem de problemas em hemodinâmica, onde as relações de aspecto geométricas dos domínios são frequentemente grandes.

3.3.1 Cavidade cúbica

Este problema é descrito como o escoamento estacionário incompressível de um fluido em uma cavidade cúbica, composta de paredes impermeáveis e não

escorregadias. Tal parede se move com velocidade constante (denominada U_{max}) na direção \mathbf{x} , enquanto as demais paredes permanecem imóveis, conforme mostra a Figura 3.9.

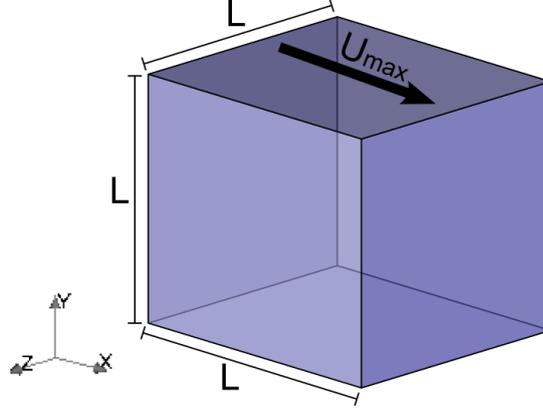


Figura 3.9: Figura ilustrativa do esquema para o escoamento na cavidade cúbica.

Analogamente ao caso 2D, o problema da cavidade cúbica fica caracterizado pelo número adimensional de Reynolds, o qual se mede neste caso como

$$Re = \frac{LU_{max}}{\nu}, \quad (3.14)$$

onde ν é a viscosidade cinemática do fluido.

Realizamos simulações numéricas deste problema para três diferentes números de Reynolds 100, 400 e 1000 nos *lattices* de dimensões $50 \times 50 \times 50$, $100 \times 100 \times 100$, $180 \times 180 \times 180$ e $200 \times 200 \times 200$ e implementamos as condições de contorno de velocidade descritas na Seção 2.5. As simulações foram feitas tomando-se o lado da cavidade e a velocidade máxima unitárias e adotamos a densidade média $\rho_0 = 1$. O critério de parada das simulações foi que a diferença relativa média dos campos de velocidade entre um instante e o passo seguinte fosse menor que 10^{-10} (segundo a norma dada pela expressão (3.5)).

Nas primeiras simulações realizadas mantivemos o número de Mach (descrito por U_{max}/c_s) igual a 0,17, lembrando que a velocidade do som é definida no modelo escolhido como $c_s = \Delta x/(\sqrt{3}\Delta t)$. Por não existir solução analítica para este problema, comparamos os resultados das simulações numéricas com referências

da literatura, onde os resultados foram obtidos através de um esquema numérico implícito [Yang et al. (1998)]. Na Figura 3.10 ilustramos, para os diferentes números de Reynolds, a componente da velocidade u_y ao longo da linha na direção \mathbf{x} que passa pelo centro geométrico da cavidade cúbica juntamente com a componente da velocidade u_x ao longo de uma linha na direção \mathbf{y} que passa pelo mesmo centro. Utilizamos as notações LB50, LB100, LB180 e LB200 para nos referenciarmos aos resultados das simulações com *lattices* de tamanho 50×50 , 100×100 , 180×180 e 200×200 , respectivamente. Nas mesmas figuras incluem-se os resultados obtidos por Yang et al. (1998), para efeito de comparação.

Como pode-se observar, para $Re = 100$ os resultados da solução via LBM já são bem próximos dos de Yang et al. (1998) para o *lattice* de tamanho $100 \times 100 \times 100$, enquanto que para os casos de $Re = 400$ e $Re = 1000$ podemos observar que as soluções via LBM se aproximam consistentemente das de Yang et al. (1998) à medida que aumentamos o tamanho do *lattice*, chegando a estar superpostas no caso do maior tamanho de *lattice* testado.

Após estes testes, realizamos simulações adicionais para explorar a influência da mudança do número de Mach nos resultados. Com isso, buscamos verificar se poderíamos obter melhores resultados ao reduzir o número de Mach juntamente com o passo temporal, sem ter que refinar o *lattice*. Para tanto, repetimos a simulação com $Re = 100$ e *lattice* de tamanho $100 \times 100 \times 100$, modificando o número de Mach para 0,0425 (quatro vezes menor que o anterior), com o intuito de verificar se a solução se aproximaria da obtida com *lattice* de tamanho $200 \times 200 \times 200$. Dos resultados obtidos, concluímos que a redução do número de Mach não gerou o resultado esperado, pois, ao compararmos os resultados das duas simulações (sem reduzir, e reduzindo o Mach) com a simulação com *lattice* mais refinado, encontramos diferenças relativas médias (calculadas através da equação (3.4)) entre os campos de velocidade de 2,57% e 2,55%, respectivamente, sendo que o custo da simulação aumentou quase 4 vezes no segundo caso.

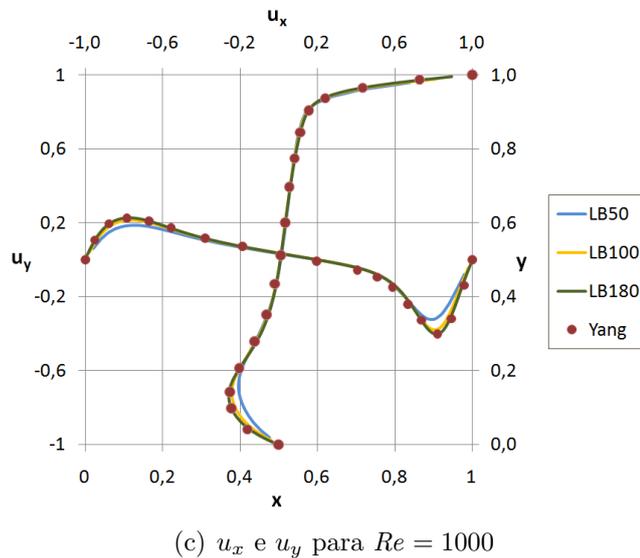
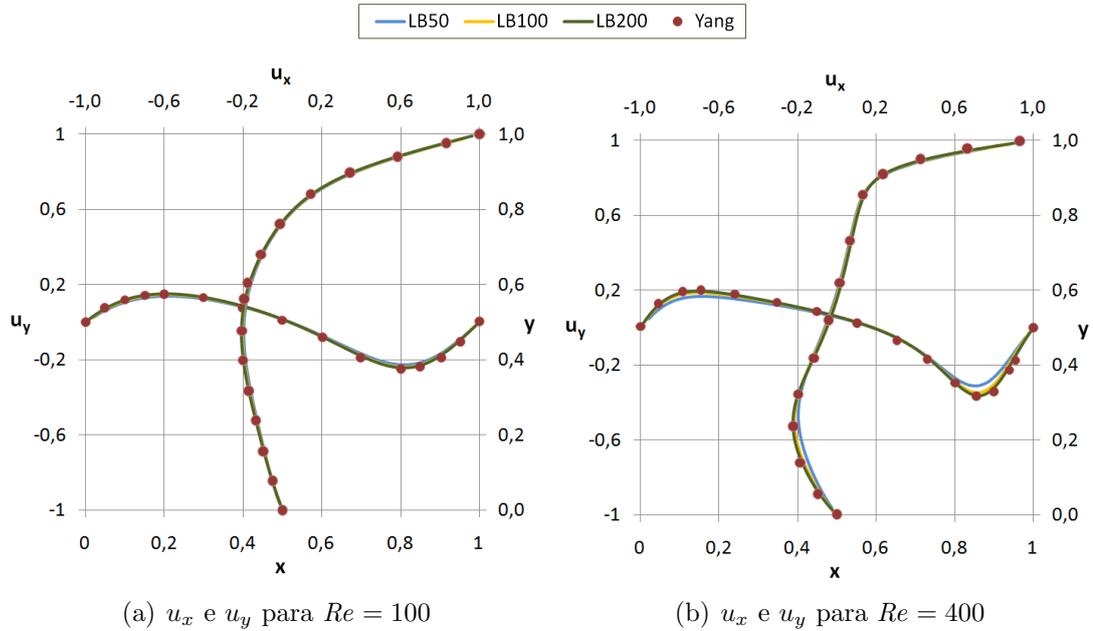


Figura 3.10: Componentes u_x e u_y da velocidade na cavidade cúbica ao longo de linhas nas direções y e x .

3.3.2 Escoamento de Womersley

Como no caso 2D, as particularidades do escoamento de Womersley fazem com que seja possível calcular a solução analítica do problema, mesmo em 3D, e assim efetuar comparações e análises dos esquemas numéricos aqui desenvolvidos. Neste caso, consideramos um fluido confinado em um canal cilíndrico. O caráter periódico do problema fica novamente em evidência a partir da imposição de uma pressão fixa em um extremo do canal e de uma pressão com variação harmônica

no outro extremo, segundo mostra a Figura 3.11.

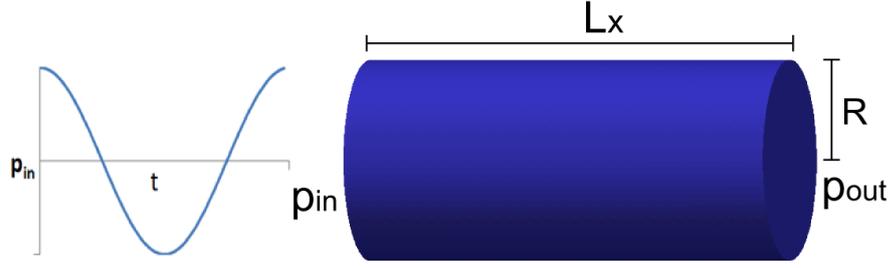


Figura 3.11: Figura ilustrativa do esquema para o escoamento de Womersley em 3D.

Para os casos estudados escolheu-se uma função cosseno para caracterizar o gradiente de pressão, ao qual está submetido o escoamento, descrita por:

$$\Delta p(t) = \frac{p_{out} - p_{in}(t)}{L_x} = -A \cos(\eta t) \quad (3.15)$$

onde $A = \max(\Delta p)$ é a amplitude do gradiente de pressão, $\eta = 2\pi/T$ é a frequência angular e T é o período de oscilação característico da condição de contorno.

Para estas condições de contorno, a solução analítica do escoamento de Womersley é dada aqui em coordenadas cilíndricas, sendo dependente somente da coordenada radial. Logo, tomando x como a coordenada axial do cilindro, a solução resulta em [Womersley (1955)]:

$$\begin{aligned} u_x(r, \theta, x, t) &= -\text{Real} \left\{ \frac{A}{\hat{i}\rho\eta} \left[1 - \frac{J_0(\kappa \frac{r}{R} \hat{i}^{\frac{3}{2}})}{J_0(\kappa \hat{i}^{\frac{3}{2}})} \right] e^{\hat{i}\eta t} \right\} \\ u_r(r, \theta, x, t) &= u_\theta(r, \theta, x, t) = 0 \\ p(r, \theta, x, t) &= p_{in}(t) + x\Delta p \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde ρ é a densidade, r é a coordenada radial, $\hat{i} = \sqrt{-1}$, $\text{Real}(\cdot)$ indica a componente real do argumento (\cdot) , $J_0(\cdot)$ é a função de Bessel de primeira espécie e ordem zero e λ é dado em função do número de Womersley (Wo), conforme:

$$Wo = \kappa = R\sqrt{\frac{\eta}{\nu}}. \quad (3.17)$$

Realizamos simulações deste problema para diferentes números de Womersley, mantivemos $Re = 1$ e o raio do canal $R = 0,5$. Devemos ressaltar que os cilindros utilizados nas simulações foram discretizados de acordo com o tamanho do *lattice* retangular no qual se encontra circunscrito o domínio cilíndrico. Consideramos as simulações convergidas quando a diferença relativa média (calculada através da equação (3.5)) entre a componente axial dos campos de velocidade nos instantes de tempo t e $t - T$ fosse menor que 10^{-5} .

Para obter o máximo de informações sobre o processo de ajuste dos parâmetros, construímos a Tabela 3.3 usando um caso teste com $Wo = 3,5$. Esta tabela apresenta o comportamento do erro relativo (segundo a norma (3.5)) do campo de velocidade com relação à solução (denotado por e_r). Além disso, a tabela apresenta o erro de compressibilidade (denotado por e_c), medido como a diferença relativa entre o fluxo na entrada e saída do tubo. Cada linha da tabela representa uma modificação no passo de tempo (onde $N_T = T/\Delta t$) e/ou no tamanho do *lattice*. Como esperado, em alguns casos a simples redução do passo temporal não é suficiente para reduzir o erro relativo, embora seja a forma de minimizar o erro de compressibilidade. Nestas situações um refinamento do *lattice* se torna necessário, a um custo computacional maior, o que implica também na redução do passo temporal para acomodar o valor do erro de compressibilidade. De forma complementar, simulamos os casos com $\tau < 0,575$, usando $Re = 300$, e os erros foram da mesma ordem, pois o número de Mach se manteve pequeno (menor que 0,2).

tamanho do <i>lattice</i>	N_T	custo	τ	e_r	e_c
$64 \times 32 \times 32$	1312	1	0,8	7,66%	16,7%
$64 \times 32 \times 32$	5248	4	0,575	2,68%	0,88%
$64 \times 32 \times 32$	10496	8	0,5375	2,85%	0,24%
$64 \times 32 \times 32$	20992	16	0,51875	instável	instável
$128 \times 64 \times 64$	5248	32	0,8	1,90%	3,64%
$128 \times 64 \times 64$	10496	64	0,65	0,89%	0,88%
$128 \times 64 \times 64$	20992	128	0,575	0,85%	0,22%

Tabela 3.3: Erro relativo com relação à solução analítica e erro de compressibilidade no escoamento com $Wo = 3,5$.

Aproveitamos este problema transiente tridimensional para analisar a sensibilidade do erro de compressibilidade com relação à relação de aspecto geométrica do tubo ($AR = \text{comprimento}/\text{diâmetro}$) e à quantidade θ_r , por ser um ponto crucial em simulações de escoamentos em estruturas tubulares como os vasos arteriais. Fizemos este estudo com $Wo = 3,5$ e relações de aspecto de $2/1$ a $16/1$. Começamos as simulações com 1312 passos temporais por ciclo e dobramos esta quantidade até que o erro de compressibilidade se tornasse próximo de 1%. Na Tabela 3.4, o erro de compressibilidade e a quantidade adimensional θ_r são mostrados para todos os casos. Onde o símbolo “*” indica uma simulação instável e “–” indica um caso não simulado. Podemos ver nesta tabela que existe uma relação linear inversa entre a quantidade θ_r e o erro de compressibilidade, como esperado. A conclusão mais importante aqui é o fato de que, para este problema, com $\theta_r \approx 50$ é possível garantir que o erro de compressibilidade seja da ordem de 1%. No entanto, para os exemplos da Seção 3.4, usaremos $\theta_r = 30$, com o qual se garantem erros de compressibilidade menores que 2%.

$N_T/1312$	1		2		4		8		16		32	
AR	e_c	θ_r										
1/1	2,91%	24	0,70%	48	–	–	–	–	–	–	–	–
2/1	16,7%	12	3,67%	24	0,88%	48	–	–	–	–	–	–
4/1	166%	6	18,5%	12	4,00%	24	0,97%	48	–	–	–	–
8/1	*	3	168%	6	19,1%	12	4,16%	24	1,00%	48	–	–
16/1	*	1,5	*	3	167%	6	19,4%	12	4,13%	24	1,06%	48

Tabela 3.4: Erros de compressibilidade e proporções entre o período e o tempo de propagação de uma onda sonora sobre o *lattice* ($\theta_r = T/(L/c_s)$) para diferentes comprimentos de canal.

Com o uso das técnicas apresentadas na Seção 3.1, foram realizadas simulações em um canal de comprimento $L_x = 2$, para $Wo = 3,5$ e $Wo = 20$, obtendo bons resultados nos *lattices* de tamanhos $64 \times 32 \times 32$ e $256 \times 128 \times 128$, respectivamente. Consideramos bons resultados aqueles que tenham alcançado erros relativos, ao comparar suas velocidades com as da solução analítica (segundo a equação (3.5)), menores que 0,05. O refinamento na malha foi necessário para capturar os altos gradientes de velocidade próximos à parede e para manter a

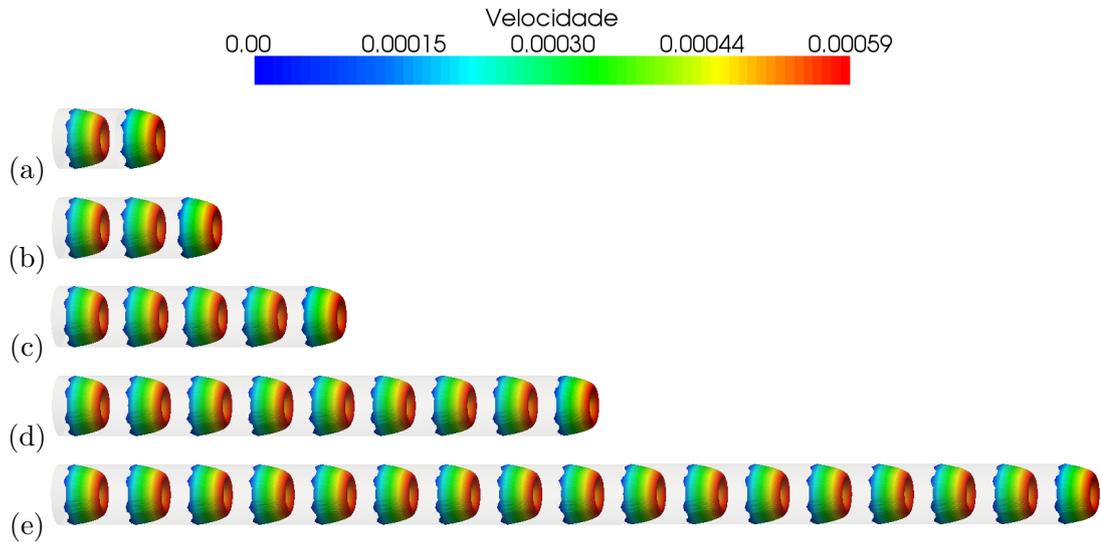


Figura 3.12: Perfis de velocidade em canais com relação de aspecto igual a: (a) 1×1 , (b) 2×1 , (c) 4×1 , (d) 8×1 e (e) 16×1 , para $Wo = 3, 5$.

estabilidade do método, pois o caso com $Wo = 20$ exigiu um passo de tempo bastante menor (que implica τ menor, ver Tabela 3.1). Na Figura 3.13, mostramos para 8 instantes ao longo do período, gráficos comparativos da velocidade axial (u_x), entre a solução exata e o resultado numérico. Esta comparação é feita ao longo de uma linha transversal que cruza o meio do canal.

3.4 Modelagem do escoamento sanguíneo

Nesta seção modelamos problemas que utilizam dados (geometria, condições de contorno, parâmetros adimensionais) semelhantes aos encontrados na hemodinâmica do SCVH. O sangue é modelado como fluido Newtoniano com viscosidade cinemática de $0,035 \text{ cm}^2/\text{s}$ e densidade de $1,05 \text{ g/cm}^3$ (conforme adotado em outros trabalhos [Hirabayashi et al. (2006), He et al. (2009a)]), esta aproximação é geralmente considerada válida para a hemodinâmica em artérias com diâmetro maior que $0,1 \text{ cm}$ [Cho e Kensey (1989)]. Mais especificamente, mostraremos a modelagem do escoamento sanguíneo estacionário em um vaso com anastomose (Seção 3.4.1), o escoamento transiente com curva de pressão fisiológica em um segmento da artéria vertebral (Seção 3.4.2) e um estudo da vorticidade presente na região de um aneurisma em função de parâmetros adimensionais (Seção 3.4.3). Estes resultados foram reportados em Golbert et al. (2012).

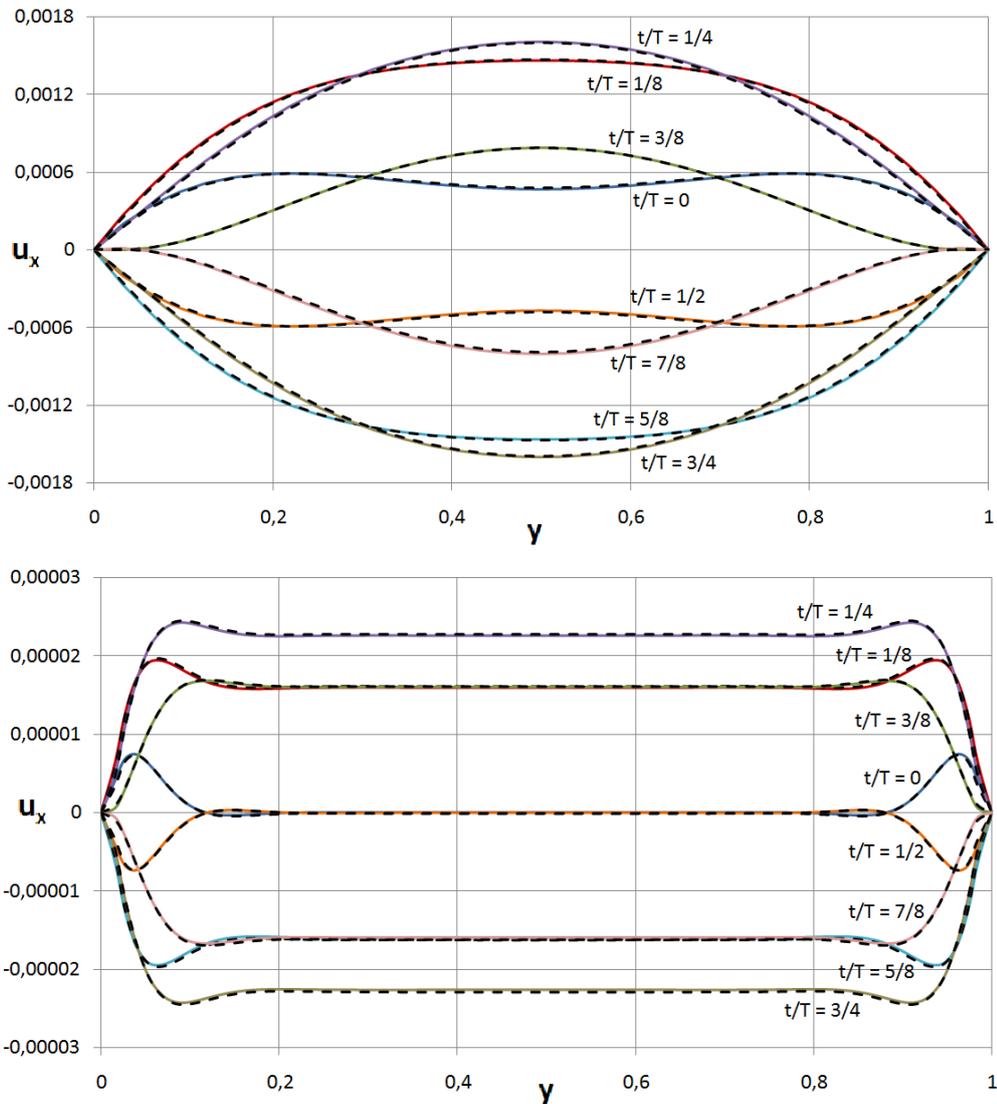


Figura 3.13: Componente u_x sobre uma linha transversal para $Wo = 3,5$ (acima) e $Wo = 20$ (abaixo) das soluções numérica (linhas coloridas) e analítica (linhas pontilhadas).

3.4.1 Vaso arterial com anastomose

O objetivo deste exemplo é simular a hemodinâmica em um vaso arterial com anastomose¹ e compará-lo com dois experimentos *in vitro* propostos por Hughes e How (1995). Este é um caso de grande interesse na comunidade médica pelo impacto do procedimento seguido para fazer a anastomose (ângulo de conexão, entre outros fatores) na hemodinâmica e na posterior re-vascularização resultante do procedimento. A Figura 3.14 mostra em azul a geometria proposta por Hughes

¹ Anastomose é o nome que se dá a uma operação cirúrgica que promove a união de dois vasos sanguíneos.

e How (1995), e em verde o vaso de saída incluído no presente estudo para impor a condição de contorno de pressão na saída (p_{out}) sobre um plano ortogonal a um eixo Cartesiano (como exigido pelo método de imposição de pressão [Zou e He (1997)]). Neste caso, estamos interessados em estudar o escoamento estacionário quando um perfil de velocidade parabólico é imposto na entrada do canal (u_0 no centro).

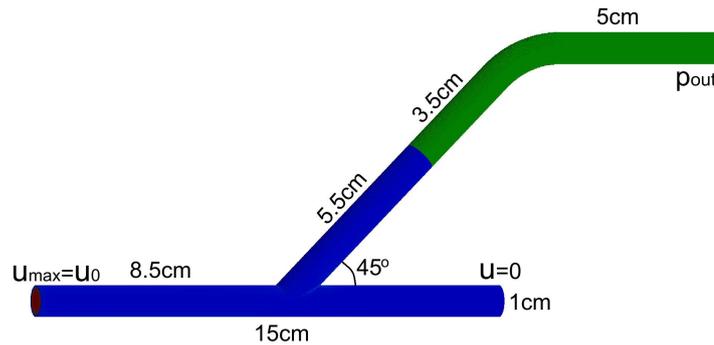


Figura 3.14: Descrição da geometria do vaso arterial com anastomose.

A Figura 3.15 mostra os perfis de velocidade ao longo do tubo para os números de Reynolds 299 e 564. Perceba que o perfil parabólico de velocidade é recuperado antes da curva adicionada, em concordância com o problema proposto por Hughes e How (1995). Como forma de validação dos resultados, a Figura 3.16 compara as linhas de corrente numéricas e experimentais sobre a seção longitudinal central. Pode-se perceber que os resultados estão qualitativamente próximos, visto que as principais estruturas dos vórtices observadas nos experimentos são previstas pela simulação numérica. Mais especificamente, notamos que não somente os dois vórtices são reproduzidos, mas, assim como nos experimentos, eles expandem e se movem para a direita quando o número de Reynolds aumenta. Além disso, o segmento superior da simulação produz os mesmos padrões de linhas de corrente que os experimentos para os dois números de Reynolds testados. As simulações com $Re = 299$ e $Re = 564$ foram respectivamente feitas usando-se malhas com 50 e 60 células ao longo do diâmetro arterial, tais que se obteve $\tau = 0,53$ e $\tau = 0,5255$, o que resultou em Mach menor que 0,14 para ambos casos. É importante ressaltar que, como nos casos anteriores, as estratégias expostas na Seção 3.1 foram usadas

para calibrar os parâmetros.

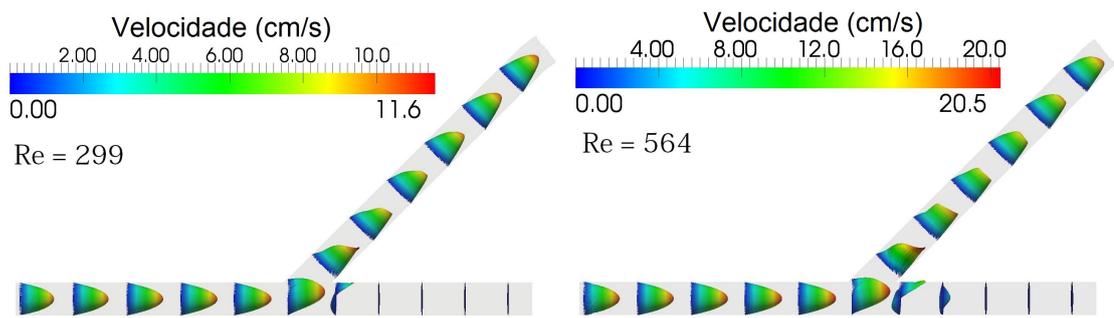


Figura 3.15: Perfis de velocidade das simulações em vasos com anastomose, via LBM, com $Re = 299$ (esquerda) e $Re = 564$ (direita).

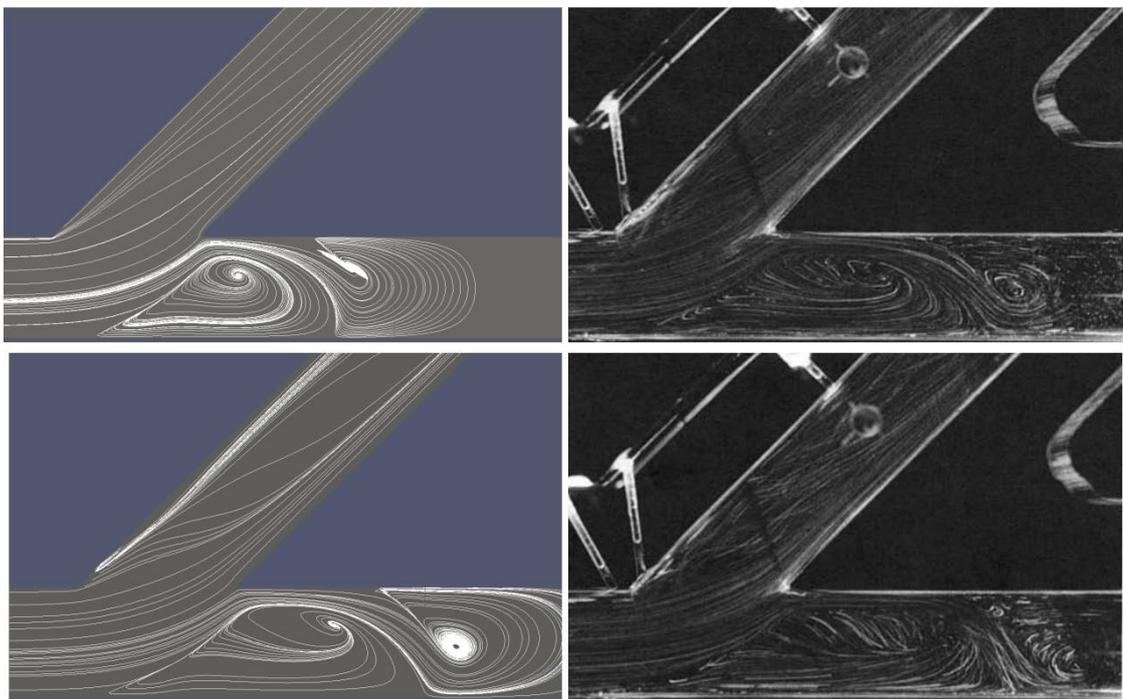


Figura 3.16: Linhas de corrente do campo de velocidade no vaso com anastomose para $Re = 299$ (superior) e $Re = 564$ (inferior). Os resultados correspondem à simulação via LBM (esquerda) e aos experimentos físicos (direita), extraídos de Hughes e How (1995).

3.4.2 Escoamento sanguíneo na artéria vertebral

Este caso representa uma simulação do escoamento sanguíneo em um segmento da artéria vertebral esquerda de um paciente específico. A geometria foi extraída, utilizando o software HeMoLab (<http://hemolab.lncc.br>), de um conjunto de dados tridimensional que tem como fonte uma imagem DICOM. As

condições de contorno na entrada e saída do vaso são valores de pressão próximos de uma condição fisiológica, obtidos dos resultados numéricos de uma simulação da rede arterial do SCVH de forma unidimensional [Blanco et al. (2007)]. A solução provida pela implementação de LBM é comparada com a obtida usando uma implementação do método de elementos finitos (FEM) (método desenvolvido no grupo com discretização no tempo por diferenças finitas de segunda ordem e elementos tetraédricos lineares com enriquecimento por bolha no campo de velocidade [Urquiza et al. (2006)]).

A Figura 3.17 mostra a geometria do segmento arterial, as condições de contorno de pressão nas extremidades proximal e distal e o fluxo sanguíneo do segundo ciclo cardíaco obtido das simulações por LBM e FEM. Para minimizar as variações de densidade (lembre que esta é proporcional à pressão $p = \rho c_s^2$) impomos somente o gradiente de pressão, ao invés dos valores absolutos de pressão, já que este é responsável por mover o fluido em tubos rígidos. O tema da imposição da pressão absoluta será tratado no Capítulo 4 ao lidarmos com o problema de interação fluido estrutura, no qual a pressão hidrostática tem um papel importante na física do problema.

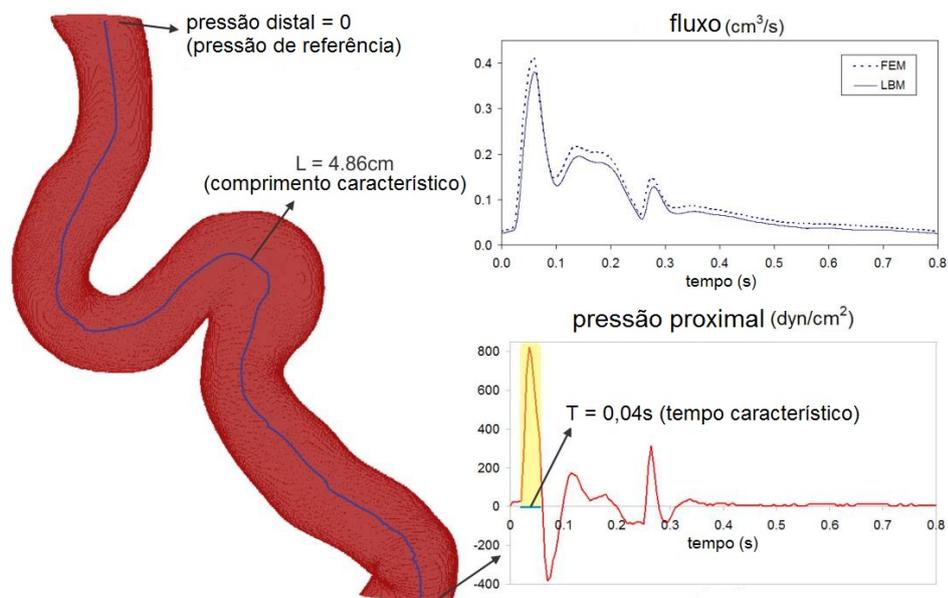


Figura 3.17: Ilustração do segmento de artéria vertebral e descrição das condições de contorno de pressão. Na figura superior direita no topo, também apresentamos os fluxos obtidos das simulações via LBM e FEM.

O desafio neste problema foi lidar com a geometria complexa e com o comportamento altamente pulsátil do gradiente de pressão. Como dito anteriormente, o LBM é um método explícito, então o passo temporal tem que ser pequeno o suficiente para que as mudanças de pressão em uma extremidade sejam propagadas por todo domínio de forma suficientemente rápida para minimizar efeitos de compressibilidade. Em outras palavras, precisamos calcular o parâmetro denominado θ_r , não baseado no período da simulação, como feito nos exemplos da Seção 3.3, mas baseado no tempo característico em que o gradiente de pressão sofre uma grande mudança. Pode-se observar na Figura 3.17 que uma grande variação do gradiente de pressão ocorre em aproximadamente 0,04 segundos (20 vezes menor que o período cardíaco), portanto este será considerado o tempo característico do problema. Foi empregado o valor $\theta_r = 30$ em uma malha refinada com aproximadamente 80 células ao longo do diâmetro da artéria (cerca de 8 milhões de células no total), e isto resultou em 1,1 milhões de passos temporais por período e um erro de compressibilidade resultante menor que 1%. Para este caso particular, foi empregado $\tau = 0,5037$ (menor que o valor mínimo indicado na Seção 3.1 de 0,52).

É importante ressaltar que a geometria usada na simulação por LBM representa uma parte menor do segmento da artéria vertebral usado na simulação por FEM. Devido a isto, impusemos a pressão média obtida da simulação por FEM sobre duas seções (proximal e distal) do segmento na implementação por LBM. Este procedimento foi necessário por dois motivos: (i) para reduzir o tempo computacional (por simular o escoamento em um domínio menor) e (ii) para termos contornos de entrada e saída alinhados com os eixos cartesianos, evitando a imposição de condições de contorno de pressão sobre planos transversais arbitrariamente orientados. O fato de os problemas simulados por FEM e LBM não serem idênticos é a principal razão para as diferenças observadas nos fluxos sanguíneos apresentados na Figura 3.17. Todavia, podemos perceber que o resultado obtido pelo LBM segue consistentemente ao longo de todo ciclo

o resultado obtido pelo FEM. Neste problema, devido à alta pulsatilidade da condição de contorno, o LBM apresenta a desvantagem de exigir um passo temporal muito pequeno e, como consequência, uma malha 5 vezes mais refinada que a requerida pelo FEM. Por outro lado, os resultados obtidos via LBM são muito mais detalhados nos domínios espacial e temporal. O tempo de parede para executar dois ciclos cardíacos, com a implementação do LBM em paralelização de memória compartilhada (OpenMP) e com 8 MLUPS (milhões de unidades de *lattice* atualizadas por segundo) na máquina Altix-XE 340 com dois processadores Intel Xeon E5520 2.27GHz Quad Core e 24GB de memória RAM, foi de 27,2 dias. A simulação por FEM foi feita em outra arquitetura e com um esquema de paralelização de memória distribuída. Na Seção 3.6.3, fazemos de forma sistemática um teste de comparação de desempenho entre as implementações do LBM e do FEM.

A Figura 3.18 apresenta uma comparação detalhada entre os resultados obtidos por LBM e FEM. Os perfis de velocidade sobre quatro linhas distribuídas ao longo da artéria são comparados em três instantes diferentes do período cardíaco (destacados na figura inferior central). Isto mostra a boa concordância dos perfis de velocidade das soluções obtidas pelos dois métodos. As diferenças observadas são consistentes com as diferenças vistas no fluxo sanguíneo exposto na Figura 3.17.

Também comparamos na Figura 3.19 alguns perfis de velocidades sobre planos transversais obtidos por LBM e FEM. Estes perfis mostram a excelente proximidade dos resultados inclusive em situações onde a complexidade do escoamento se manifesta nas três dimensões espaciais e ao longo do tempo.

Por fim, comparamos na Figura 3.20 a magnitude das tensões cisalhantes no instante de máximo fluxo, obtidas por LBM e FEM, sobre a parede da artéria vertebral. Esta medida hemodinâmica é considerada importante na análise de certas doenças do SCVH [Giannoglou et al. (2002), Coskun et al. (2006), Morbiducci et al. (2007)]. Aqui, notamos a consistência entre os dois resultados, destacando com mesma magnitude as regiões de alta e baixa tensão cisalhante.

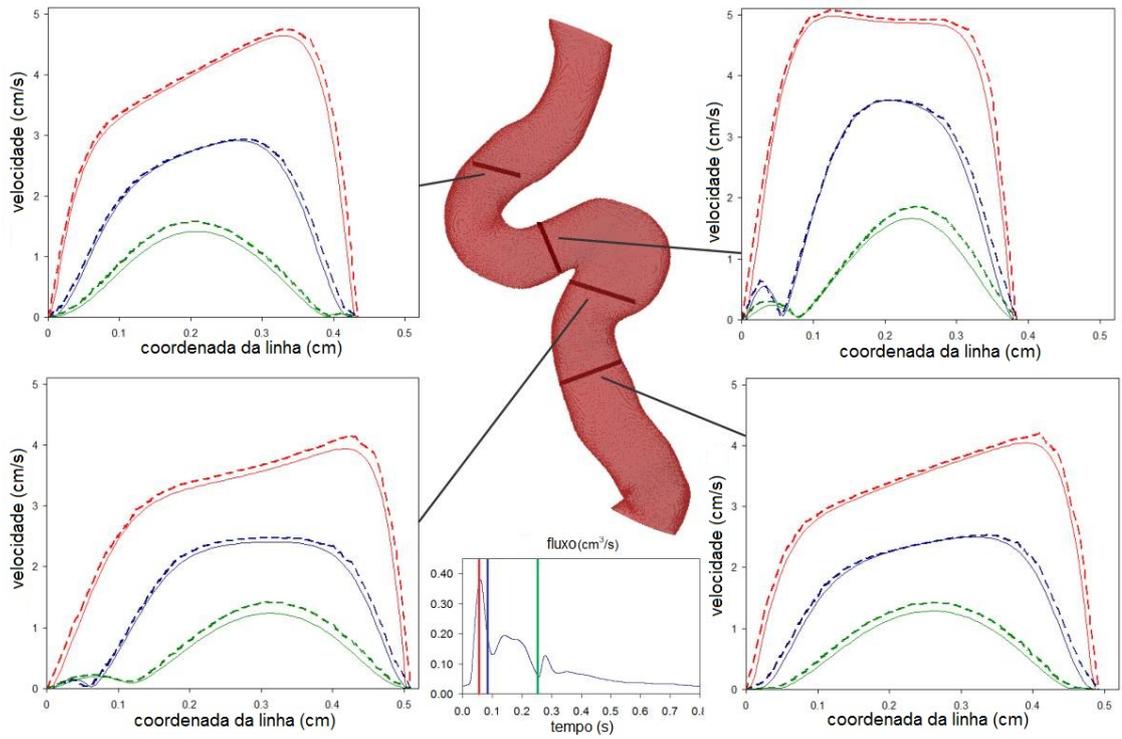


Figura 3.18: Perfis de velocidade obtidos por LBM (linhas cheias) e FEM (linhas pontilhadas) sobre quatro linhas distribuídas ao longo da artéria e em três instantes diferentes do período cardíaco (indicado por cores).

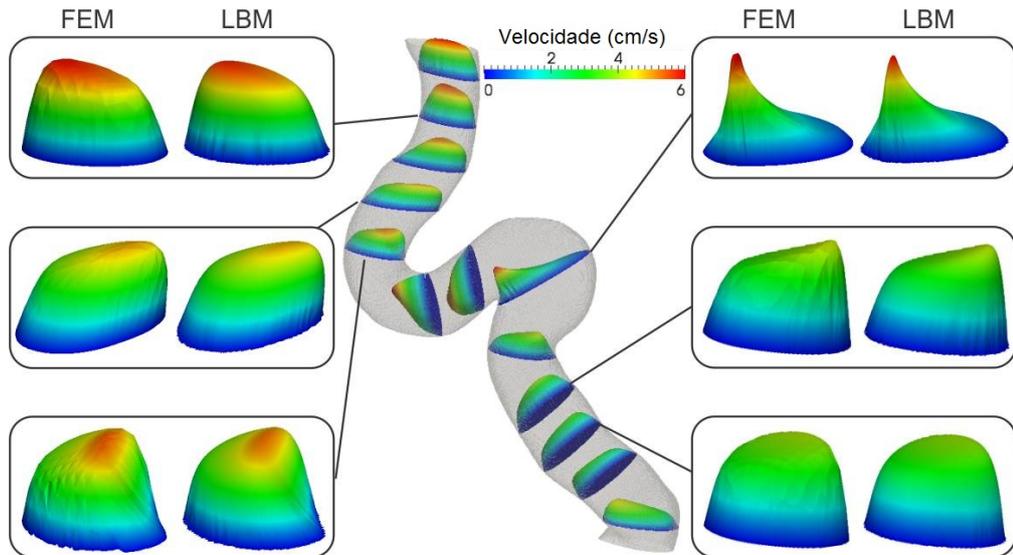


Figura 3.19: Perfis de velocidade tridimensionais ao longo da artéria no instante de fluxo máximo. Nos detalhes estão comparados alguns perfis de velocidade obtidos pela simulação via FEM (esquerda) e via LBM (direita).

Observe que as diferenças presentes na parte inferior do segmento se devem ao corte feito na geometria para a simulação via LBM. Em ambos casos, a magnitude da tensão cisalhante foi estimada de forma numérica a partir dos campos de pressão

e velocidade, da forma:

$$\tau_w = |\sigma \mathbf{n}| = |[-p\mathbf{I} + 2\mu \nabla^s \mathbf{u}] \mathbf{n}|, \quad (3.18)$$

onde σ é o tensor de tensão para fluidos, ∇^s é o gradiente simétrico e \mathbf{n} é o vetor normal exterior à parede. No caso do LBM, foi realizado um processo de suavização da parede para estimar melhor os vetores normais. Mesmo assim, observamos oscilações provenientes da estimativa dos vetores normais.

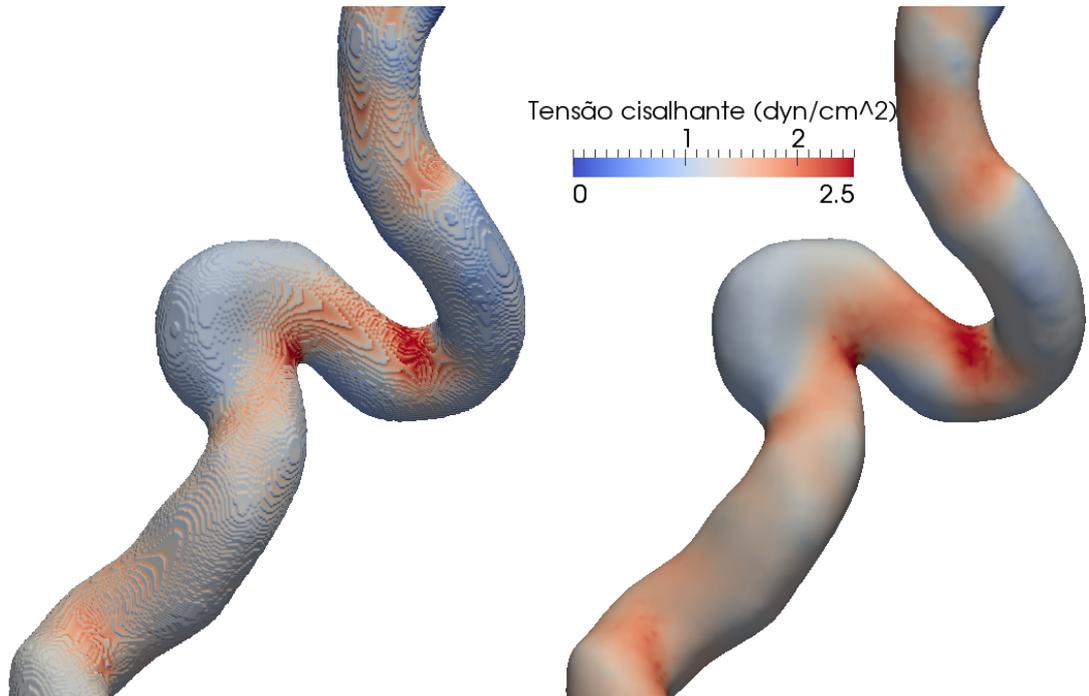


Figura 3.20: Magnitude das tensões cisalhantes sobre a parede da artéria vertebral obtidas pela simulação via LBM (esquerda) e via FEM (direita), no instante de máximo fluxo.

De forma complementar, mostramos na Figura 3.21 a componente viscosa da tensão cisalhante (obtida ao eliminar o termo da pressão na equação (3.18)). Aqui, observamos novamente a acordância dos resultados.

3.4.3 Estudo da hemodinâmica em geometria tipo aneurisma

Entender a hemodinâmica em regiões do SCVH com aneurismas saculares² é muito importante para analisar a influência das variáveis fluido dinâmicas

² Aneurismas saculares são alterações patológicas que dilatam a parede arterial em um formato aproximadamente esférico, sendo comumente encontrados na anatomia da vasculatura cerebral.

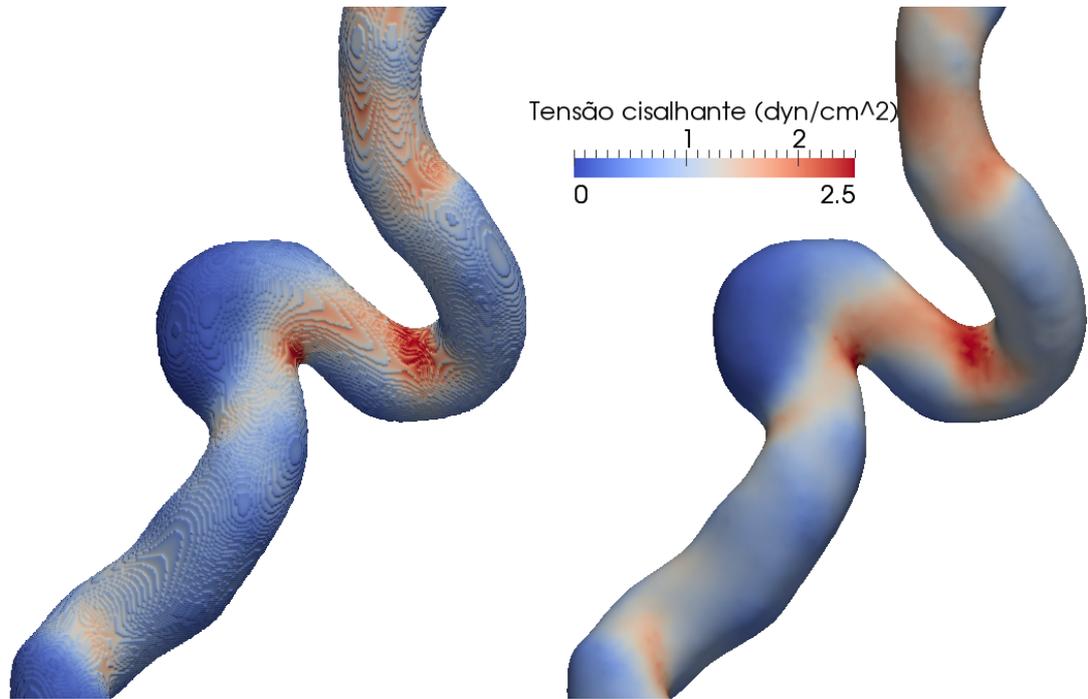


Figura 3.21: Magnitude das componentes viscosas da tensão cisalhante sobre a parede da artéria vertebral obtidas pela simulação via LBM (esquerda) e via FEM (direita), no instante de máximo fluxo.

na patologia, como formação de trombos e dano no endotélio, produzido por tensões cisalhantes. Com esta motivação em mente, o objetivo deste exemplo é caracterizar quantidades hemodinâmicas de interesse em uma região com uma alteração geométrica representando um aneurisma. O objetivo é realizar uma análise de sensibilidade dentro de uma faixa do regime fisiológico dos dois principais parâmetros adimensionais que governam o escoamento sanguíneo pulsátil, que são o número de Womersley e o número de Reynolds. A Figura 3.22 mostra um diagrama do caso de estudo, que consiste em um volume esférico emulando um aneurisma sacular conectado a uma artéria cilíndrica com relação de aspecto geométrica 10/1. O escoamento é comandado por uma queda de pressão pulsátil entre a entrada e saída do canal, dada por:

$$p_{in}(t) = p_{out} + C(\cos(\eta t) + 1), \quad (3.19)$$

onde as constante C e η devem ser escolhidas de forma que os números de Womersley e Reynolds desejados caracterizem o problema.

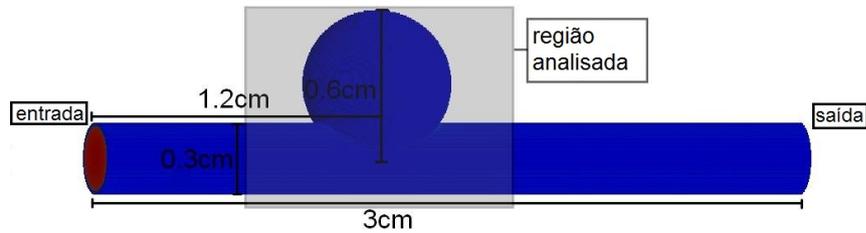


Figura 3.22: Ilustração da geometria representando um vaso cilíndrico com um aneurisma sacular esférico.

A Figura 3.23 mostra, para uma simulação com $Re = 400$ e $Wo = 4,5$, as iso-superfícies da magnitude da velocidade (figuras da esquerda) e os detalhes do escoamento sanguíneo secundário (figuras da direita). As imagens foram tomadas nos instantes em que o fluido atinge as velocidades mínima (figuras superiores) e máxima (figuras inferiores).

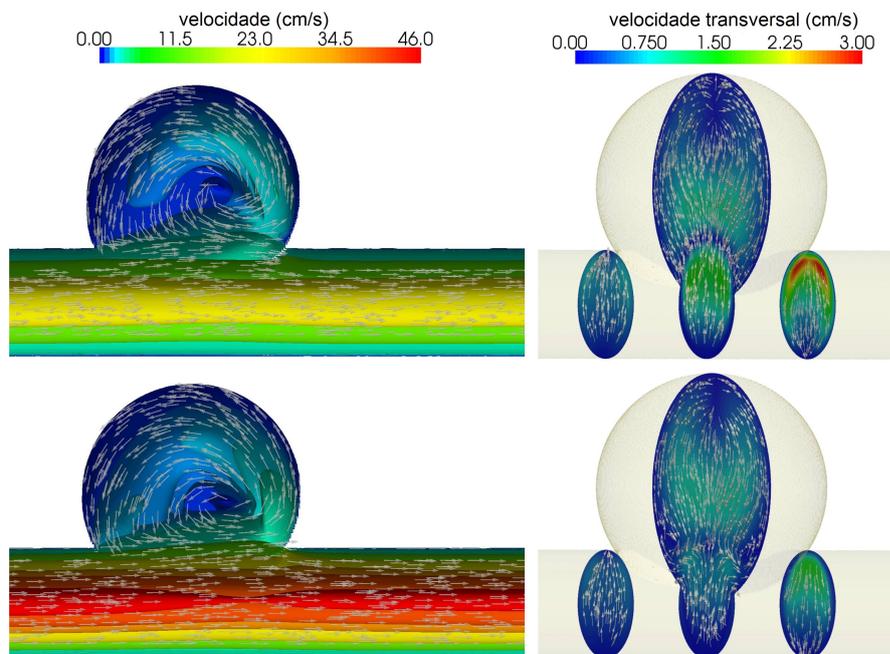


Figura 3.23: Isosuperfícies de velocidade (esquerda) e uma representação do escoamento secundário sobre cortes transversais (direita) na região do aneurisma de uma simulação com $Re = 400$ e $Wo = 4,5$, quando o fluido atinge as velocidades máxima (inferior) e mínima (superior).

De um conjunto de 36 simulações com números de Reynolds fisiológicos de 50, 100, 200 e 400 e números de Womersley variando de 1 a 5 (com incremento de 0,5), a média da principal componente do vetor vorticidade em torno do volume contendo o aneurisma (veja Figura 3.22) foi estudado. Escolhemos estudar o comportamento da vorticidade por estar associada com a intensidade de vórtice e,

juntamente com sua oscilação, este fator pode apresentar um papel importante no risco de ruptura de aneurismas [Hoi et al. (2004) e Kim et al. (2007)]. Entretanto, note que a análise aqui proposta é meramente demonstrativa. Outras análises de quantidades derivadas do escoamento podem ser igualmente realizadas. A Figura 3.24 mostra as oscilações estacionárias induzidas na vorticidade do aneurisma pela oscilação de pressão imposta. A coluna da esquerda mostra a média (sobre a região espacial analisada) da principal componente da vorticidade ao longo um ciclo, que caracteriza o comportamento desta quantidade para cada número de Reynolds como uma função do número de Womersley. Note que, para cada número de Reynolds, a componente da vorticidade atinge o valor máximo das curvas apresentadas com um número diferente de Womersley. Este comportamento pode ser visto nas figuras complementares apresentadas na coluna da direita da Figura 3.24, onde os mesmos resultados são mostrados em mapas de contorno da principal componente da vorticidade. Para estas simulações, os parâmetros adotados foram $\theta_r = 30$, e 60 células ao longo do diâmetro do canal, que levaram a erros de compressibilidade menores do que 1% em todos os casos (medidos como diferença de fluxo entre entrada e saída).

A parte esquerda da Figura 3.25 destaca os picos superior e inferior da vorticidade como função do quadrado do número de Womersley, que representa essencialmente a frequência adimensional. Podemos observar que a dependência é bastante complexa. Para $Re = 50$, a vorticidade positiva máxima no aneurisma apresenta um pico com $Wo = 1,5$, que se desloca para Wo mais altos quando Re aumenta. Além disso, um segundo pico de baixa frequência aparece com Re altos, o que reflete a presença de várias harmônicas, que podem ser atribuídas à complexidade da geometria e à não linearidade das equações que governam o escoamento. A frequência do principal pico é mostrada na parte direita da Figura 3.25 como função do número de Reynolds, mostrando uma tendência de $\approx Re^{0,86}$. Valores positivos e negativos da principal componente da vorticidade correspondem a rotações nos sentidos anti-horário e horário, respectivamente. Para

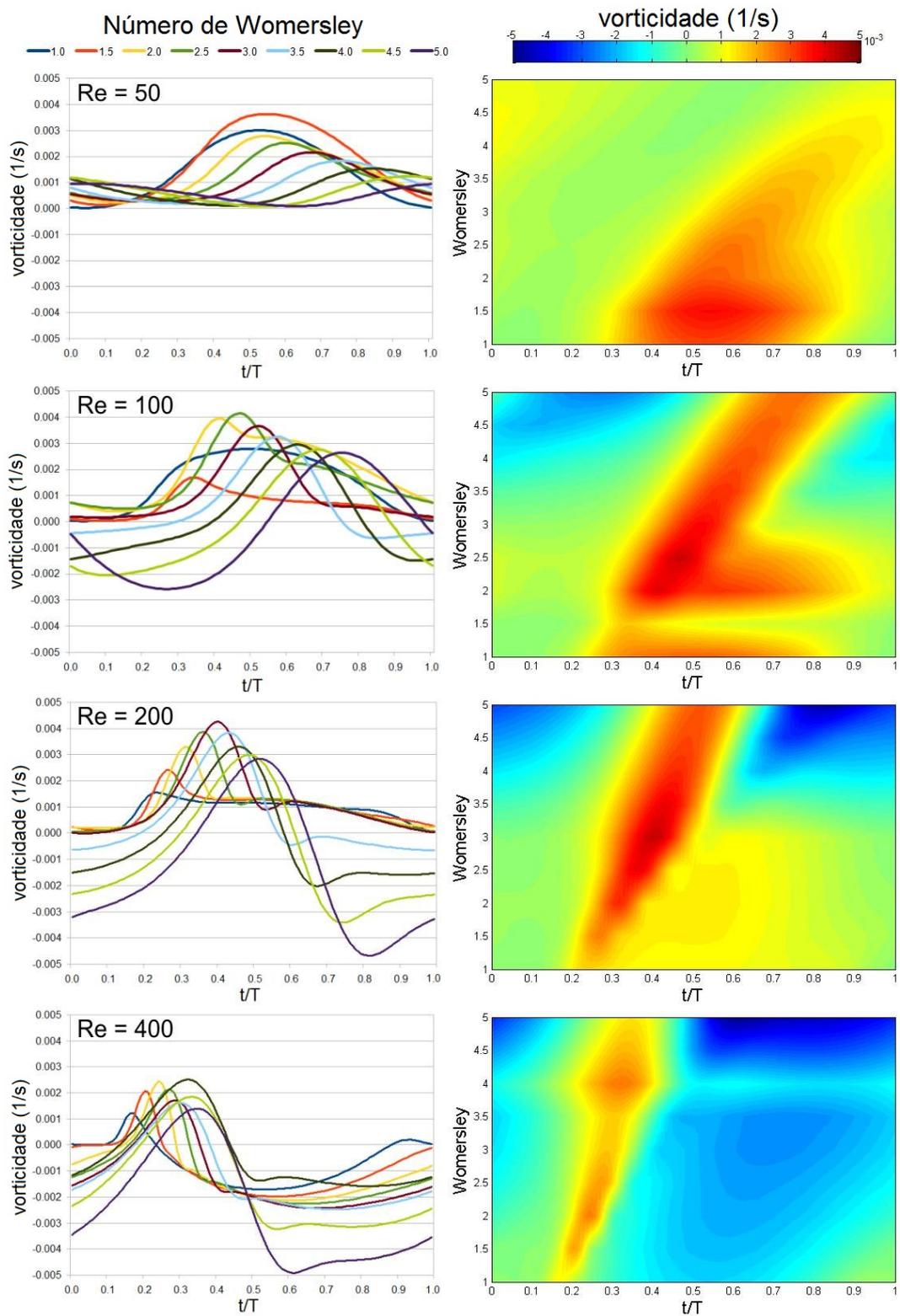


Figura 3.24: Principal componente da vorticidade média em torno do aneurisma, apresentada durante um período, com números de Reynolds 50, 100, 200 e 400, respectivamente.

$Re > 50$, vorticidades negativas são produzidas no aneurisma, com amplitudes que aumentam com a frequência. Interessantemente, a intensidade das vorticidades negativas pode ser maior que a vorticidade positiva. Em particular, para $Re = 200$, em altas frequências ($Wo^2 > 20$), o aneurisma experimenta fortes picos reversos de vorticidade. Este efeito poderia ser responsável por desencadear o desprendimento de materiais acumulados na parede do aneurisma.

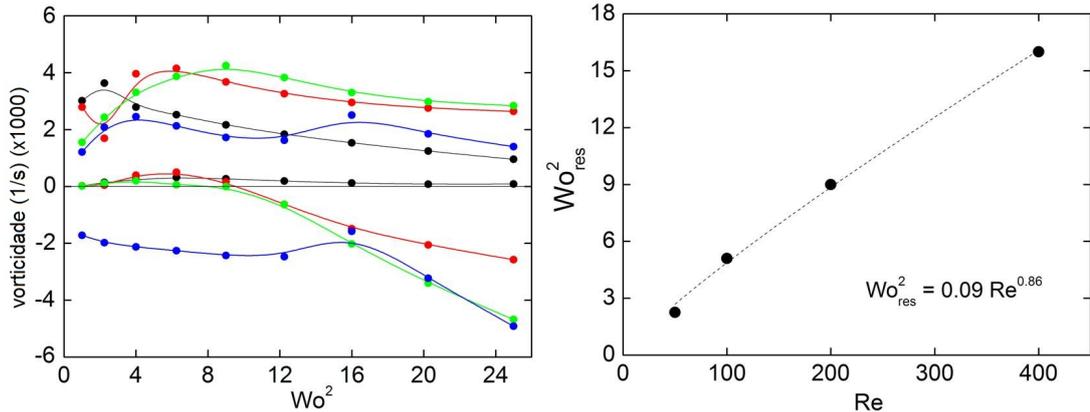


Figura 3.25: A figura da esquerda mostra os limites superior e inferior da componente principal da vorticidade média no aneurisma induzidos por oscilações de pressão. As cores indicam o número de Reynolds: 50 (preto), 100 (vermelho), 200 (verde), 400 (azul). A figura da direita mostra a dependência da principal frequência de ressonância sobre o número de Reynolds.

3.5 Análise de estabilidade e modelos de distribuição de equilíbrio

A estabilidade é um fator crucial na modelagem de escoamentos através de métodos explícitos como o LBM. Como vimos na Seção 3.1, existem técnicas de ajuste de parâmetros numéricos que permitem a modelagem de problemas complexos de forma estável, porém esta estabilidade pode ter um alto custo computacional (ver Seção 3.4.2). Uma forma de reduzir o custo de simulações complexas vem com o aumento da estabilidade do LBM. Por isso, apresentamos nesta seção uma análise de estabilidade linearizada de von Neumann da equação de *lattice* Boltzmann (Seção 3.5.2), para um modelo mais geral da distribuição de equilíbrio (ver Seção 3.5.1). Com os resultados desta análise, pudemos propor uma distribuição de equilíbrio que apresentou melhor estabilidade na modelagem

do escoamento de Poiseuille (Seção 3.5.3), e cuja aplicação na modelagem de escoamentos mais complexos fica como trabalho futuro.

3.5.1 Uma distribuição de equilíbrio mais geral

O modelo de distribuição de equilíbrio a ser utilizado na análise de estabilidade desta seção é baseado no modelo proposto por Yeomans (2006), com a inclusão de um termo de densidade constante (ρ_0), e tem a forma:

$$f_i^{\text{eq}} = \rho A_\sigma + \rho_0 \left[B_\sigma \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})}{v^2} + D_\sigma \frac{(v \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{v^4} + C_\sigma \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})}{v^2} \right],$$

$$\sigma = 0, 1, 2, \quad i = 1, \dots, \ell. \quad (3.20)$$

onde os subíndices $\sigma = 0$, $\sigma = 1$ $\sigma = 2$ se referem às partículas paradas e às que se movem nas direções cartesianas e diagonais, respectivamente (para *lattices* com mais direções, como o *D3Q27*, também teríamos que usar $\sigma = 3$). Repare que B_0 e D_0 podem ser desconsiderados por multiplicarem termos nulos. Os coeficientes A_σ , B_σ , C_σ e D_σ são dependentes do modelo de *lattice* e devem obedecer ao seguinte conjunto de equações (apresentado na Seção 2.4 do capítulo anterior e repetido aqui por conveniência):

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho, \\ \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i v = \rho_0 \mathbf{u}, \\ \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^2 = p \mathbf{I} + \rho_0 \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} = \rho_0 c_s^2 \mathbf{I} + \rho_0 \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}, \\ \left[\sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i v^3 \right]_{\alpha\beta\gamma} = \rho_0 c_s^2 (\delta_{\alpha\beta} u_\gamma + \delta_{\gamma\alpha} u_\beta + \delta_{\beta\gamma} u_\alpha). \end{array} \right. \quad (3.21)$$

Vamos determinar as relações entre os coeficientes A_σ , B_σ , C_σ e D_σ da distribuição de equilíbrio (3.20) substituindo-a no sistema (3.21) para os seguintes modelos de *lattice*:

lattice D2Q9. Para este modelo temos as seguintes equações para cada momento:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Momento de ordem 0:} \\
 A_0 + 4A_1 + 4A_2 = 1, \\
 C_0 + 4C_1 + 4C_2 + 2D_1 + 4D_2 = 0. \\
 \text{Momento de ordem 1:} \\
 2B_1 + 4B_2 = 1. \\
 \text{Momento de ordem 2:} \\
 2A_1 + 4A_2 = \frac{1}{3}, \\
 2C_1 + 4C_2 + 4D_2 = 0, \\
 2C_1 + 4C_2 + 2D_1 + 4D_2 = 1, \\
 8D_2 = 1. \\
 \text{Momento de ordem 3:} \\
 B_2 = \frac{1}{12}, \\
 2B_1 + 4B_2 = 1.
 \end{array} \right. \quad (3.22)$$

Das equações acima (3.22) chegamos às relações:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 A_1 = \frac{1}{6} - 2A_2, \\
 A_0 = \frac{1}{3} + 8A_2, \\
 B_2 = \frac{1}{12}, \\
 B_1 = \frac{1}{3}, \\
 D_1 = \frac{1}{2}, \\
 D_2 = \frac{1}{8}, \\
 C_1 = -2C_2 - \frac{1}{4}, \\
 C_0 = -\frac{1}{2} + 4C_2,
 \end{array} \right. \quad (3.23)$$

onde temos dois graus de liberdade: A_2 e C_2 .

lattice D3Q19. Para este modelo temos as seguintes equações para cada momento:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Momento de ordem 0:} \\
 A_0 + 6A_1 + 12A_2 = 1, \\
 C_0 + 6C_1 + 12C_2 + 2D_1 + 8D_2 = 0. \\
 \\
 \text{Momento de ordem 1:} \\
 2B_1 + 8B_2 = 1. \\
 \\
 \text{Momento de ordem 2:} \\
 2A_1 + 8A_2 = \frac{1}{3}, \\
 2C_1 + 8C_2 + 4D_2 = 0, \\
 2C_1 + 8C_2 + 2D_1 + 8D_2 = 1, \\
 8D_2 = 1. \\
 \\
 \text{Momento de ordem 3:} \\
 B_2 = \frac{1}{12}, \\
 2B_1 + 4B_2 = 1.
 \end{array} \right. \quad (3.24)$$

Das equações acima (3.24) chegamos às relações:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 A_1 = \frac{1}{6} - 4A_2, \\
 A_0 = 12A_2, \\
 B_2 = \frac{1}{12}, \\
 B_1 = \frac{1}{6}, \\
 D_2 = \frac{1}{8}, \\
 D_1 = \frac{1}{4}, \\
 C_1 = -4C_2 - \frac{1}{4}, \\
 C_0 = 12C_2,
 \end{array} \right. \quad (3.25)$$

onde, como no modelo D2Q9, temos dois graus de liberdade: A_2 e C_2 .

As relações (3.23) e (3.25) são válidas para a forma incompressível (3.20) e para a compressível (2.27) da distribuição de equilíbrio apresentada. É importante ressaltar que as distribuições de equilíbrio BGK (2.23) e iBGK (2.24), apresentadas no capítulo anterior, são casos particulares destas duas distribuições (3.20) e (2.27), onde acrescentam-se as restrições:

$$\begin{cases} \frac{A_0}{A_1} = \frac{C_0}{C_1}, \\ \frac{A_1}{A_2} = \frac{B_1}{B_2} = \frac{C_1}{C_2} = \frac{D_1}{D_2}, \end{cases} \quad (3.26)$$

tornando os coeficientes unicamente determinados.

3.5.2 Análise de estabilidade de von Neumann

Nesta seção apresentaremos uma análise de estabilidade linearizada de von Neumann aplicada à equação de *lattice* Boltzmann (baseada no trabalho de Sterling e Chen (1996)), porém assumindo o tipo mais geral de distribuição de equilíbrio voltada para problemas incompressíveis (dada pela equação (3.20)). O objetivo desta análise é estudar a sensibilidade da estabilidade da equação de *lattice* Boltzmann a mudanças nas constantes A_σ , B_σ , C_σ e D_σ da distribuição de equilíbrio apresentada. Como vimos na Seção 3.5.1, a escolha destes parâmetros possui dois graus de liberdade para os modelos de *lattice* $D2Q9$ e $D3Q19$. Na Seção 3.5.3, veremos como estes parâmetros impactam na estabilidade do método.

Para realizar a análise proposta, partimos da equação de *lattice* Boltzmann:

$$f_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{\tau} [f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell. \quad (3.27)$$

Devido ao termo de colisão, esta é uma equação não-linear e quadrática na velocidade (função de f_i , ver (2.26)). Por isso, vamos considerar a linearização destes termos não lineares.

Começamos assumindo uma solução em um estado estacionário $\tilde{f}_i(\mathbf{x})$ (sem

dependência temporal), ou seja, satisfazendo a equação:

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i) = \tilde{f}_i(\mathbf{x}) + \frac{1}{\tau} \left[\tilde{f}_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}) - \tilde{f}_i(\mathbf{x}) \right], \quad i = 1, \dots, \ell. \quad (3.28)$$

Então introduzimos uma perturbação com dependência espacial e temporal da forma:

$$f_i(\mathbf{x}, t) = \tilde{f}_i(\mathbf{x}) + \delta f_i(\mathbf{x}, t), \quad i = 1, \dots, \ell \quad (3.29)$$

Substituindo (3.29) em (3.28) e linearizando o termo de equilíbrio em torno de $\tilde{f}_i^{\text{eq}}(\mathbf{x})$, chegamos à seguinte equação:

$$\begin{aligned} \delta f_i(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_i, t + \Delta t) &= \delta f_i(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{1}{\tau} \left[\sum_j \frac{\partial \tilde{f}_i^{\text{eq}}}{\partial \tilde{f}_j}(\mathbf{x}) \delta f_j(\mathbf{x}, t) - \delta f_i(\mathbf{x}, t) \right], \quad i = 1, \dots, \ell, \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde temos o Jacobiano:

$$\tilde{J}_{ij}(\mathbf{x}) = J_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})) = \frac{\partial \tilde{f}_i^{\text{eq}}}{\partial \tilde{f}_j}(\mathbf{x}), \quad i, j = 1, \dots, \ell. \quad (3.31)$$

Assumindo que a perturbação é harmônica da forma:

$$\delta f_i(\mathbf{x}, t) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} F_i(t), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (3.32)$$

chegamos à seguinte equação que descreve a evolução temporal da perturbação:

$$F_i(t + \Delta t) = \sum_j \Gamma_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{k}) F_j(t), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (3.33a)$$

$$\Gamma_{ij} = e^{\hat{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_i\Delta x} \left[\left(1 - \frac{1}{\tau} \right) \delta_{ij} + \frac{1}{\tau} J_{ij}(\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})) \right], \quad i, j = 1, \dots, \ell, \quad (3.33b)$$

onde \hat{i} é a unidade imaginária e \mathbf{k} está associado à frequência e à orientação das perturbações.

Logo, teremos a garantia de estabilidade linear quando os autovalores da

matriz $\mathbf{\Gamma}$ forem menores que 1.

Para a distribuição de equilíbrio (3.20), temos que:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial f_j} = 1, \\ \frac{\partial}{\partial f_j}(v\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{u}}) = v\mathbf{e}_i \cdot \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial f_j} = \frac{(v\mathbf{e}_i \cdot v\mathbf{e}_j)}{\rho_0}, \\ \frac{\partial}{\partial f_j}(\tilde{\mathbf{u}} \cdot \tilde{\mathbf{u}}) = 2\tilde{\mathbf{u}} \cdot \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial f_j} = 2\frac{(\tilde{\mathbf{u}} \cdot v\mathbf{e}_j)}{\rho_0}, \\ \frac{\partial}{\partial f_j}(v\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2 = 2\frac{(v\mathbf{e}_i \cdot v\mathbf{e}_j)}{\rho_0}(v\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{u}}), \end{cases} \quad (3.34)$$

portanto, o Jacobiano (3.31) fica da forma:

$$\tilde{J}_{ij}(\mathbf{x}) = A_\sigma + B_\sigma(v\mathbf{e}_i \cdot v\mathbf{e}_j) + 2C_\sigma(v\mathbf{e}_j \cdot \tilde{\mathbf{u}}) + 2D_\sigma(v\mathbf{e}_i \cdot v\mathbf{e}_j)(v\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{u}}), \quad i, j = 1, \dots, \ell. \quad (3.35)$$

3.5.3 Análise numérica de estabilidade

Para montar um mapa de estabilidade vamos fixar o valor $\tau = 0,501$ e, para cada par de coeficientes (A_2, C_2) , verificaremos qual o maior valor de $\tilde{\mathbf{u}}$ que pode ser obtido, variando os valores de \mathbf{k} ($k_\alpha \in [0, \pi/\Delta x]$, $\alpha = 1, 2$), antes que algum autovalor da matriz $\mathbf{\Gamma}$ (3.33) se torne maior ou igual a um. Começamos o teste com $|\tilde{\mathbf{u}}| = 0,01$ com incrementos de 0,01, caso os autovalores sejam menores que 1.

Na Figura 3.26 mostramos um mapa de estabilidade linear para a equação de *lattice* Boltzmann bidimensional em função do coeficientes A_2 e C_2 . Deste mapa podemos ver que, segundo esta análise, a distribuição de BGK tradicionalmente adotada não se mostra a mais estável. Sendo os coeficientes com maior estabilidade $A_2 = 0,0211$ e $C_2 = -0,0180$. É importante ressaltar que este mapa pode variar de acordo com os valores de \mathbf{k} analisados.

Para verificar numericamente a influência que a distribuição de equilíbrio tem sobre a estabilidade da LBE, propomos um estudo com o escoamento de Poiseuille em 2D. Neste estudo, impomos um gradiente de pressão em um canal com relação

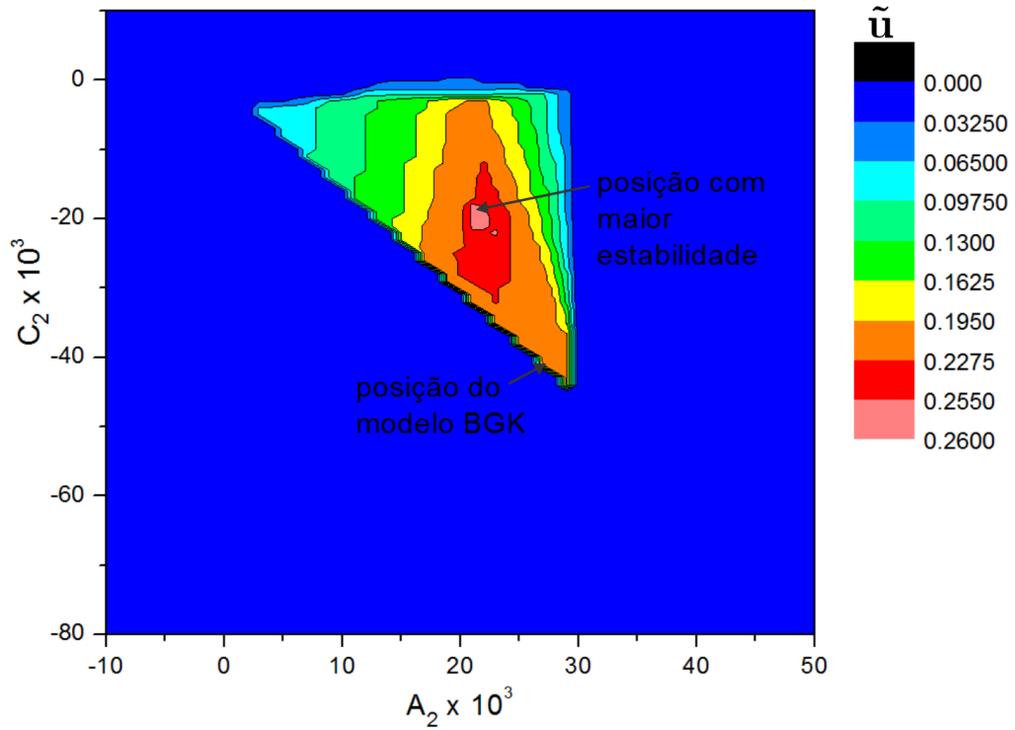


Figura 3.26: Mapa de estabilidade linear para a equação de *lattice* Boltzmann bidimensional em função dos coeficientes A_2 e C_2 . Quanto maior o valor de \tilde{u} , maior a estabilidade linear.

de aspecto geométrica de 2/1 (ver Figura 3.27), de forma que começamos com um valor de Reynolds baixo ($Re = 5$) e, se o escoamento se tornar estável e estacionário, incrementamos este valor de 5 em 5 até que esta condição não seja satisfeita. Este teste é repetido para cada combinação do parâmetro $(\tau - 0,5) \in [2^{-9}, 2^{-1}]$ e do número de células ao longo do diâmetro ($N = 11, 16, 31, 41$). Sendo rodadas de 500 à 1800 simulações para cada distribuição de equilíbrio, dependendo da sua estabilidade. Desta forma, podemos também avaliar as diferentes distribuições de equilíbrio apresentadas na Seção 2.4.

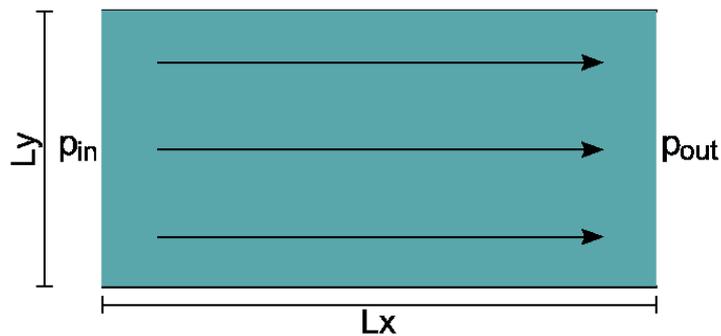


Figura 3.27: Ilustração do esquema para o escoamento de Poiseuille.

Na Figura 3.28 mostramos o máximo valor de Reynolds atingido em cada caso, sendo o erro da solução numérica (em relação à analítica, segundo a norma (3.7)) apresentado para os mesmos casos na Figura 3.29. Como podemos observar na Figura 3.28, a distribuição de equilíbrio tem um papel muito importante na estabilidade da simulação. Os modelos BGK (2.23) e iBGK (2.24) apresentam estabilidade muito semelhante quando o valor de τ é pequeno (menor Mach), porém quando τ aumenta o modelo iBGK se mostra bem mais estável. Repare, na Figura 3.29, que nos casos com τ pequeno os erros obtidos são da mesma ordem. Já no caso da distribuição e coeficientes propostos em Yeomans (2006), vemos claramente uma perda de estabilidade. O que era esperado pois o conjunto de coeficientes $A_2 = 1/24$ e $C_2 = -1/24$ apresentou um valor muito baixo de estabilidade no mapa da Figura 3.26. Por outro lado, tomando os coeficientes indicados como de maior estabilidade pela Figura 3.26 (modelo Otimizado, $A_2 = 0,0211$ e $C_2 = -0,0180$), pode-se obter um modelo mais estável que o iBGK para os casos analisados, chegando a valores de Reynolds até 31% maiores. Repare que, mesmo em valores de Reynolds mais altos, este modelo mantém os erros semelhantes ao modelo iBGK.

Estes estudos podem ser estendidos para outros problemas (inclusive tridimensionais) para que se tenha uma análise mais completa da influência da distribuição de equilíbrio na estabilidade do método. Neste trabalho nos limitamos ao estudo do escoamento de Poiseuille em 2D por uma questão de custo computacional e deixamos a extensão a outros problemas e condições de contorno como trabalho futuro.

3.6 Paralelização e desempenho da implementação do LBM

O tempo que simulações numéricas de grande complexidade demoram para executar (tempo de parede) é um fator crucial para que se possam obter as informações desejadas em tempo hábil. Em especial, quando realizamos simulações transientes em domínios tridimensional, o tempo de parede pode facilmente se

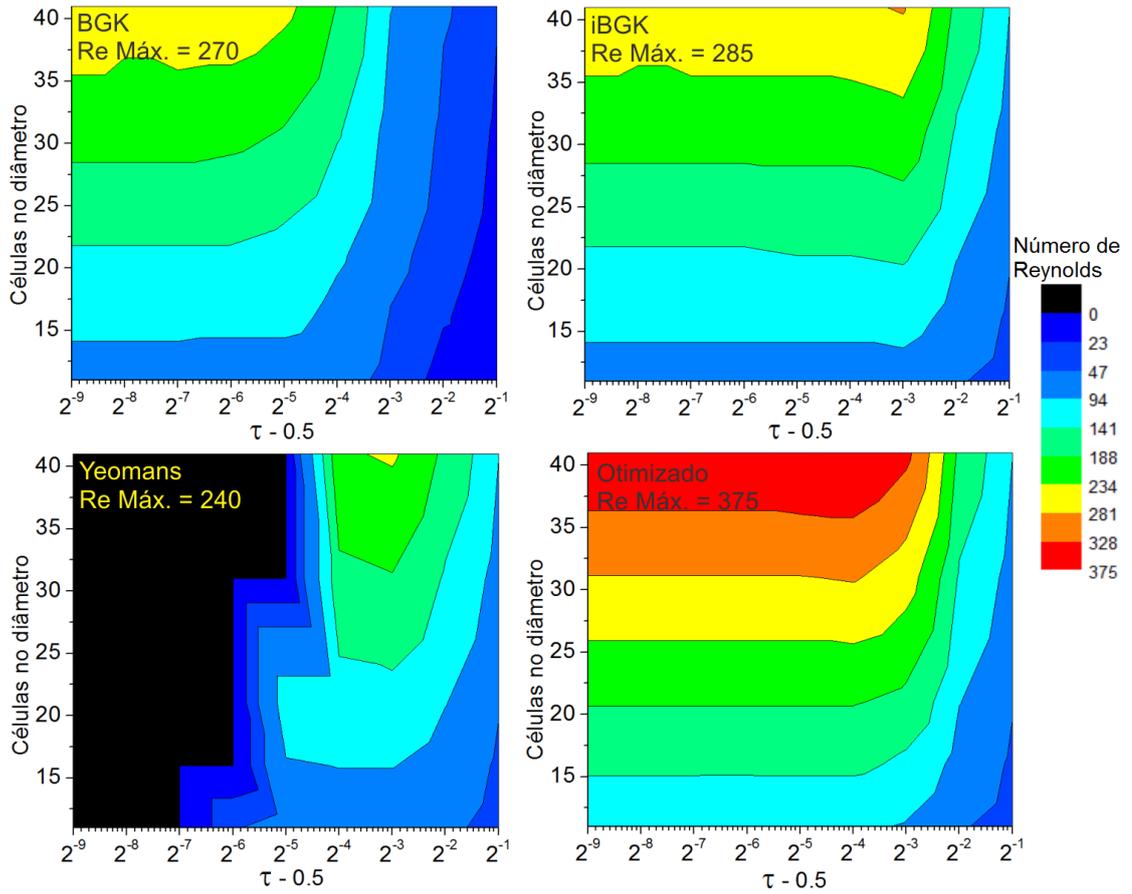


Figura 3.28: Máximos valores de Reynolds atingidos em malhas com diferentes quantidade de células ao longo do diâmetro e diferentes valores de τ , para quatro modelos de distribuição de equilíbrio.

tornar muito grande (da ordem de dias). Por isso, a utilização correta e eficiente dos recursos computacionais disponíveis é essencial para reduzir o tempo de execução destas simulações.

Na Seção 3.6.1 vamos explorar a paralelização híbrida (em dois níveis) de uma implementação do LBM, a qual permite um melhor aproveitamento dos recursos de clusters com processadores de mais de um núcleo (arquitetura *multi-core*). Para, em seguida, analisarmos seu desempenho e escalabilidade em dois clusters (chegando a mais de 32000 núcleos de processamento) na Seção 3.6.2. Por fim, compararemos seu desempenho e acurácia com uma implementação do método de elementos finitos (FEM) na Seção 3.6.3, modelando um caso teste transiente com solução analítica.

Outras otimizações feitas na implementação, juntamente com o pseudo-

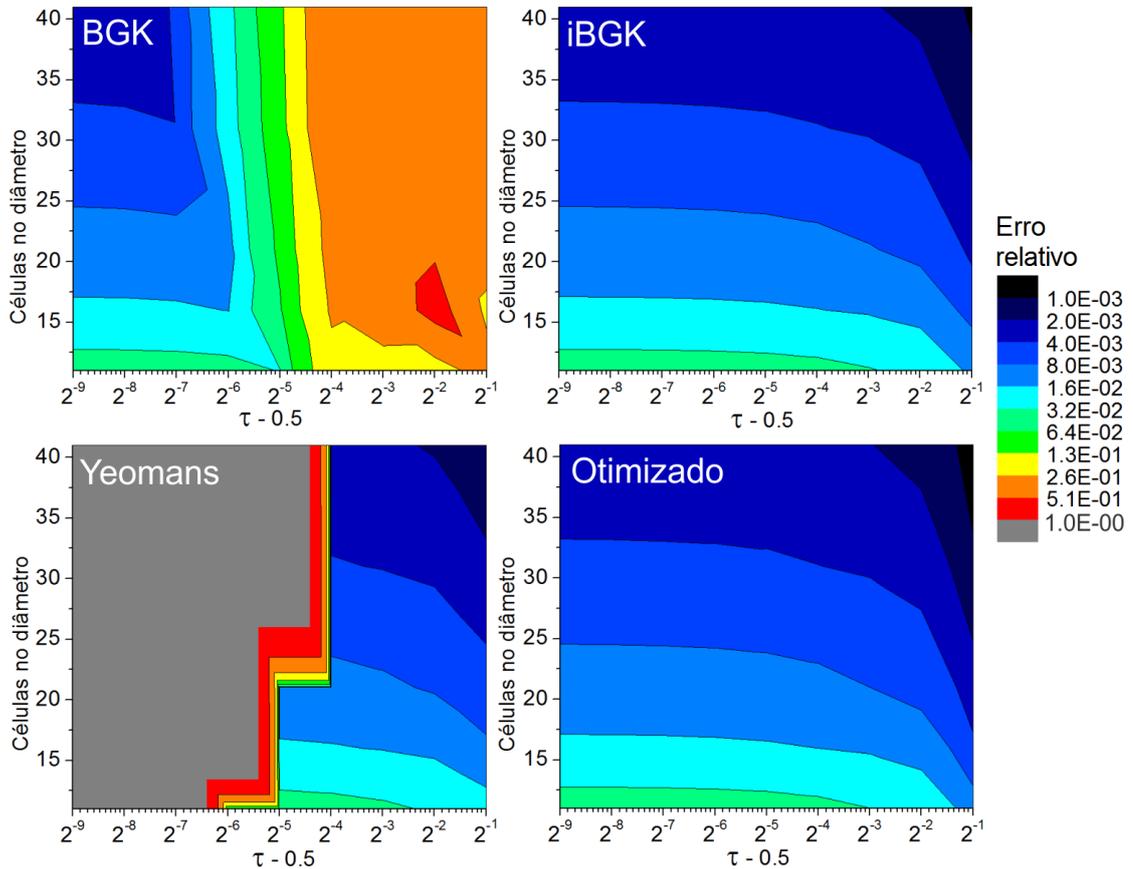


Figura 3.29: Erros relativos máximos em malhas com diferentes quantidade de células ao longo do diâmetro e diferentes valores de τ , para quatro modelos de distribuição de equilíbrio.

código, são detalhadas e discutidas no Apêndice A.

3.6.1 Paralelização híbrida MPI-OpenMP

Apresentaremos a seguir a forma adotada para paralelizar a implementação do LBM em ambientes computacionais onde os núcleos de processamento possuem dois níveis de compartilhamento de recursos (memória compartilhada e distribuída). Muitas implementações utilizam somente um nível de paralelização, voltado para memória distribuída, de forma que possam fazer uso de clusters com troca de mensagens entre os processos (MPI, *Message Passing Interface*). Porém, para processos com intensiva comunicação, como o LBM, a troca de mensagens pode ser um limitante para a escalabilidade da implementação em certos clusters de computadores. Para reduzir o número de trocas de mensagens, dividimos a paralelização em dois níveis, usando troca de mensagens no primeiro nível (MPI)

e paralelização com compartilhamento de memória no segundo nível (OpenMP). Assim, reduzimos o número de partições da malha e o número de trocas de mensagem (comunicação). O primeiro de nível de paralelização pode ser feito, por exemplo, para distribuir o processamento entre diferentes nós de um cluster, enquanto o segundo nível de paralelização ocorre dentro de cada nó com múltiplos núcleos de processamento.

Na Figura 3.30, montamos um fluxograma do esquema de paralelização híbrida das etapas da implementação do LBM. Primeiramente, iniciam-se os processos que trocarão mensagens através da API MPI, onde cada processo aloca somente a memória referente a sua partição da malha para, em seguida, definir as condições iniciais. Durante o laço (*loop*) temporal, está concentrada a maior parte do custo computacional das simulações, por isso procuramos paralelizar as etapas de processamento em um segundo nível. Mais detalhadamente, iniciamos as tarefas (*threads*), que terão acesso à memória alocada pelo processo que as criou, para realizar de forma paralela a etapa de colisão das partículas dentro de cada partição. Durante a etapa de troca de mensagens (não bloqueantes) entre as partições da malha, não é necessário utilizar o segundo de nível de paralelização. O segundo de nível de paralelização inicia-se novamente após a troca de mensagens para realizar as etapas de cálculo das condições de contorno e propagação das partículas. Somente ao final do laço temporal, a paralelização MPI é encerrada.

3.6.2 Escalabilidade

Como vimos na Seção 3.6.1, a implementação do LBM está paralelizada em dois níveis, sendo o primeiro através da API MPI (memória distribuída) e segundo através da API OpenMP (memória compartilhada). Para testar o desempenho da implementação vamos simular o escoamento de um fluido em uma cavidade cúbica com paredes fixas à exceção da parede superior que se desloca com velocidade constante (caso teste mostrado na Seção 3.3.1). O desempenho é medido pelo número de células da malha que são atualizadas por segundo, usando-se a unidade

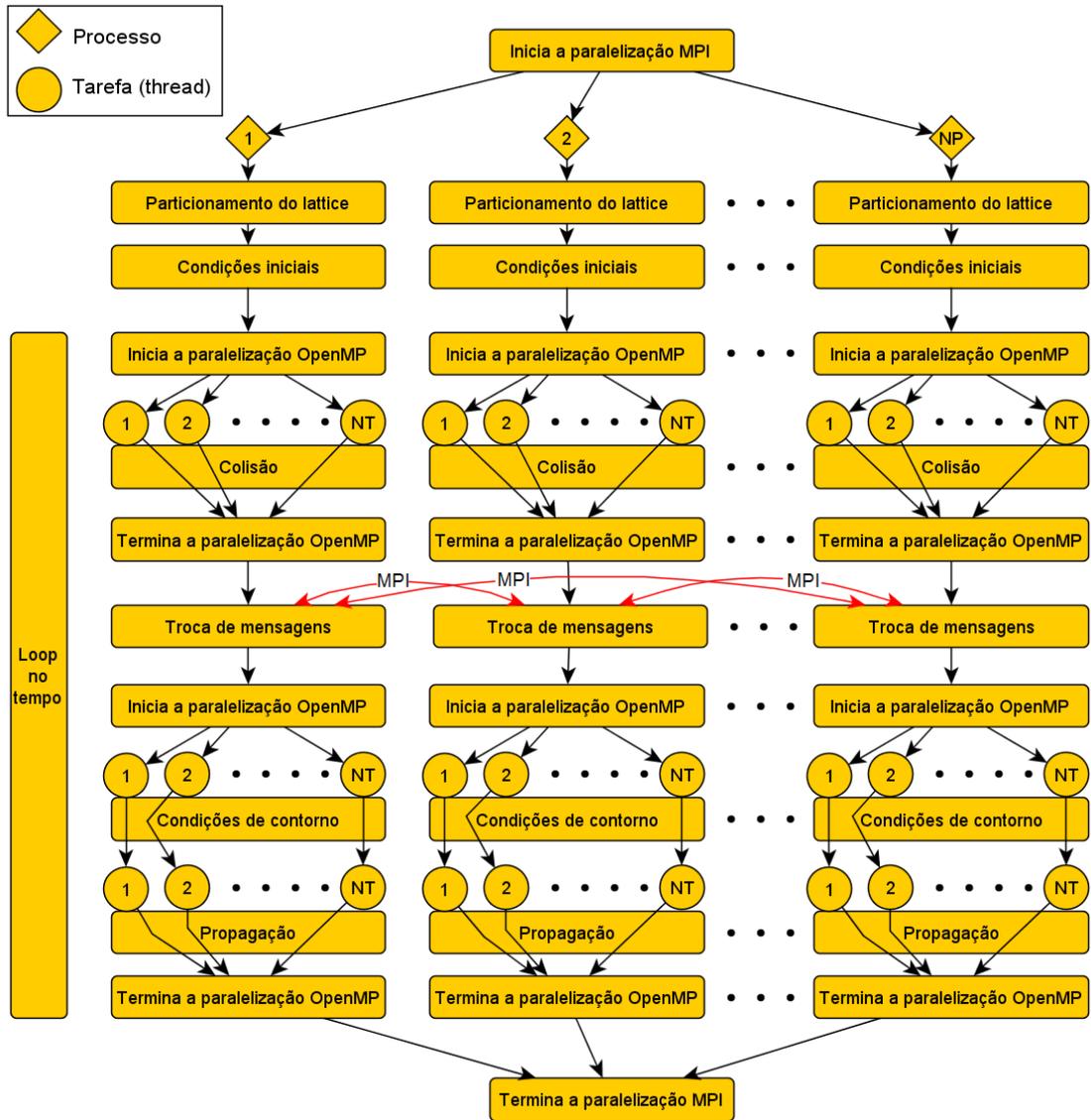


Figura 3.30: Fluxograma da paralelização híbrida da implementação do LBM.

adotada na literatura MLUPS (milhões de unidades de *lattice* atualizadas por segundo). Os testes são feitos para diferentes níveis de refinamento da malha e cada teste é o valor médio de uma simulação de dois minutos de tempo de parede.

O primeiro supercomputador testado foi o Cluster Bull bullx do Laboratório Nacional de Computação Científica (Petrópolis - Brasil), onde foi feita uma paralelização híbrida, isto é, paralelização por OpenMP dentro de cada nó e paralelização MPI para comunicação entre os nós. Sendo que, a troca de mensagens entre os nós é feita pelo envio não bloqueante de uma única mensagem para cada partição vizinha e recebimento bloqueante. Esta escolha foi feita baseada em teste de desempenho feitos com diferentes abordagens. Este cluster possui 100

nós com 36GB de memória RAM e 2 processadores Intel Xeon X5550 de 2,67GHz (6 núcleos por processador) cada, totalizando 1200 núcleos de processamento. Na Figura 3.31 apresentamos as curvas de desempenho da implementação do LBM com diferentes refinamentos de malha (desde 0,5 milhões até 593 milhões de células) e núcleos de processamento. Aqui podemos ver que a implementação apresenta boa escalabilidade em todas malhas testadas com até 120 núcleos de processamento e a partir da malha com 4 milhões de células a escalabilidade é boa com mais de 1000 núcleos de processamento. Esta escalabilidade foi possível devido à comunicação entre os nós através de *Infiniband* (de 40Gb/s no cluster Bull), pois o único incremento significativo de custo que se tem ao paralelizar por MPI é troca de mensagens com informações nas fronteiras entre as partições.

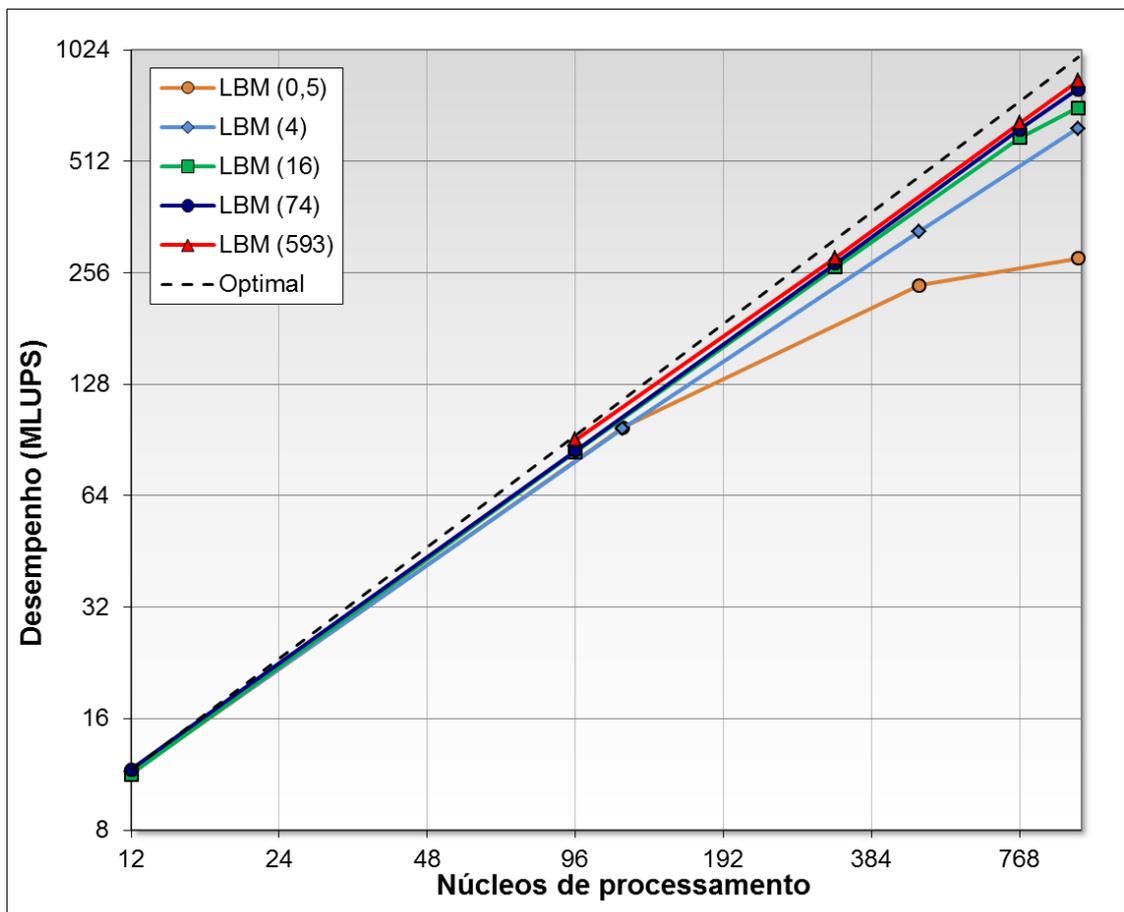


Figura 3.31: Curvas de desempenho da implementação do LBM no cluster Bull, com malhas contendo de 0,5 a 593 milhões de células.

Nesta implementação, por simplicidade, estamos transmitindo todas as 19 distribuições de partículas em uma célula de fronteira para a partição vizinha.

Mas, isto pode ser otimizado, visto que normalmente somente as partículas que se direcionam à partição vizinha precisariam ser enviadas. Um fato importante ao refinar a malha é que o custo computacional de atualizar as células cresce de forma cúbica e a quantidade de dados transmitidos por mensagens cresce de forma quadrática. Portanto, teoricamente, o custo de troca de mensagens (relativo ao custo total) cai linearmente com o refinamento. No exemplo que vimos na Seção 3.4.2 (da modelagem do escoamento sanguíneo em um segmento da artéria vertebral), o tempo de parede da simulação de dois ciclos cardíacos pode ser reduzido de 27,2 dias (na máquina Altix-XE 340) para cerca de 7,5 horas no cluster Bull com 1008 núcleos de processamento.

No segundo cluster usado pudemos testar a escalabilidade da implementação com até 32768 núcleos de processamento. Este teste foi feito no cluster Blue Gene/P do Argonne National Laboratory (Chicago - EUA), onde foi feita somente a paralelização MPI por questões técnicas. Este cluster foi projetado para rodar implementações altamente paralelizadas, possuindo 40 racks de IBM Blue Gene/P, com 1024 nós (com 2GB de memória RAM e processador quad-core de 850 MHz) por rack. Devido às otimizações feitas no processo de comunicação entre os nós, vemos na Figura 3.32 que, mesmo com uma malha de 512 milhões de células com 32768 partições, a escalabilidade continua muito boa (eficiência de 93,7%). Com esta quantidade de núcleos de processamento chegamos ao desempenho de 15000MLUPS, quase 20 vezes mais rápido que no cluster Bull. Comparando este desempenho com a atual tendência de uso de GPGPUs, conforme reportado por Xian e Takayuki (2011), em clusters com cerca de 100 GPGPUs o desempenho de um problema com malha semelhante a deste chega a 7500MLUPS, porém com precisão simples (4 Bytes).

3.6.3 Comparação da acurácia e do desempenho contra o FEM

Para compararmos de forma criteriosa o desempenho e a acurácia desta implementação do LBM com uma implementação do método de elementos finitos

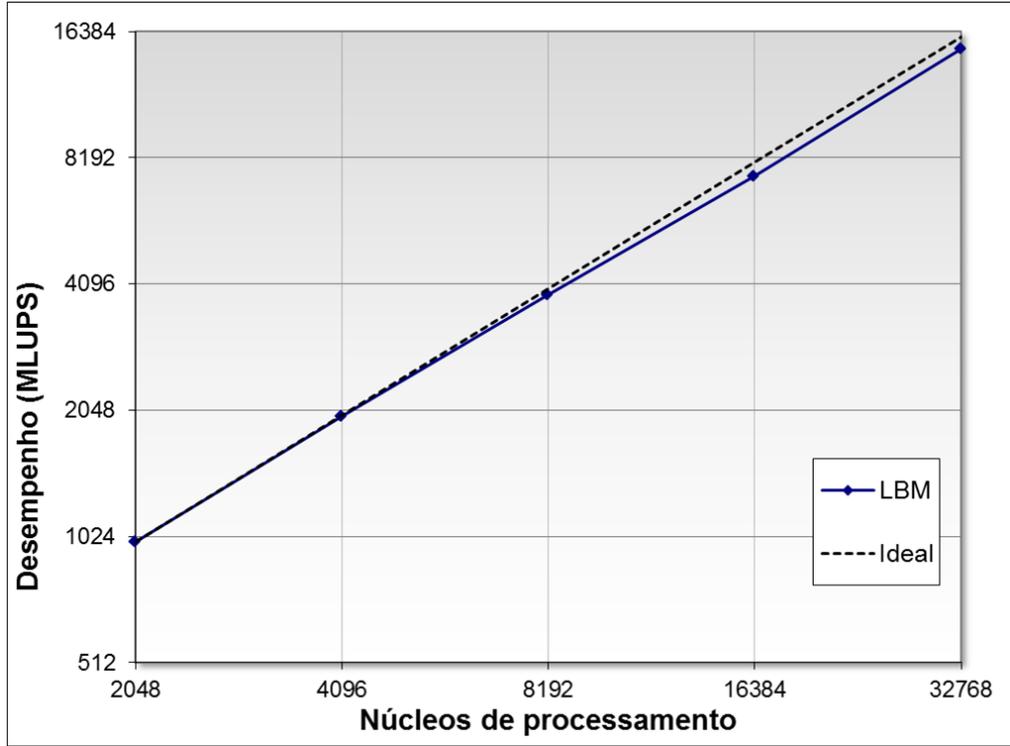


Figura 3.32: Curvas de desempenho no cluster do ANL.

(FEM) (método desenvolvido no grupo com discretização no tempo por diferenças finitas de segunda ordem e elementos tetraédricos lineares com enriquecimento por bolha no campo de velocidade [Urquiza et al. (2006)]), resolvemos modelar um problema de escoamento tridimensional transiente com solução analítica. O problema selecionado, proposto por Ethier e Steinman (1994), consiste no escoamento incompressível de um fluido em um domínio cúbico com valores de velocidade impostos nas fronteiras. A solução analítica do problema para as equações de Navier–Stokes (2.12) é da forma:

$$u_x = -a [e^{ax} \sin(ay + dz) + e^{az} \cos(ax + dy)] e^{-d^2 t}, \quad (3.36a)$$

$$u_y = -a [e^{ay} \sin(az + dx) + e^{ax} \cos(ay + dz)] e^{-d^2 t}, \quad (3.36b)$$

$$u_z = -a [e^{az} \sin(ax + dy) + e^{ay} \cos(az + dx)] e^{-d^2 t}, \quad (3.36c)$$

$$p = -\frac{a^2}{2} \left[2 \sin(ax + dy) \cos(az + dx) e^{a(y+z)} + 2 \sin(ay + dz) \cos(ax + dy) e^{a(z+x)} \right. \\ \left. + 2 \sin(az + dx) \cos(ay + dz) e^{a(x+y)} + e^{2ax} + e^{2ay} + e^{2az} \right] e^{-d^2 t}, \quad (3.36d)$$

onde a e d são constantes que caracterizam a distribuição espacial e temporal dos campos de velocidade e pressão. Os parâmetros usados são: aresta do cubo $L = 2$ cm (onde $(x, y, z) \in ([-1, 1], [-1, 1], [-1, 1]) = \Omega$), $a = 2$, $d = 0, 1$, período $T = 10,5$ s, densidade $\rho = 1,05$ g/cm³, velocidade máxima $u_{\max} = 24.124$ cm/s e três valores de Reynolds (10, 100 e 1000) foram modelados (sendo a viscosidade determinada pela relação (3.14)).

Para uma melhor análise e clareza dos resultados vamos iniciar com simulações do problema estacionário (fazendo $t = 0$ na equação (3.36) e impondo essas funções como condições de contorno), para depois analisar o problema transiente. As normas usadas para medir a diferença entre os campos de velocidade das soluções analítica (\mathbf{u}) e numérica ($\bar{\mathbf{u}}$) são detalhadas abaixo:

$$\|\bar{\mathbf{u}}(\cdot, t)\|_{E_{med}} = \frac{1}{V} \frac{\int_{\Omega} |\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|}{\max_{\Omega} |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|} \approx \frac{1}{N} \frac{\sum_{n=1}^N |\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_n, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_n, t)|}{\max_{\Omega} |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|}, \quad (3.37)$$

$$\|\bar{\mathbf{u}}(\cdot, \cdot)\|_{E_{med}^T} = \frac{1}{T} \int_{t=0}^T \frac{1}{V} \frac{\int_{\Omega} |\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|}{\max_{\Omega} |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)|} \\ \approx \frac{1}{N_T} \sum_{p=1}^{N_T} \frac{1}{N} \frac{\sum_{n=1}^N |\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_n, t_p) - \mathbf{u}(\mathbf{x}_n, t_p)|}{\max_{\Omega} |\mathbf{u}(\mathbf{x}, t_p)|}, \quad (3.38)$$

onde N é o número de pontos da malha, N_T é o número de passos temporais e V é o volume do domínio Ω .

As malhas usadas nos testes a seguir estão descritas na Tabela 3.5, onde o número de pontos varia desde 548 até 32 milhões. Buscamos começar com malhas grossas e reduzir pela metade o espaçamento a cada refinamento. Nas simulações via LBM o passo temporal é reduzido quadraticamente em relação à redução do espaçamento para manter a queda quadrática do erro, enquanto o passo temporal do FEM se mantém o mesmo.

Malhas de Elementos Finitos						
malha	F1	F2	F3	F4	F5	F6
nós	548	3.593	25.673	192.445	1.504.063	5.830.195
DOFs	2.192	14.372	102.692	769.780	6.016.252	23.320.780
Δx (cm)	0,333	0,167	0,083	0,0417	0,02083	0,0125
Malhas de <i>lattice</i> Boltzmann						
malha	L1	L2	L3	L4	L5	L6
células	1.000	8.000	64.000	512.000	4.096.000	32.768.000
DOFs	19.000	152.000	1.216.000	9.728.000	77.824.000	622.592.000
Δx (cm)	0,222	0,105	0,0512	0,0253	0,01257	0,006269

Tabela 3.5: Quantidade de graus de liberdade (DOFs), número de pontos e espaçamento das malhas usadas no teste de comparação entre as implementações de LBM e FEM.

Nas Figuras 3.33-3.38 exibiremos resultados extraídos do problema estacionário proposto, após a solução estacionária ser atingida.

Na Figura 3.33 estão as medidas de erro do problema estacionário (segundo a norma (3.37)), obtidas pelas implementações de FEM (vermelho) e LBM (verde) em função do espaçamento das malhas. Podemos observar o decaimento quadrático dos erros para os problemas com números de Reynolds 10, 100 e 1000. Os erros obtidos pelo FEM, para um mesmo espaçamento, se mostram menores que os obtidos pelo LBM. Isto se deve, em parte, ao maior número de nós presente em uma malha de tetraedros com o mesmo espaçamento de uma malha retangular. Também observamos que, para $Re = 1000$, os erros do LBM se aproximam bastante dos erros obtidos com Reynolds menores quando a malha é refinada. Vemos um erro maior que o esperado do FEM na malha F6 com $Re = 1000$ que está associado à perda de qualidade da malha usada.

Por uma questão de clareza e síntese, os próximos resultados serão expostos somente para simulações com $Re = 100$, por ser um valor intermediário.

Na Figura 3.34, estão os erros relativos das soluções obtidas pelos métodos FEM e LBM sobre dois planos, com as malhas indicadas nas figuras. Onde o plano 1 passa pelo ponto (0,0,0) com normal (1,0,0) e o plano 2 passa pelo ponto (0,0,7,0) com normal (0,1,0). Repare que as medidas de erro médio expostas na Figura 3.33 estão refletidas nestes planos em que os pares de malhas (F2,L2), (F3,L3) e (F4,L4)

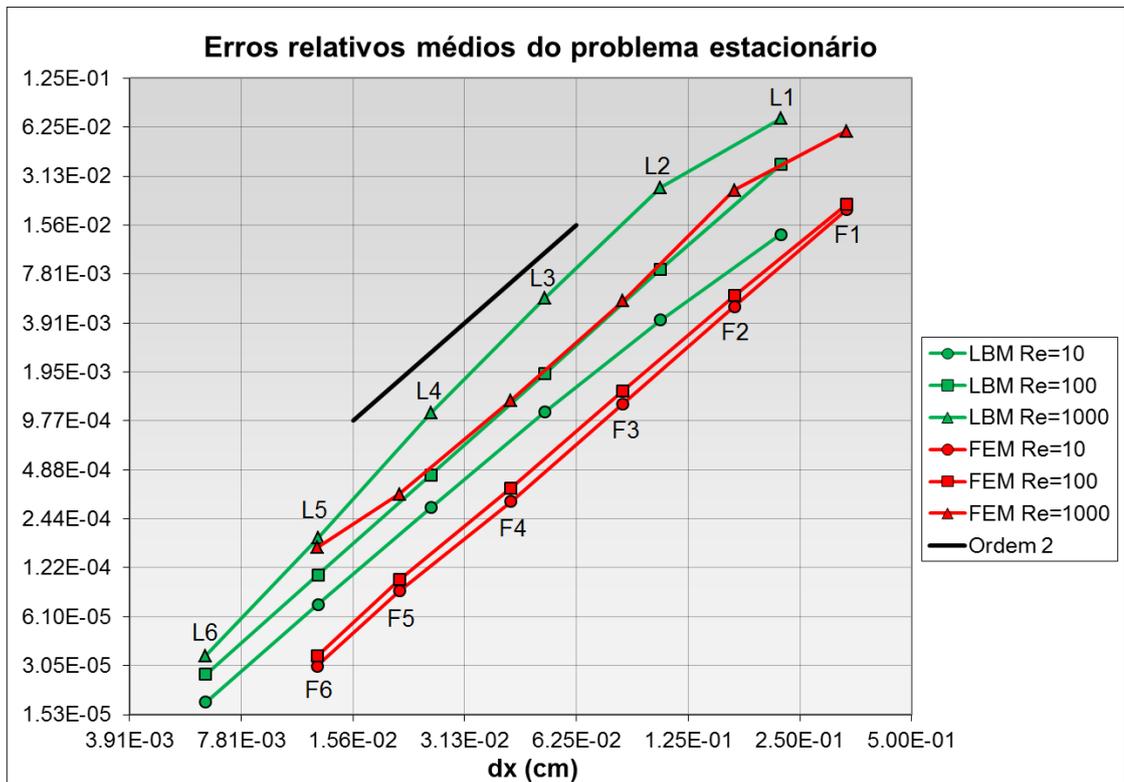


Figura 3.33: Decaimento quadrático dos erros relativos médios das soluções do problema estacionário obtidas pelos métodos FEM (vermelho) e LBM (verde) em função do espaçamento, para os números de Reynolds 10, 100 e 1000.

apresentam erros próximos. Podemos observar no plano 1 (esquerda) que os maiores erros se concentram na região central e nas partes superior e da direita para ambos métodos, onde se concentram as velocidades mais altas. Já no plano 2 (direita), observamos uma curiosa concentração de erros maiores próximo do canto direito superior onde há um ponto de sela do campo de pressão sobre o plano, em contraste com os resultados do LBM que apresentam uma concentração de erros menores nesta região.

Na Figura 3.35, comparamos as componentes da velocidade, sobre duas linhas que cruzam o domínio do problema, obtidas pelos métodos LBM (verde) e FEM (vermelho) contra a solução analítica (preto). Aqui a linha 1 vai do ponto (0,0.45,0.45) ao ponto (1,0.7,0.95) e a linha 2 vai do ponto (-0.5,-0.7,0.2) ao ponto (0.2,-0.8,-0.9) do cubo. Como podemos observar, sobre a linha 1 (esquerda) o LBM mostrou resultados mais acurados nas malhas pouco refinadas. Enquanto na linha 2 (direita), as componentes da velocidade obtidas pelo FEM estão mais próximas

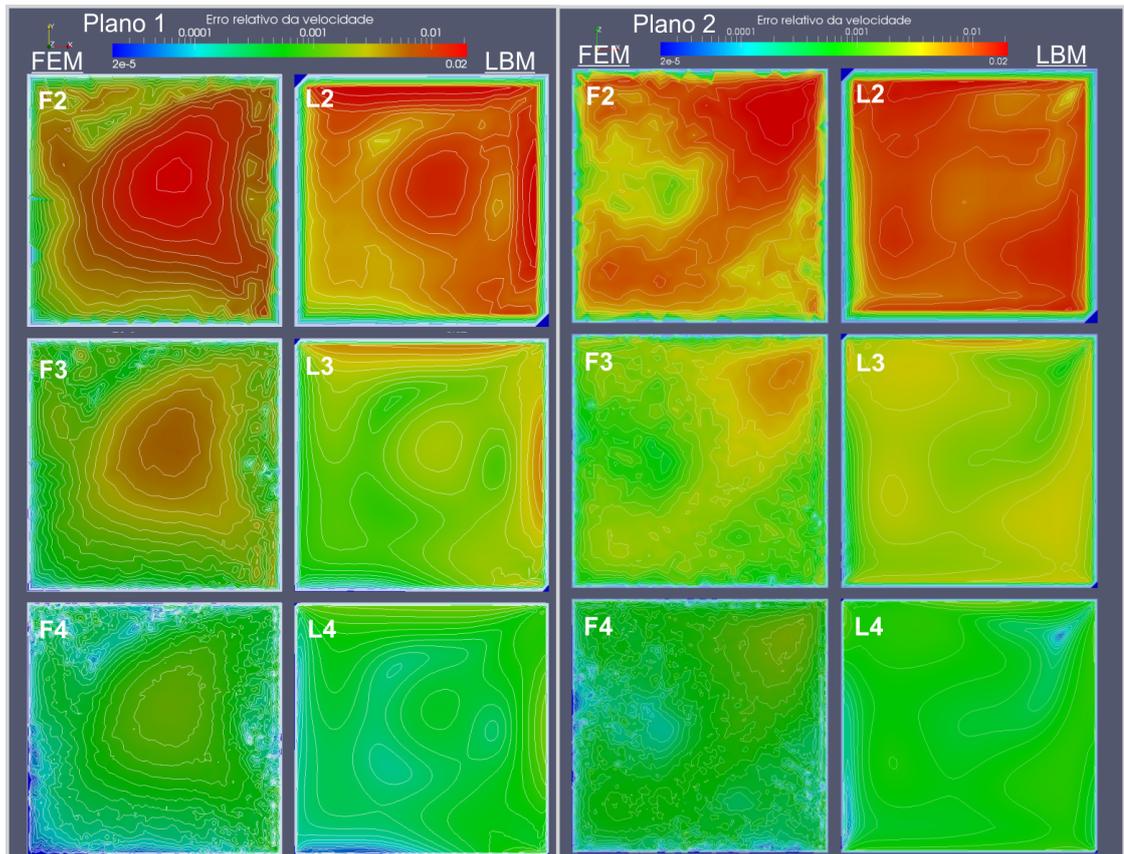


Figura 3.34: Erros relativos das soluções (em escala logarítmica) obtidas pelos métodos FEM e LBM sobre dois planos, com as malhas indicadas nas figuras.

da solução analítica. Repare que para as malhas L4 e F4 já não se notam diferenças entre os campos de velocidade sobre estas linhas, na escala mostrada, destacando a acurácia e convergência dos métodos.

Na Figura 3.36, podemos observar a complexidade do escoamento representada pelas linhas de correntes do campo de velocidade projetado sobre dois planos no cubo. Aqui, o plano 1 passa pelo ponto $(0,0,0)$ com normal $(1,0,0)$ e o plano 2 passa pelo ponto $(0,-0.5,0)$ com normal $(0,1,0)$. Nesta figura comparamos as malhas com erros semelhantes das implementações do LBM (verde) e FEM (vermelho) contra a solução analítica (preto). Este tipo de visualização é interessante pois as linhas de correntes partem de pontos (sementes) nos planos e seguem as trajetórias indicadas pelos campos de velocidade, acumulando os erros que estejam presentes. Assim como na figura anterior, já não reparamos diferenças entre os resultados das malhas L4 e F4.

Na Figura 3.37, temos linhas de correntes do campo de velocidade no espaço

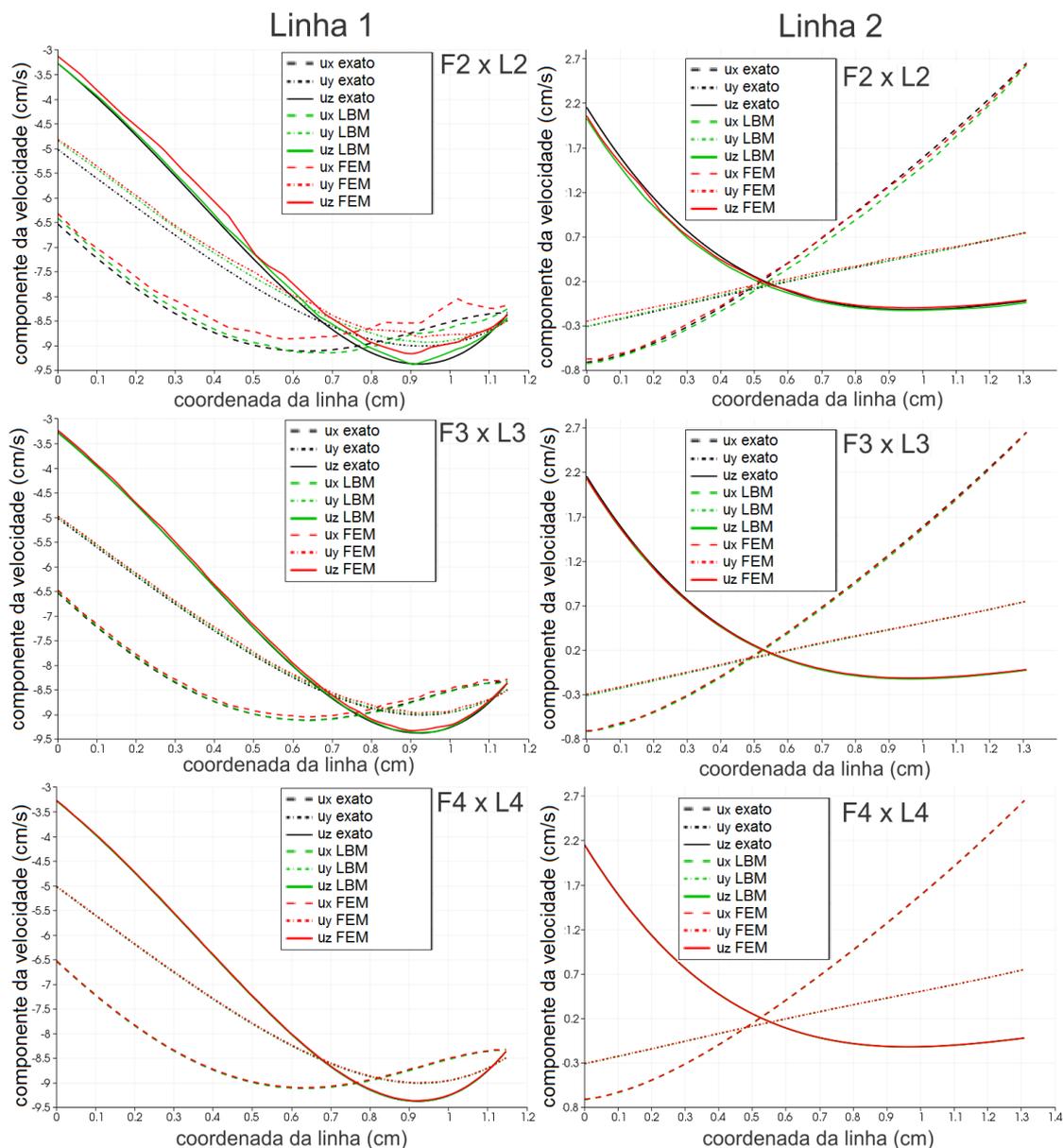


Figura 3.35: Componentes da velocidade (em cm/s) plotadas sobre duas linhas que atravessam o cubo da solução analítica (preto) e das soluções obtidas pelos métodos FEM (vermelho) e LBM (verde) com as malhas indicadas nas figuras.

tridimensional dentro do cubo. Nela comparamos as malhas com erros semelhantes das implementações do LBM (verde) e FEM (vermelho) contra a solução analítica (preto). Aqui podemos perceber melhor a complexidade do escoamento que estamos simulando. Como no caso da Figura 3.36, as linhas de corrente seguem as trajetórias indicadas pelos campos de velocidade, acumulando os erros que estejam presentes. A visualização das diferenças não é tão clara como na Figura 3.36, mas podemos ver que nos resultados das malhas L4 e F4 as diferenças das linhas de

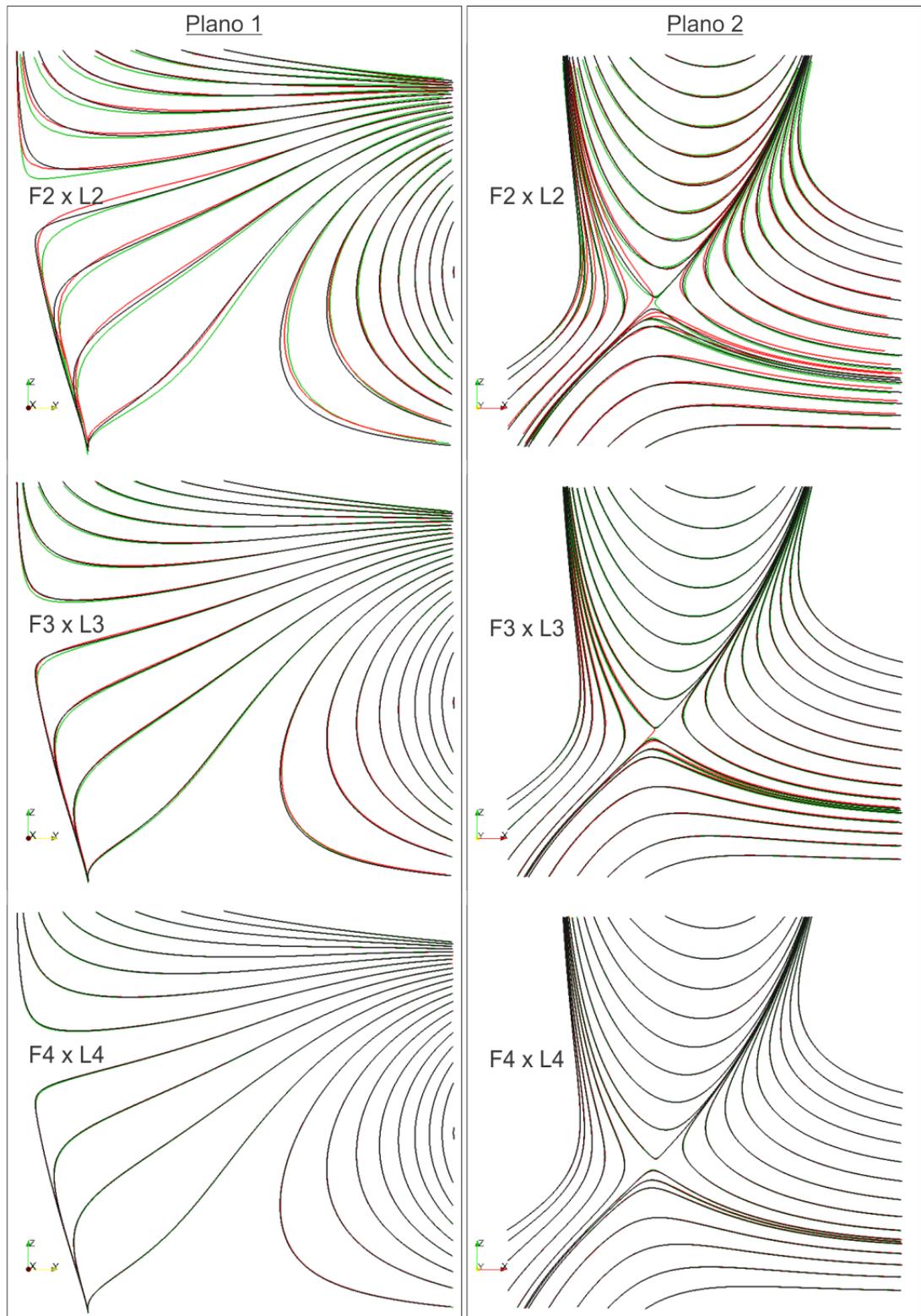


Figura 3.36: Linhas de corrente da velocidade, projetada sobre dois planos, da solução analítica (preto) e das soluções obtidas pelos métodos FEM (vermelho) e LBM (verde) com as malhas indicadas nas figuras.

correntes já são imperceptíveis.

Outra forma para compararmos os resultados obtidos pelas duas

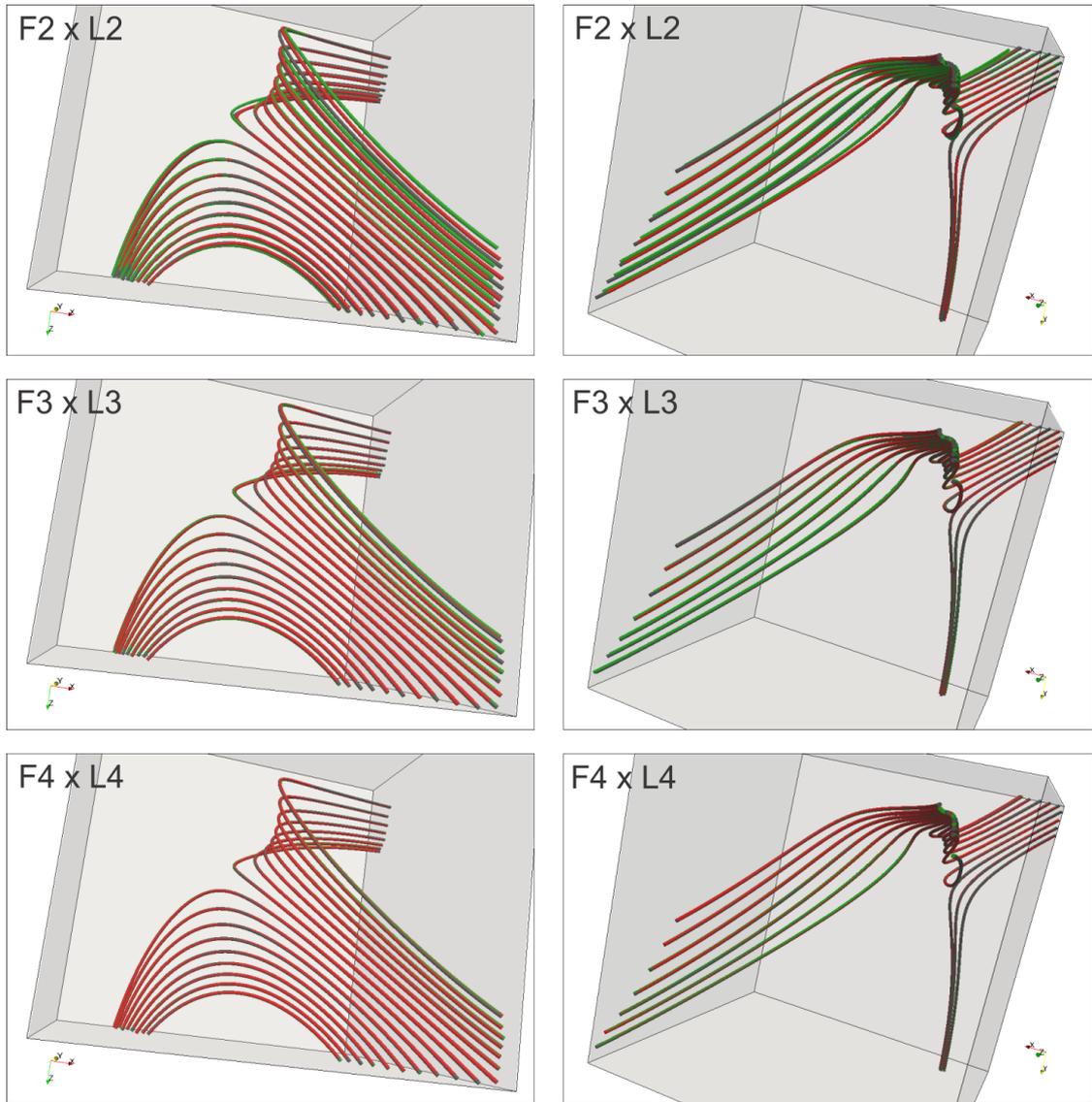


Figura 3.37: Dois conjuntos de linhas de corrente tridimensionais da velocidade obtida pela solução analítica (preto) e pelas soluções dos métodos FEM (vermelho) e LBM (verde) com as malhas indicadas nas figuras.

implementações se dá através de medidas da divergência do campo de velocidade (nula no caso contínuo, ver equação (2.12)). Para tal fim, definimos uma medida adimensional do valor absoluto médio da divergência:

$$\text{Divergência}^* = \frac{1}{V} \int_{\Omega} \frac{L}{u_{\max}} |\nabla \cdot \mathbf{u}|. \quad (3.39)$$

Na Figura 3.38, plotamos o valor médio da divergência do campo de velocidade normalizada (3.39), calculada aproximando numericamente os gradientes das velocidades obtidas pelas implementações do LBM (verde) e FEM (vermelho) e

pela solução analítica (pontilhado) nas malhas indicadas. Podemos observar que, na malha regular usada pelo LBM, a queda da divergência estimada com as soluções analítica e numérica é de ordem 2. Na malha não estruturada usada pelo FEM, a divergência não possui a mesma ordem de convergência, mas o valor da divergência calculado nestas malhas é menor usando a solução numérica do que a solução analítica. Novamente, o comportamento inesperado nas malhas F5 e F6 se deve à perda de qualidade da malha.

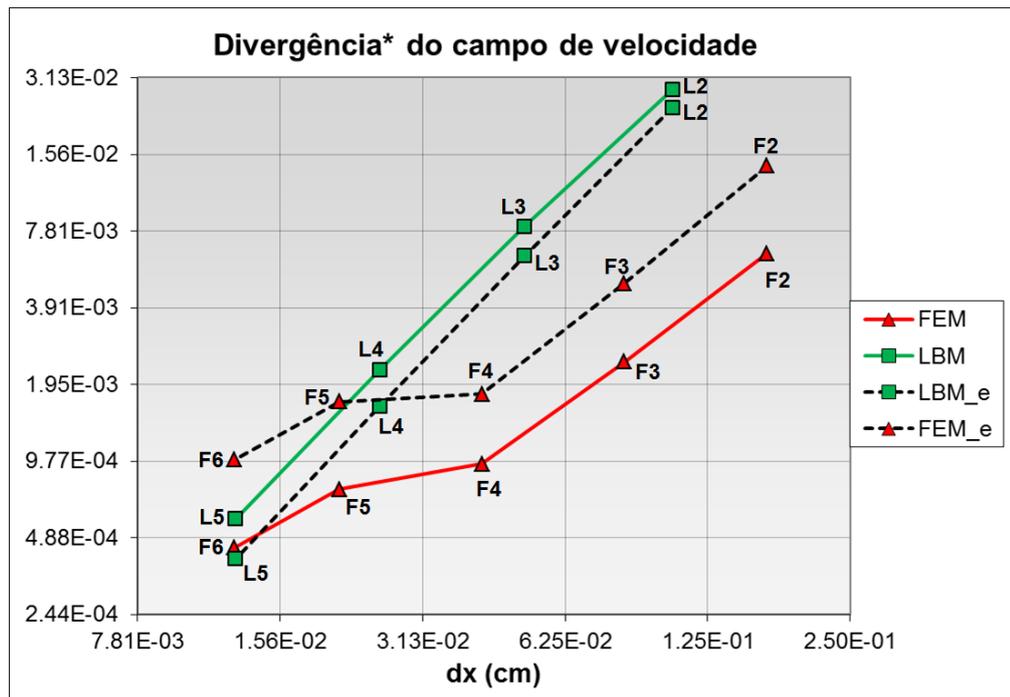


Figura 3.38: Valor médio da divergência do campo de velocidade normalizada (3.39) no domínio do problema estacionário, obtidos pelas implementações do LBM (verde) e FEM (vermelho) e pela solução analítica (pontilhado) nas malhas indicadas.

Deste ponto em diante os resultados exibidos são relativos ao problema transiente proposto. Utilizaremos a versão transiente para comparar a acurácia dos dois métodos na modelagem de fenômenos transientes e o desempenho computacional das respectivas implementações na simulação de um intervalo de tempo do problema. Através deste problema, verificaremos a escalabilidade forte (mantendo o tamanho da malha fixo e aumentando a quantidade de núcleos de processamento) e a escalabilidade fraca (aumentando a quantidade de núcleos de processamento na mesma proporção em que aumentamos a quantidade de pontos

da malha) das implementações paralelizadas.

Primeiramente, mostramos na Figura 3.39 que o fator de queda exponencial da velocidade, presente no problema transiente, interfere pouco nos erros das soluções numéricas (segundo a norma (3.37)). Resumimos os dados apresentados às três primeiras malhas para uma melhor visualização da queda de cerca de 2% dos erros ao longo da simulação.

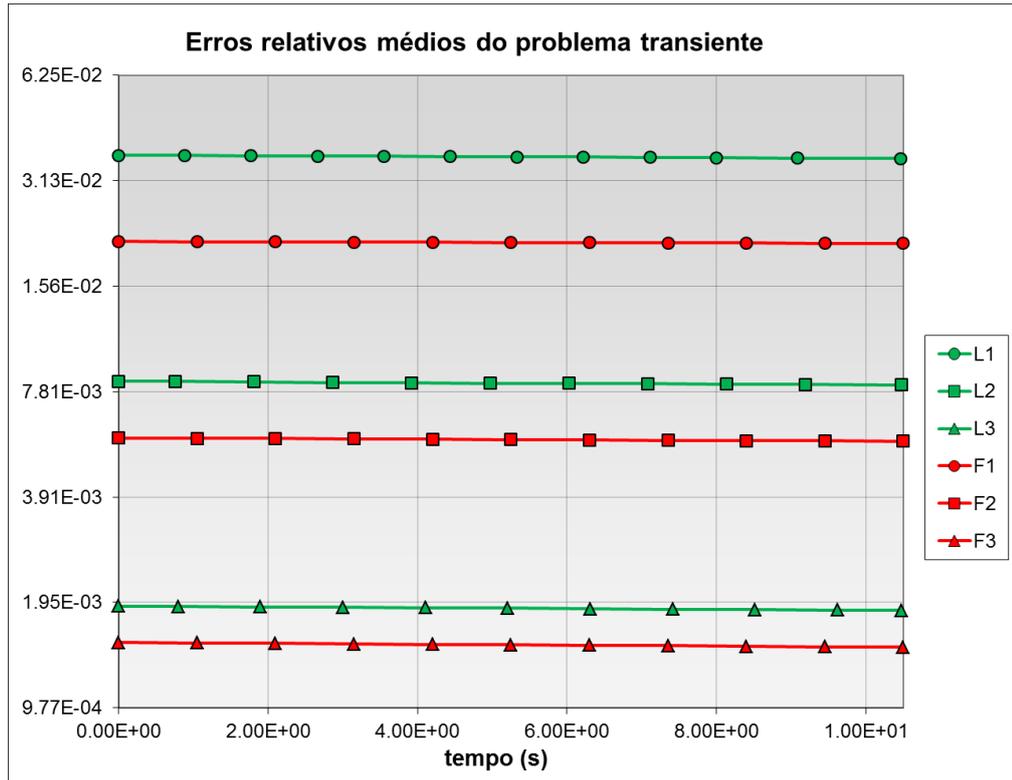


Figura 3.39: Erro relativo médio ao longo da simulação do problema transiente nas malhas indicadas das implementações do LBM (verde) e FEM (vermelho).

Na Tabela 3.6, resumimos os erros dos problemas estacionário (3.37) e transiente (3.38) para as malhas testadas.

Como nosso interesse é a comparação de acurácia e desempenho das implementações, vamos analisar o desempenho de ambos códigos no cluster Bull (ver Seção 3.6.2) com até 1008 núcleos de processamento. Primeiramente, testamos a escalabilidade forte do LBM com as malhas maiores (L3, L4, L5, L6), medindo o desempenho do código em MLUPS, conforme mostra a Figura 3.40. A malha L3 não apresenta boa escalabilidade com mais de 100 núcleos de processamento, enquanto a malha L4 escala bem até 500 núcleos e as outras malhas apresentam

Erros do Método de Elementos Finitos						
malha	F1	F2	F3	F4	F5	F6
$\ \bar{\mathbf{u}}(\cdot, 0)\ _{E_{med}}$	2,09E-2	5,76E-3	1,50E-3	3,76E-4	1,03E-4	3,48E-5
$\ \bar{\mathbf{u}}(\cdot, \cdot)\ _{E_{med}^T}$	2,08E-2	5,69E-3	1,48E-3	3,71E-4	1,02E-4	3,50E-5

Erros do Método de <i>lattice</i> Boltzmann						
malha	L1	L2	L3	L4	L5	L6
$\ \bar{\mathbf{u}}(\cdot, 0)\ _{E_{med}}$	3,69E-2	8,35E-3	1,90E-3	4,53E-4	1,10E-4	2,69E-5
$\ \bar{\mathbf{u}}(\cdot, \cdot)\ _{E_{med}^T}$	3,66E-2	8,25E-3	1,88E-3	4,47E-4	1,10E-4	2,69E-5

Tabela 3.6: Erros dos problemas estacionário e transiente nas malhas testadas.

boa escalabilidade com mais de 1000 núcleos.

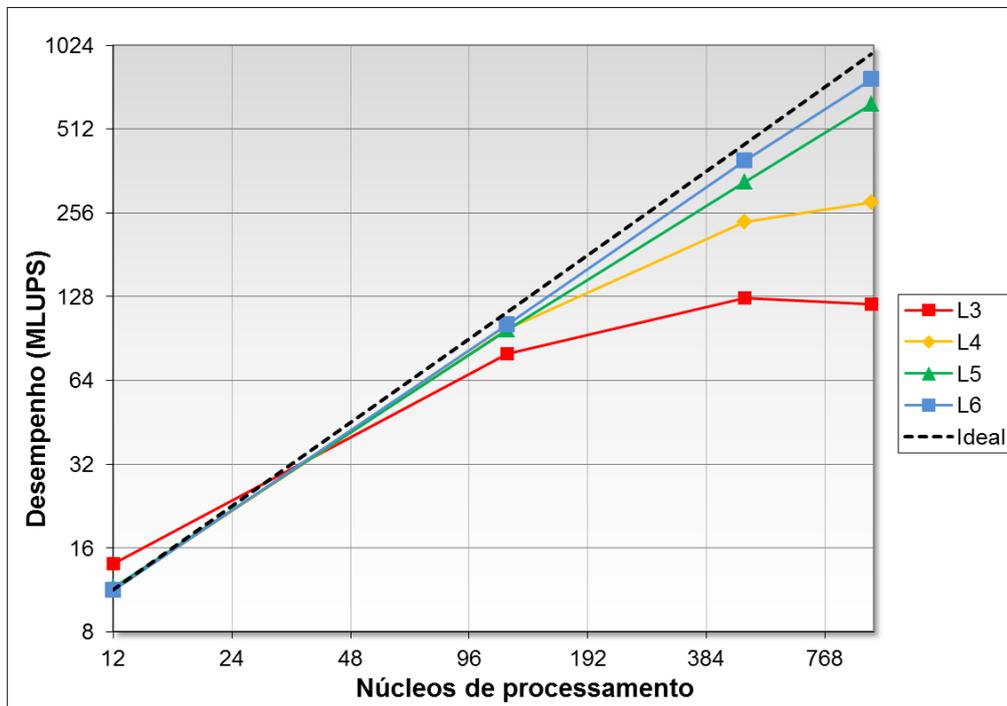


Figura 3.40: Escalabilidade forte da implementação do LBM no cluster Bull.

Para comparar a escalabilidade forte das duas implementações, mostramos na Figura 3.41 o tempo de parede para simular até o instante $T/100$ com as três maiores malhas, usando até 1008 núcleos de processamento. Observamos que a escalabilidade das malhas L4 e F4 passa a decair quando o número de núcleos cresce, sendo que a malha F4 teve escalabilidade um pouco melhor. Já as demais malhas apresentam melhor aproveitamento dos recursos, mostrando reduções significativas do tempo de simulação em todos os casos. Observe que na escalabilidade forte ideal o tempo de parede da simulação reduz linearmente

com o aumento do número de núcleos, isto é, neste gráfico seria a descida de uma linha horizontal para cada linha vertical do gride.

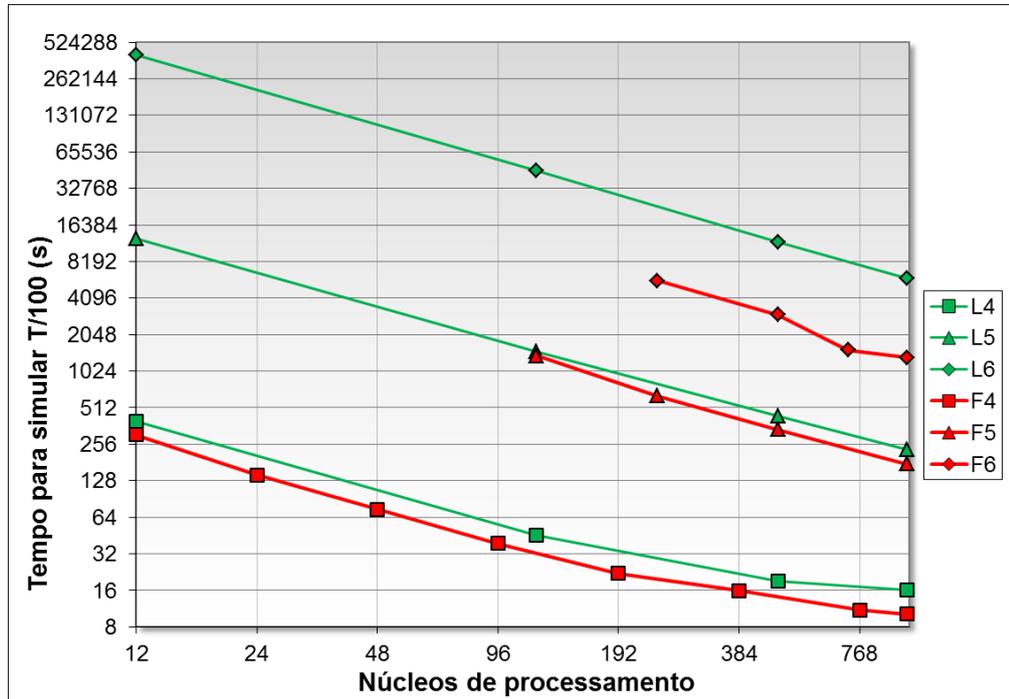


Figura 3.41: Tempo de parede da simulação de T/100 segundos do problema transiente para as malhas indicadas das implementações do LBM (verde) e FEM (vermelho).

Como as malhas das duas implementações são diferentes, vamos comparar na Figura 3.42 (direita) o tempo de parede da simulação até o instante T/100 em função do espaçamento (Δx), para 240, 480 e 1008 núcleos de processamento. Ali vemos que o LBM apresenta menores tempos em todos os casos com o mesmo espaçamento, o que é influenciado também pela quantidade menor de nós. Na figura da esquerda, comparamos o tempo de simulação em relação ao erro médio da solução (segundo a norma (3.38)). Neste caso o FEM apresenta tempos menores em todos os casos.

Como já vimos anteriormente, ambas implementações apresentam decaimento quadrático e boa escalabilidade forte para as malhas mais refinadas. Para completar esta análise de desempenho mostramos na Figura 3.43 a escalabilidade fraca das implementações, onde aumentamos o número de núcleos de processamento juntamente com o aumento do número de pontos das malhas.

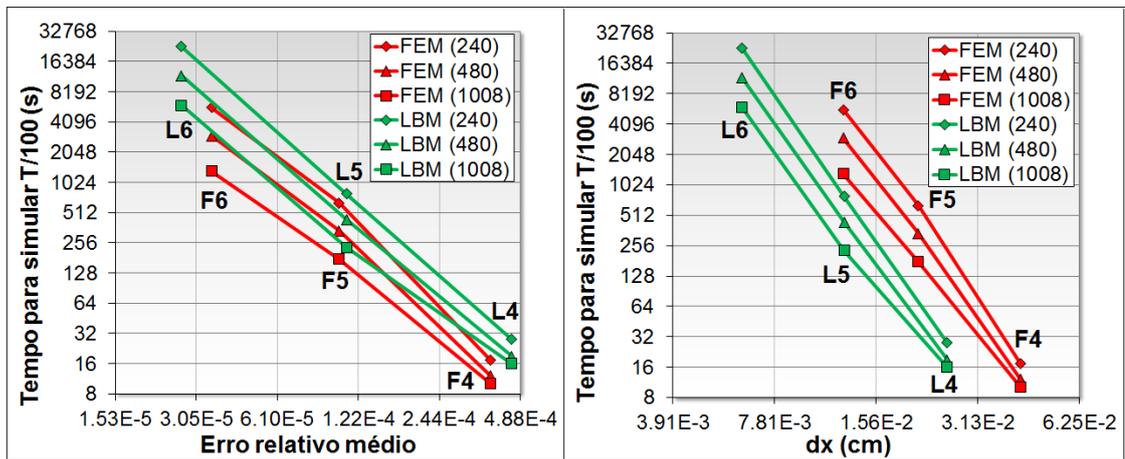


Figura 3.42: Tempos de parede da simulação até $T/100$ em relação ao erro relativo médio da solução (esquerda) e em relação ao espaçamento da malha (direita).

No caso do FEM o ideal seria um tempo de parede constante, pois o passo temporal é mantido constante com o refinamento. Porém, vemos que o tempo cresce pois o custo de resolução do sistema não cresce de forma linear com o aumento de pontos da malha. Para o LBM o caso ideal seria um aumento quadrático do custo, pois o número de passos temporais cresce quadraticamente (para manter a queda quadrática do erro). De fato, vemos um crescimento aproximadamente quadrático a partir da malha L4.

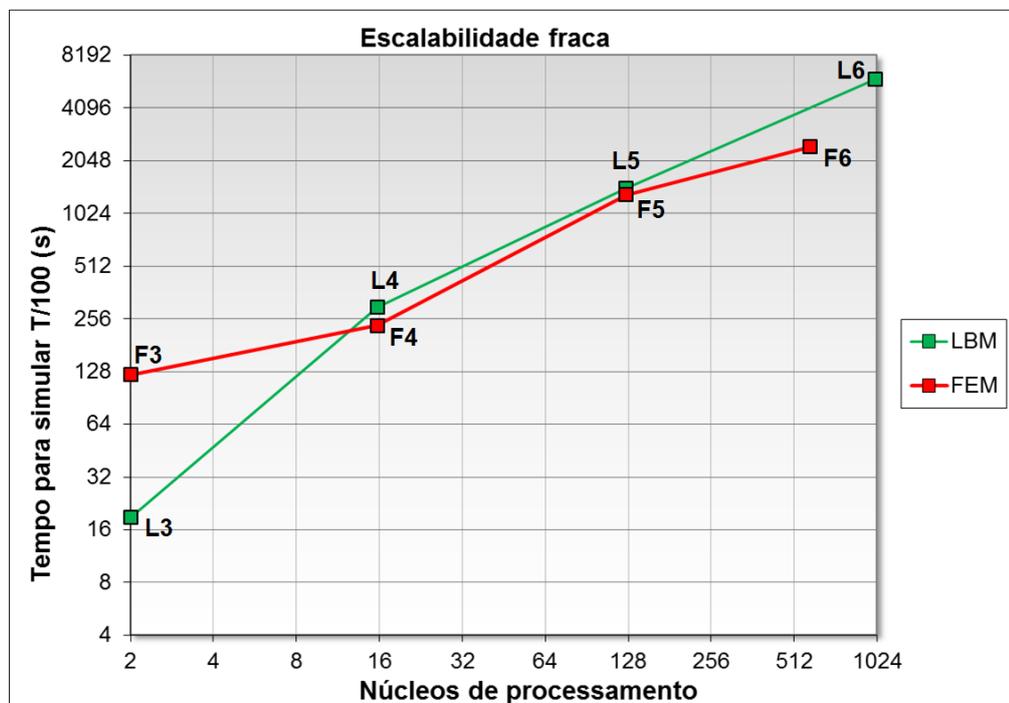


Figura 3.43: Escalabilidade fraca das implementações do LBM (verde) e FEM (vermelho) no cluster Bull.

Desta análise apresentada podemos concluir que o desempenho da implementação do LBM (com uma simplicidade muito maior de implementação, particionamento da malha e paralelização) consegue se aproximar do desempenho da implementação do FEM (código com anos de desenvolvimento e otimização no grupo e com o uso de pacotes específicos para o particionamento da malha (ParMETIS, glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview) e execução de rotinas paralelas (PETSc, www.mcs.anl.gov/petsc/)) para resolução de grandes sistemas de equações algébricas. Em geral, o desempenho do FEM foi um pouco melhor neste teste com até 1008 núcleos de processamento. Porém, o particionamento e a paralelização do LBM ainda podem ser bastante otimizados. De forma complementar, vimos na Seção 3.6.2 que o LBM apresentou excelente escalabilidade até 32768 núcleos de processamento, enquanto modificar o código do FEM para funcionar de forma eficiente, com esta quantidade de núcleos é uma tarefa desafiadora que exige um enorme esforço.

Contribuições do Capítulo

Neste capítulo analisamos de forma detalhada os parâmetros do LBM, com diversas aplicações voltadas para hemodinâmica, além de analisar a estabilidade, acurácia e desempenho do modelo escolhido. As principais contribuições do capítulo foram:

- a análise e indicação dos parâmetros numéricos adequados para a correta modelagem de escoamentos incompressíveis em aplicações e geometrias diversas;
- a modelagem e estudo de casos específicos do escoamento sanguíneo em vasos arteriais, expondo as problemáticas e desafios encontrados (Seção 3.4);
- a análise de estabilidade linear e o desenvolvimento de técnicas para se obter distribuições de equilíbrio que tornem o LBM mais estável (Seção 3.5);
- o estudo da escalabilidade da implementação paralela do LBM em dois clusters com características distintas e as orientações para o aumento de eficiência (Seções 3.6.1 e 3.6.2);
- a comparação de desempenho e acurácia entre as implementações do LBM e do FEM, destacando os aspectos positivos e negativos de cada modelo (Seção 3.6.3).

Capítulo 4

Modelagem de interações fluido-estrutura

Neste capítulo tratamos da modelagem da interação fluido-estrutura, sendo que o fluido será modelado pelo método de *lattice* Boltzmann (detalhado nos Capítulos 2 e 3). Para modelar a estrutura usamos um método do tipo Fronteira Imersa (IB), que será acoplado ao LBM de forma implícita ou explícita quando conveniente.

Começamos este capítulo revisando o desenvolvimento dos métodos para a modelagem de interações fluido-estrutura na Seção 4.1. Detalhando as equações contínuas e os métodos numéricos usados na Seção 4.2. Seguido de validações da implementação, com problemas clássicos de escoamentos incompressíveis em 2D e 3D, na Seção 4.3. Na sequência, modelamos a propagação de ondas de pressão em domínios tubulares bidimensionais e tridimensionais e investigamos os parâmetros numéricos na Seção 4.4. Visando a redução de custo computacional, analisamos na Seção 4.5 o uso de acoplamentos implícitos e explícitos para interação fluido-estrutura e o uso de passos temporais distintos para o problema do fluido e para o problema da estrutura, no caso explícito. Por fim, apresentamos uma estratégia para a modelagem de grandes variações da pressão hidrostática, como ocorre no sistema arterial, na Seção 4.6.

4.1 Introdução

A modelagem numérica da interação fluido-estrutura pode ser feita com malhas de fluido que se movam juntamente com a estrutura ou com malhas de fluido fixas. Como a versão do LBM escolhida utiliza malha fixa, vamos nos concentrar neste segundo grupo. Dentro deste grupo, podemos dividir os métodos de tratamento desta interface, de forma geral, em métodos de grade Cartesiana e métodos de fronteira imersa.

Nos métodos de grade Cartesiana, as células de fluido passam a ser cortadas pela estrutura. Estes métodos têm sido aplicados na resolução de problemas de escoamentos viscosos em 2D e 3D [Kirkpatrick et al. (2003), Russell e Jane Wang (2003)]. Porém, devido às estruturas irregulares das células cortadas, o cálculo dos fluxos nestas interfaces requer um tratamento complexo. Isto aumenta a complexidade da implementação e pode afetar sua eficiência computacional [Wu e Shu (2009)]. Zhou et al. (2007) propôs um método de grade Cartesiana eficiente, denominado *domain-free discretization* (DFD), para simular escoamentos compressíveis em torno de objetos móveis (estendendo-o posteriormente para 3D em Zhou e Shu (2012)). Neste método, a informação da interface é transferida para uma célula de fluido adjacente da estrutura através de interpolação de baixa ordem.

Os métodos de fronteira imersa (IBM) apresentam uma forma mais simples de modelar a interação entre fluido e estrutura. Neles, a estrutura com descrição Lagrangeana se encontra imersa no domínio do fluido, sem alterar sua malha ou cortar as células. O IBM foi introduzido por Peskin (1977), quando estudava o escoamento sanguíneo no coração humano. Desde então, diversas modificações e melhorias foram propostas [Goldstein et al. (1993), Goldstein et al. (1995), Kim et al. (2001), Lima E Silva et al. (2003)], tornando o método bastante aceito na comunidade científica. Recentemente, este é visto como um método geral para a modelagem computacional de sistemas biológicos interagindo com fluidos [Cheng e Zhang (2010)]. Uma lista detalhada com aplicações do IBM encontra-se no

Capítulo 1.

O acoplamento dos métodos de *lattice* Boltzmann (LB) e fronteira imersa (IB) tem sido explorado recentemente. Feng (2004) publicou pela primeira vez tal acoplamento, para a simulação da interação entre partículas e fluido. Mais tarde, Peng et al. (2006) melhorou este esquema usando um *lattice* multi-bloco e com múltiplos relaxamentos para aumentar a estabilidade e prover refinamento local da malha. Niu et al. (2006) aprimorou o cálculo da força imposta ao fluido. Shu et al. (2007) melhorou a convergência do esquema de acoplamento ao corrigir a velocidade imposta à estrutura. Enquanto estes trabalhos visavam a modelagem de objetos sólidos, Zhang et al. (2008) trabalhou na modelagem da agregação de hemácias e Zhu et al. (2011) propôs um esquema tridimensional para a modelagem de filamentos. Para aprimorar a modelagem de estruturas que se movam rapidamente, Cheng e Li (2007) propôs uma forma de acoplamento implícita, aumentando a robustez do esquema numérico.

Neste trabalho utilizamos um método acoplado LB-IB (*lattice* Boltzmann e fronteira imersa) baseado nos trabalhos de Shu et al. (2007) (acoplamento explícito) e Cheng e Li (2007) (acoplamento implícito), estendendo-os para problemas 3D com o uso de estruturas bidimensionais, ou seja, a parede arterial é considerada uma superfície no espaço 3D (e uma linha no espaço 2D). Esta escolha se deve ao grau de desenvolvimento atual e a simplicidade de implementação destes métodos, além dos vários exemplos de aplicações mencionados, possibilitando um amplo espectro de aplicações futuras.

As interações do tipo fluido-estrutura são essenciais para se modelar os fenômenos de propagação de ondas de pressão no sistema cardiovascular humano, fenômenos que ocorrem devido à capacidade de deformação dos vasos arteriais. Apesar da complexidade destes materiais biológicos, é possível modelar o comportamento das paredes arteriais, quando submetidas a valores de pressão fisiológicos, através de abordagens elásticas e isotrópicas [Weizsacker e Pinto (1988)]. Esta abordagem é viável, em especial, quando se deseja modelar o

fenômeno propagatório no sistema cardiovascular. Caso se deseje estudar as tensões produzidas dentro das paredes arteriais em casos gerais outras estratégias deverão ser utilizadas. Como dito, neste trabalho, por simplicidade, vamos modelar as paredes arteriais como fibras (em problemas 2D) ou membranas (em problemas 3D) elásticas sem massa e com uma relação constitutiva isotrópica na direção radial (porém quase rígida na direção axial). Desta forma, podemos calcular a força de reação destas estruturas através de medidas das deformações das mesmas.

4.2 Método acoplado de *lattice* Boltzmann e Fronteira Imersa

Nesta seção vamos detalhar a metodologia adotada para modelar as interações entre fluido e estrutura sólida capaz de sofrer deformações. Sendo o fluido modelado pelo método de *lattice* Boltzmann (LBM) e a estrutura modelada pelo método de Fronteira Imersa (IBM).

Partiremos do modelo contínuo (Seção 4.2.1), onde as equações de Navier–Stokes são acopladas às equações que descrevem o comportamento de um sólido elástico, no qual, por simplicidade, também são negligenciados os fenômenos inerciais, ou seja, a massa do mesmo é desprezada. Para, em seguida, detalharmos o modelo discretizado e as possíveis formas de acoplamento dos métodos mencionados (Seção 4.2.2).

4.2.1 Modelo contínuo

Descreveremos as estruturas sólidas de forma Lagrangeana, conforme o modelo de interação fluido-estrutura proposto por Feng (2004), representado na

macroescala contínua da seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Conservação de massa:} \\
 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \\
 \text{Conservação de momento linear com termo de força:} \\
 \rho(\mathbf{u}_t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}) = -\nabla p + \mu\Delta\mathbf{u} + \mathbf{f}, \\
 \text{Interação fluido} \rightarrow \text{estrutura (continuidade do campo de velocidade):} \\
 \frac{d\mathbf{X}(\mathbf{s}, t)}{dt} = \int_{\Omega_f} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\mathbf{s}, t))d\mathbf{x}, \\
 \text{Lei constitutiva da estrutura:} \\
 \mathbf{F}(\mathbf{s}, t) = \mathcal{S}_f(\mathbf{X}(\mathbf{s}, t)), \\
 \text{Interação estrutura} \rightarrow \text{fluido (equilíbrio de forças):} \\
 \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Gamma_b} \mathbf{F}(\mathbf{s}, t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(\mathbf{s}, t))d\mathbf{s},
 \end{array} \right. \quad (4.1)$$

onde p e μ são a pressão e viscosidade do fluido, \mathbf{f} representa o termo de força (descrição Euleriana) da estrutura sólida imersa atuando sobre o fluido, \mathbf{F} é força (descrição Lagrangeana) que a estrutura exerce, \mathbf{s} é o comprimento de fibra (ou a área) do segmento de estrutura, \mathcal{S}_f é a relação constitutiva da estrutura, δ é a função delta de Dirac, \mathbf{X} e \mathbf{x} representam a posição espacial dos nós da estrutura e do fluido e \mathbf{U} e \mathbf{u} suas respectivas velocidades. No sistema de equações acima utilizou-se letras minúsculas para as variáveis Eulerianas (fluido) e letras maiúsculas para as Lagrangeanas (estrutura).

Repare que no sistema (4.1) já indicamos como ocorrerão as interações entre o fluido e a estrutura no método acoplado apresentado em seguida. Isto é, em um esquema de acoplamento iterativo a estrutura se moverá com a velocidade do fluido e a força de reação da estrutura será aplicada no fluido.

A força de reação à deformação da estrutura obedece uma relação constitutiva que pode conter, por exemplo, coeficientes de tensão (k_t), de flexão (k_b), do tipo

mola (k_f), entre outros, conforme mostra a equação abaixo:

$$\mathbf{F} = k_t \frac{\partial^2 \mathbf{X}}{\partial s^2} - k_b \frac{\partial^4 \mathbf{X}}{\partial s^4} - k_f (\mathbf{X} - \mathbf{Z}), \quad (4.2)$$

onde \mathbf{Z} é uma posição de referência. No caso de estruturas bidimensionais, \mathbf{F} passa a ser um vetor tridimensional e as derivadas são calculadas sobre o plano tangente local da estrutura. Entretanto, outros modelos mais complexos podem ser empregados, dado que o algoritmo desenvolvido a seguir independe deste aspecto.

4.2.2 Acoplamento entre os métodos LB e IB

O método acoplado LB-IB consiste no acoplamento entre a equação de *lattice* Boltzmann (2.8) e a versão discretizada da equação constitutiva da estrutura (ver equação (4.2)). Usando diferenças finitas centrais podemos aproximar a equação constitutiva da estrutura, considerando uma fibra unidimensional, da forma:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}_j) = k_t \frac{\mathbf{X}_{j-1} - 2\mathbf{X}_j + \mathbf{X}_{j+1}}{\Delta s_j^2} - k_b \frac{\mathbf{X}_{j-2} - 4\mathbf{X}_{j-1} + 6\mathbf{X}_j - 4\mathbf{X}_{j+1} + \mathbf{X}_{j+2}}{\Delta s_j^4} - k_f (\mathbf{X}_j - \mathbf{Z}_j), \quad (4.3)$$

podendo ser estendida para estruturas bidimensionais, como comentado anteriormente.

Na versão discreta do sistema (4.1) a força de reação da estrutura (\mathbf{F}) é mapeada para o fluido (como \mathbf{f}) através de interpolações que fazem uso de uma função δ_h discreta que aproxima δ quando $h \rightarrow 0$ [Cheng e Li (2007)]. Na Figura 4.1 ilustramos este mapeamento, onde \mathbf{f}^* é a contribuição de força do nó \mathbf{X}_j da estrutura para cada célula do fluido (dependente do vetor de distância \mathbf{d}) dentro do suporte da função δ_h . Sendo que o mapeamento das velocidades das células de fluido para os nós da estrutura é feito com o uso da mesma função δ_h . A forma

que adotamos para δ_h é como segue [Cheng e Li (2007)]:

$$\delta_h(\mathbf{d}) = \prod_{\alpha=1}^{\dim} \left[\frac{1}{\Delta x} \phi \left(\frac{d_\alpha}{\Delta x} \right) \right], \quad (4.4)$$

onde \dim representa a dimensão do domínio espacial do problema e definimos a função

$$\phi(r) \begin{cases} \frac{1}{8} \left(3 - 2|r| + \sqrt{1 + 4|r| - 4r^2} \right), & 0 \leq |r| < 1, \\ \frac{1}{8} \left(5 - 2|r| - \sqrt{-7 + 12|r| - 4r^2} \right), & 1 \leq |r| < 2, \\ 0, & |r| \geq 2, \end{cases} \quad (4.5)$$

onde $r = d_\alpha/\Delta x$.

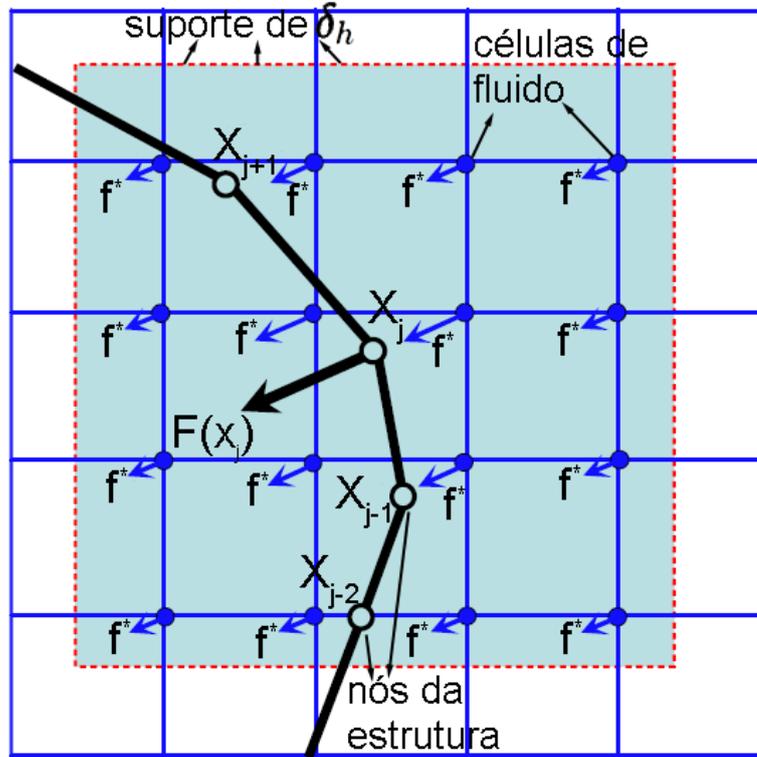


Figura 4.1: Ilustração do mapeamento da força de um nó da estrutura para as células de fluido vizinhas.

Como queremos incluir esta força na equação de *lattice* Boltzmann (2.8), temos que distribuí-la nas direções características do *lattice*, dentro de cada célula. Esta distribuição tem que ser feita de forma que recuperemos as equações de Navier-Stokes com termo de força (ver equações (4.1)). O termo de força atuando na direção \mathbf{e}_k do *lattice* será denominado $g_k(\mathbf{x}, t)$ e calculado da forma [Cheng e Li

(2007)]:

$$g_k(\mathbf{x}, t) = 3\omega_k \{ \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \cdot [(\mathbf{e}_k - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) + 3(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))\mathbf{e}_k] \}, \quad k = 1, \dots, \ell. \quad (4.6)$$

Diversos autores [Feng (2004), Shu et al. (2007), Dupuis et al. (2008)] incluem o termo de força de forma explícita, resultando na seguinte variação da equação de *lattice* Boltzmann (2.8):

$$f_k(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_k, t + \Delta t) - f_k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau} [f_k^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_k(\mathbf{x}, t)] + \Delta t g_k(\mathbf{x}, t), \quad k = 1, \dots, \ell. \quad (4.7)$$

Este tipo de formulação explícita serve para estruturas que se deformem lentamente, pois o termo de força é de primeira ordem de convergência [Cheng e Li (2007)].

Quando se deseja modelar estruturas que se movam rapidamente ou que sejam expostas a grandes gradientes de pressão (como, por exemplo, as válvulas cardíacas) é mais recomendado que se utilizem métodos de mais alta ordem. Em Cheng e Li (2007) introduziu-se um método de segunda ordem, onde o termo de força torna a equação implícita:

$$f_k(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_k, t + \Delta t) - f_k(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau} [f_k^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_k(\mathbf{x}, t)] + \frac{\Delta t}{2} [g_k(\mathbf{x}, t) + g_k(\mathbf{x} + \Delta x \mathbf{e}_k, t + \Delta t)], \quad k = 1, \dots, \ell. \quad (4.8)$$

O sistema implícito formado por esta equação e pelas demais equações de acoplamento e da estrutura, pode ser resolvido de diferentes formas. Aqui optamos por uma abordagem iterativa do tipo Gauss-Seidel, ou seja, em cada passo temporal iteramos entre a resolução de um passo do LBM e da fronteira imersa até que se atinja uma convergência, utilizando as informações mais recentes disponíveis. Na Figura 4.2 expomos um fluxograma com as etapas do método acoplado LB-IB implícito. Mais detalhadamente, mostramos na equação (4.9a) a

etapa (B) que mapeia as velocidades das células de fluido para os nós da estrutura, na equação (4.9b) a etapa (C) que movimenta os nós da estrutura, na equação (4.9c) a etapa (D) que calcula a força em cada nó da estrutura, na equações (4.9d) e (4.9e) a etapa (E) que mapeia as forças da estrutura para as células de fluido, na equação (4.9f) a etapa (G) que calcula a colisão nas células com o termo de força, na equação (4.9g) a etapa (H) que propaga as partículas no *lattice* do fluido e a etapa (F) impõe as condições de contorno conforme detalhado na Seção 2.5. Seguem abaixo as equações mencionadas:

$$\mathbf{U}_j^{n,m} = \sum_i \mathbf{u}_i^{n,m-1} \delta_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_j^{n,m-1}) \Delta x^{\dim}, \quad (4.9a)$$

$$\mathbf{X}_j^{n,m} = \mathbf{X}_j^{n-1} + \Delta t \mathbf{U}_j^{n,m}, \quad (4.9b)$$

$$\mathbf{F}_j^{n,m} = \mathcal{S}_f(\mathbf{X}_j^{n,m}), \quad (4.9c)$$

$$\mathbf{f}_j^{n,m} = \sum_j \mathbf{F}_j^{n,m} \delta_h(\mathbf{x}_i - \mathbf{X}_j^{n,m}) \Delta s_j, \quad (4.9d)$$

$$g_{k,i}^{n,m} = 3\omega_k \mathbf{f}_j^{n,m} \cdot [(\mathbf{e}_k - \mathbf{u}_i^{n,m-1}) + 3(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{u}_i^{n,m-1})\mathbf{e}_k], \quad (4.9e)$$

$$\tilde{f}_{k,i}^{n,m} = \frac{1}{\tau} [f_{k,i}^{\text{eq},n-1} - f_{k,i}^{n-1}] + \frac{\Delta t}{2} [g_{k,i}^{n-1} + g_{k,i_k}^{n,m}], \quad (4.9f)$$

$$f_{k,i_k}^{n,m} = \tilde{f}_{k,i}^{n,m}, \quad (4.9g)$$

onde o subíndice $i = 1, \dots, N_C$ (N_C é o número de células) se refere à célula de fluido na posição \mathbf{x}_i (sendo que i_k se refere à célula na posição $\mathbf{x}_{i_k} = \mathbf{x}_i + \Delta x \mathbf{e}_k$), o subíndice $k = 1, \dots, \ell$ se refere à componente nesta direção do *lattice*, o subíndice j, \dots, N_N (N_N é o número de nós da estrutura) se refere ao nó da estrutura na posição \mathbf{X}_j , o superíndice n se refere ao instante de tempo $t_n = t_0 + n\Delta t$, o superíndice m se refere ao número da iteração entre o fluido e a estrutura e assumimos a seguinte condição inicial para as iterações $(\cdot)^{n,m=0} = (\cdot)^{n-1}$.

A condição de convergência das forças de reação da estrutura em cada loop

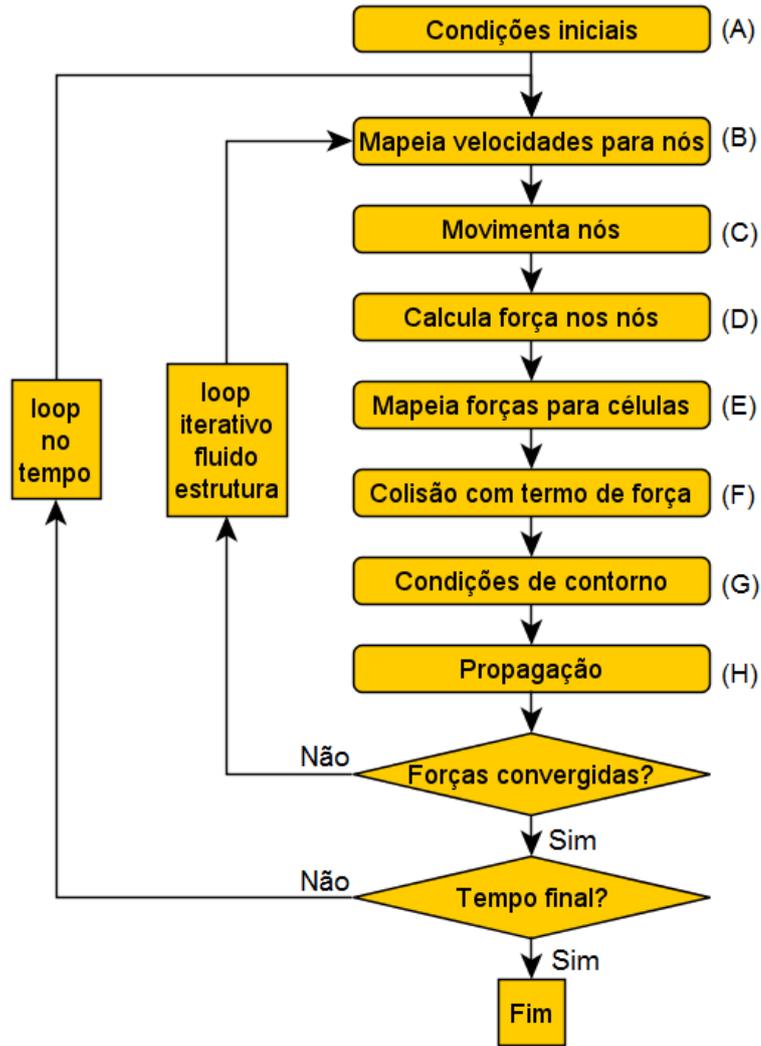


Figura 4.2: Fluxograma das rotinas do método acoplado LB-IB implícito com iterações sucessivas do método de Gauss–Seidel.

iterativo é a seguinte (ver norma (3.5)):

$$\|\mathbf{F}^{m-1} - \mathbf{F}^m\|_{l^2/l^2} < \varepsilon, \quad (4.10)$$

onde nos experimentos deste trabalho assumimos $\varepsilon = 10^{-4}$.

Optamos por implementar este modelo no presente trabalho por apresentar uma aproximação de segunda ordem. Mas, também implementamos a versão explícita, com a equação de *lattice* Boltzmann apresentada na equação (4.7), pois para certos problemas o número de iterações fluido-estrutura é próximo de 1. O fluxograma para a versão explícita é o mesmo da Figura 4.2, porém sem o loop

iterativo e a verificação de convergência das forças. Verificamos que há casos em que podemos inclusive usar um passo temporal maior para estrutura, atualizando o movimento da estrutura somente a cada M passos do fluido, como discutido na Seção 4.4.2.

Um pseudo-código detalhado da implementação do método acoplado LB-IB é descrito no Apêndice A. Onde também mostramos as otimizações de busca, de uso e acesso de memória e de uso de processamento feitas para aumentar o desempenho da implementação.

4.3 Validações e exemplos numéricos

Nesta seção apresentamos a modelagem de dois problemas com fins de validação da implementação do método acoplado de *lattice* Boltzmann (LB) e Fronteira Imersa (IB).

No primeiro problema simulamos em 2D uma membrana pressurizada esticada imersa em um fluido viscoso, onde temos intensas interações entre o fluido e a fronteira e um salto abrupto de pressão sobre a fronteira (Seção 4.3.1).

O segundo problema representa o problema clássico escoamento de Womersley em 3D, onde a parede do tubo cilíndrico é modelada pela fronteira imersa de forma quase rígida (Seção 4.3.2).

4.3.1 Membrana pressurizada com deformação inicial

Modelamos nesta seção uma membrana pressurizada com deformação inicial imersa em um fluido viscoso (problema proposto por Cheng e Zhang (2010)). Este caso teste foi escolhido por apresentar intensas interações entre o fluido e a fronteira e um salto abrupto de pressão sobre a fronteira, além de ser um caso de interesse para a medição de vazamentos através da fronteira fechada. O problema consiste em modelar uma fibra fechada sem massa (conforme exposto na Figura 4.3) que possui uma deformação inicial para assumir um formato elíptico, com os eixos maior e menor definidos por $r_x = 0,75$ cm, $r_y = 0,5$ cm, respectivamente. A lei

constitutiva que descreve a força de fronteira da membrana é determinada pela sua configuração local, conforme:

$$\mathbf{F} = k_t \frac{\partial^2 \mathbf{X}}{\partial s^2}, \quad (4.11)$$

onde k_t é o coeficiente de rigidez de tensão da fibra. Devido às forças de restauração da estrutura elástica e à reação do fluido contido, a forma da membrana deve convergir para um estado estacionário de equilíbrio (alcançando a forma circular) depois de um período de oscilações do comprimento e formato da fibra e da pressão do fluido contido.

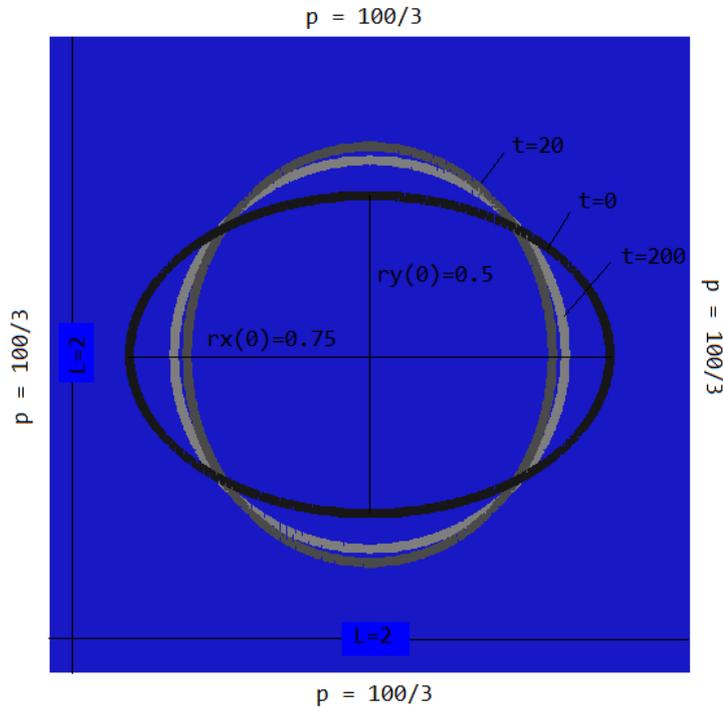


Figura 4.3: Ilustração da geometria da membrana esticada imersa em 2D e suas deformações nos instantes 0s, 20s e 200s.

Os parâmetros do problema proposto são (conforme propostos por Cheng e Zhang (2010)) $\rho_0 = 1 \text{ g/cm}^3$, $k_t = 0,02 \text{ g cm}^2/\text{s}^2$, $\nu = 0,002 \text{ cm}^2/\text{s}$, a condição de contorno é $p = (100/3) \text{ dyn/cm}^2$ e a condição inicial é a mesma pressão com velocidade $\mathbf{u} = 0$. É importante destacar que a distribuição de equilíbrio usada no presente trabalho visa minimizar os efeitos de compressibilidade, portanto a área definida pela membrana fechada (e a massa) deve apresentar oscilações pequenas. De fato, até a simulação atingir o estado estacionário esta área muda menos de

0,32%. Portanto, o vazamento de fluido é desprezível neste caso.

Na Figura 4.4 apresentamos as variações dos raios horizontal e vertical da membrana até a simulação atingir a fase estacionária. Aqui observamos a igualdade dos raios (formato circular da membrana) após o período oscilatório.

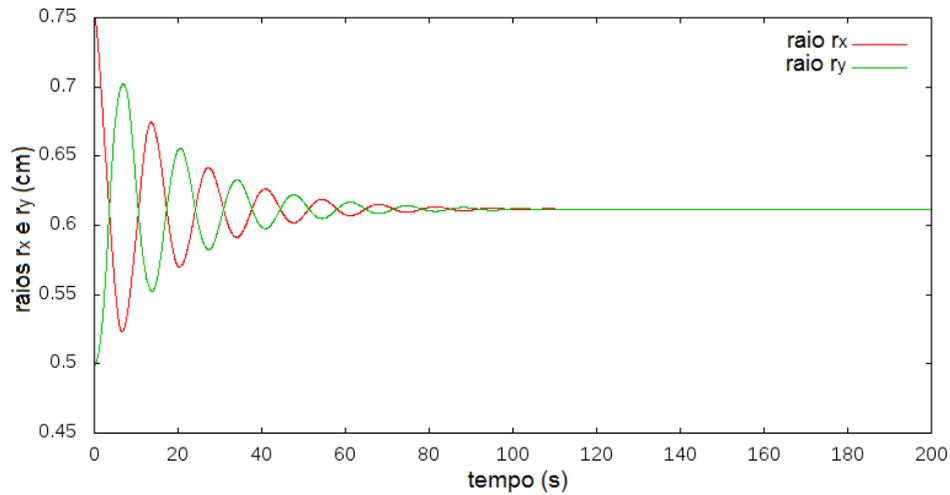


Figura 4.4: Variação dos dois raios da membrana imersa até a fase estacionária.

A pressão no centro do domínio é apresentada na Figura 4.5 até atingir o estado estacionário. Onde percebemos que a pressão (e a densidade) apresentam uma variação de menos de 0,1%, ou seja, o fluido se comportou como quase incompressível.

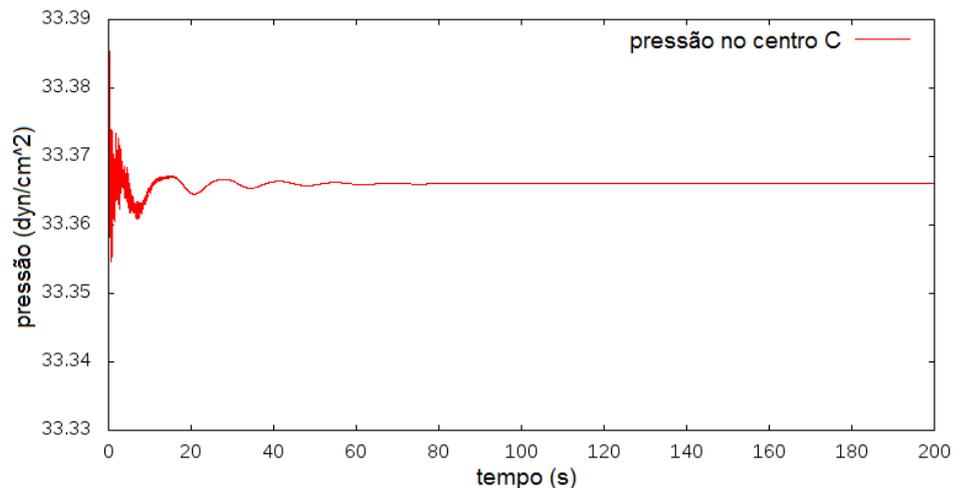


Figura 4.5: Oscilações de pressão no ponto central C até a fase estacionária.

Os resultados desta simulação não foram comparados com os apresentados no trabalho de Cheng e Zhang (2010) (onde o problema foi proposto) porque o objetivo

deles foi simular um escoamento compressível, onde a área contida no interior da membrana oscila em até 10%. Enquanto, no presente trabalho, visamos modelar um escoamento incompressível, no qual durante a fase transiente do problema a área contida pela membrana varia menos de 1%.

4.3.2 Escoamento de Womersley em 3D

Nesta seção apresentamos uma validação da implementação do método acoplado LB-IB através da modelagem do escoamento de Womersley tridimensional (ver Seção 3.3.2). Neste problema, o fluido no interior de um tubo cilíndrico se move devido à oscilação do gradiente de pressão entre a entrada e a saída do mesmo. Neste problema não há interações significativas entre fluido e estrutura, como no caso anterior, porém a modelagem de objetos rígidos é bastante utilizada na literatura para validação de implementações de fronteiras imersas (Lima E Silva et al. (2003), Le et al. (2008), Meyer et al. (2010), Chaudhuri et al. (2011)). Verificaremos que não há vazamentos pela estrutura (estendida para duas dimensões), além de verificar sua correta implementação.

Para modelar as paredes do tubo cilíndrico de forma quase rígida vamos utilizar uma fronteira imersa bidimensional fechada (como mostrado em vermelho na Figura 4.6) com relação constitutiva da forma:

$$\mathbf{F} = k_f(\mathbf{Z} - \mathbf{X}), \quad (4.12)$$

onde \mathbf{Z} é a configuração inicial (com pressão interna igual à externa) e o coeficiente de elasticidade k_f é grande o suficiente para que as variações de pressão causem movimentos desprezíveis na estrutura. Para representar esta estrutura, estendemos o modelo unidimensional de fibras [Cheng e Li (2007)] para malhas bidimensionais com quatro conexões por nó e incluímos a coordenada \mathbf{z} no cálculo de δ_h (equação (4.4)). Aqui o volume externo é definido por uma caixa retangular que envolve o vaso, pois o modelo de imposição de pressão foi projetado para superfícies planas. Uma pressão de referência é imposta nas fronteiras paralelas aos planos

XY e XZ .

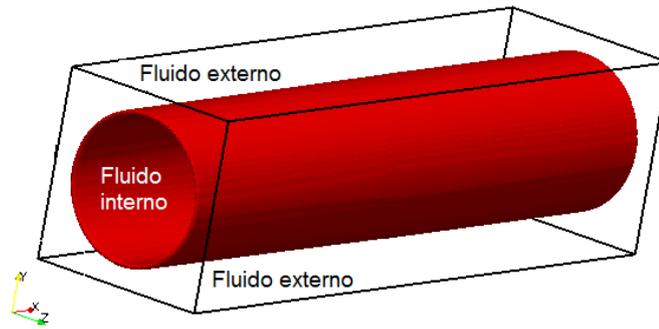


Figura 4.6: Ilustração da geometria do problema tridimensional do escoamento de Womersley com paredes modeladas por fronteira imersa.

Para este teste, resolvemos simular o escoamento de Womersley em um tubo com relação de aspecto $4/1$, $Re = 100$ e $Wo = 5$. Os perfis de velocidade tridimensionais são mostrados na Figura 4.7 sobre o corte axial do tubo em três instantes de tempo da simulação. Podemos observar que os perfis se mantêm constantes ao longo do tubo e que as paredes do mesmo (representadas pelas linhas vermelhas) não se deslocam com a oscilação da pressão no seu interior.

Na Figura 4.8 apresentamos os fluxos de entrada (vermelho) e saída (verde) da solução numérica no tubo com paredes quase rígidas comparados com a solução analítica (azul) do escoamento de Womersley (ver equação (3.16)). Onde observamos que a diferença entre os fluxos de entrada e saída é desprezível e o fluxo obtido pela implementação numérica aproxima-se consistentemente da solução analítica ao longo dos ciclos, apesar da condição inicial distinta.

Daqui concluímos que a fronteira imersa também pode ser utilizada para a modelagem de condições de contorno de velocidade nula sobre superfícies arbitrárias no interior do domínio modelado. Porém, a simulação numérica apresentada neste exemplo teve um custo computacional maior do que as apresentadas na Seção 3.3.2, onde modelamos a parede do tubo cilíndrico através de condições de contorno do LBM. Pois, neste caso, além do custo adicionado pela interação entre a fronteira imersa e o fluido temos que simular o fluido externo que se encontra a pelo menos duas células de distância da fronteira imersa.

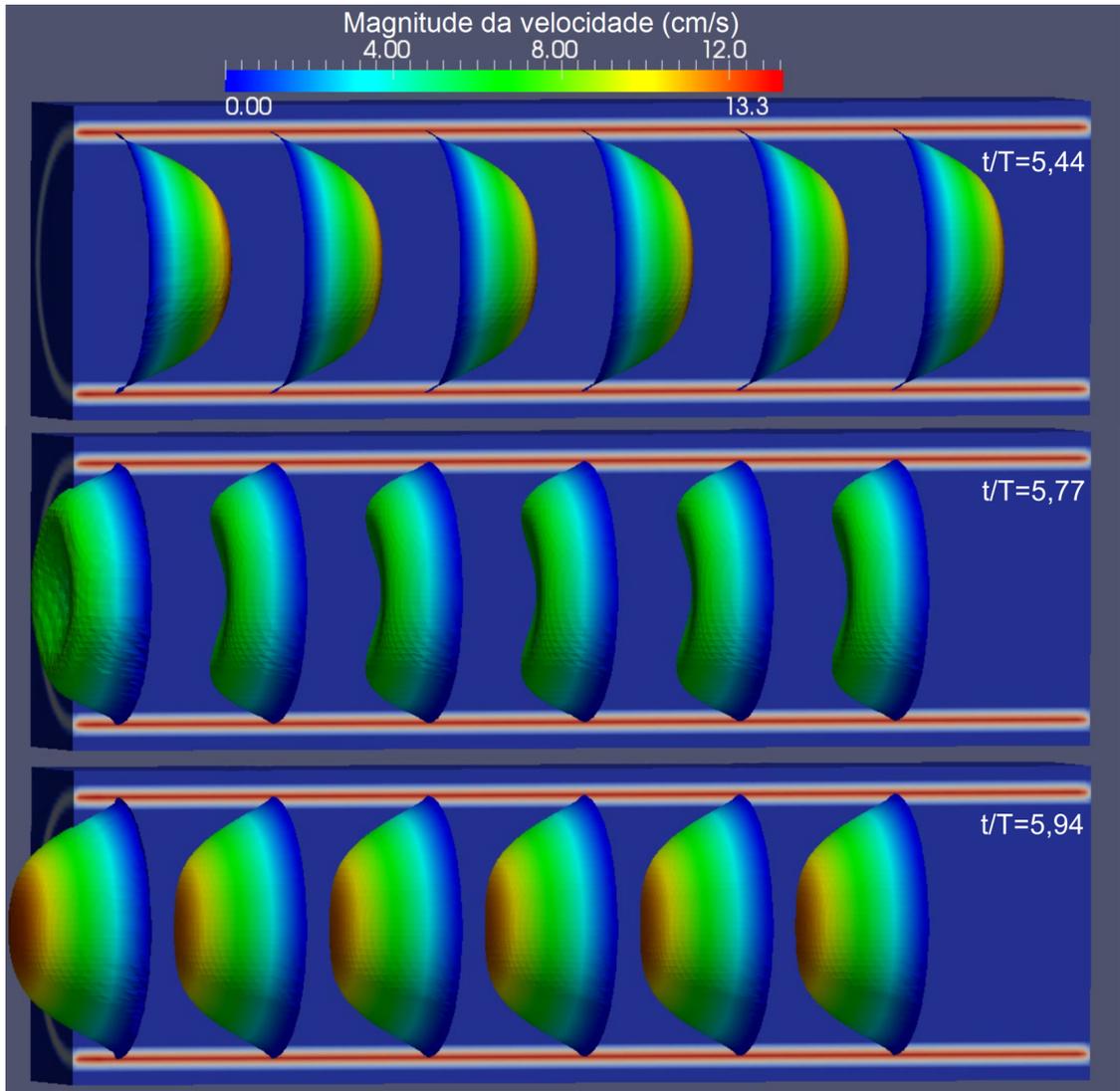


Figura 4.7: Corte axial do tubo, mostrando os perfis de velocidade tridimensionais de 3 instantes do escoamento de Womersley com paredes do vaso quase rígidas modeladas por Fronteira Imersa.

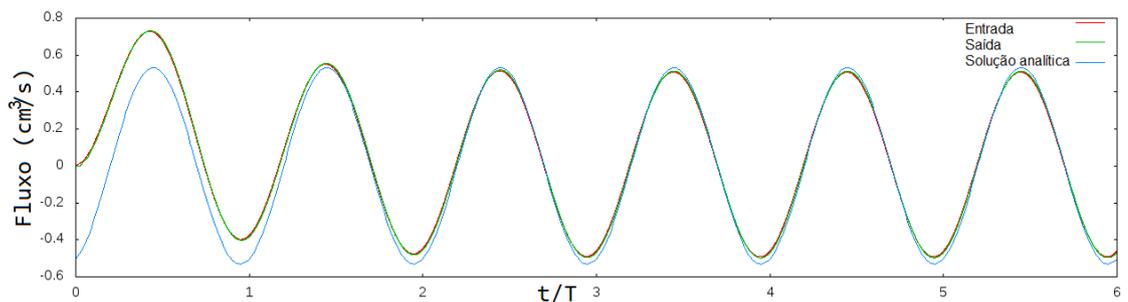


Figura 4.8: Fluxos de entrada (vermelho) e saída (verde) da solução numérica no tubo com paredes quase rígidas comparados com a solução analítica (azul) do escoamento de Womersley em 3D.

4.4 Propagação de ondas de pressão em vasos

Nesta seção apresentamos a modelagem da propagação de ondas de pressão em vasos bidimensionais e tridimensionais. Este problema é de interesse na área de hemodinâmica pois a propagação de ondas nas artérias do SCVH é um fenômeno que possui um papel fundamental na resposta sistêmica. Além disso, com estas implementações podemos explorar melhor os novos parâmetros introduzidos pelo método acoplado LB-IB.

Na Seção 4.4.1 apresentamos o caso bidimensional da propagação de ondas de pressão em um canal com paredes definidas por duas fibras de fronteira imersa. Na Seção 4.4.2 modelamos a versão 3D do problema em um tubo cilíndrico modelado por uma fronteira imersa bidimensional fechada.

4.4.1 Propagação de ondas de pressão em 2D

O problema de propagação de ondas de pressão em 2D acontece em um canal com paredes deformáveis. A onda de pressão é induzida por um fluxo de comprimento de onda curto na entrada no canal, que aumenta a pressão nesta extremidade e forma a onda que se propaga pelo mesmo. As paredes são modeladas por duas fibras imersas sem massa, como mostrado na Figura 4.9. A área externa permite que as paredes se movam (juntamente com os fluidos interno e externo) e nas fronteiras superior e inferior uma pressão de referência é imposta. Enquanto que na saída do canal a condição de velocidade nula é imposta para termos conservação da massa contida no canal após o fluxo de entrada inicial. O fluxo de entrada obedece um perfil parabólico com velocidade máxima dada por:

$$u_{max}(t) = \begin{cases} U \frac{D_i}{D(t)} \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right), & t \leq T, \\ 0, & t > T, \end{cases} \quad (4.13)$$

onde $U = 93,33$ cm/s, $D_i = 0,015$ cm é o diâmetro inicial do canal, $D(t)$ é o diâmetro da entrada no instante de tempo t e o período do fluxo de entrada é T

$= 2,805 \times 10^{-4}$ s. O fluido é caracterizado por $\rho_0 = 1,05$ g/cm³ e $\nu = 0,035$ cm²/s e o escoamento por $Re = 40$.

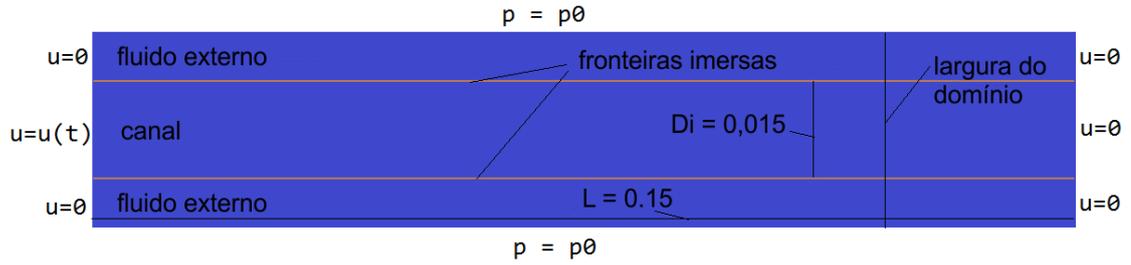


Figura 4.9: Ilustração da geometria do problema bidimensional de propagação de ondas de pressão.

A lei constitutiva que descreve a força de fronteira das fibras imersas depende do deslocamento da configuração de referência (\mathbf{Z}), conforme:

$$\mathbf{F} = \mathbf{K}_f(\mathbf{Z} - \mathbf{X}), \quad (4.14)$$

onde \mathbf{X} representa a configuração atual e \mathbf{K}_f é a matriz que representa os coeficientes de elasticidade k_f na direção normal e $10k_f$ na direção transversal.

No primeiro exemplo usamos $k_f = 1 \times 10^7$ g/s² na direção radial. Na direção axial sempre utilizaremos um valor 10 vezes maior para evitar deslocamentos nesta direção. Exibimos na Figura 4.10 o formato e o deslocamento da onda de pressão ao longo do canal (calculados sobre um linha axial pelo centro do canal), em quatro instantes de tempo. Observamos que a onda apresenta uma leve difusão de pressão ao longo de sua trajetória, devido à viscosidade do fluido. Além disso, podemos notar no instante $t/T = 2$ uma reflexão criada pelo fechamento da entrada do canal.

A Figura 4.11 mostra a posição do topo da onda de pressão ao longo de dois períodos, a partir da qual podemos medir sua velocidade de propagação (denominada c_w). Além disso, esta figura mostra a mudança na velocidade da onda quando o coeficiente de elasticidade (k_f) muda. Quanto maior for k_f , mais rígidas são as paredes do vaso e a velocidade da onda cresce. Estimaremos a relação entre o coeficiente de elasticidade e a velocidade da onda no caso tridimensional,

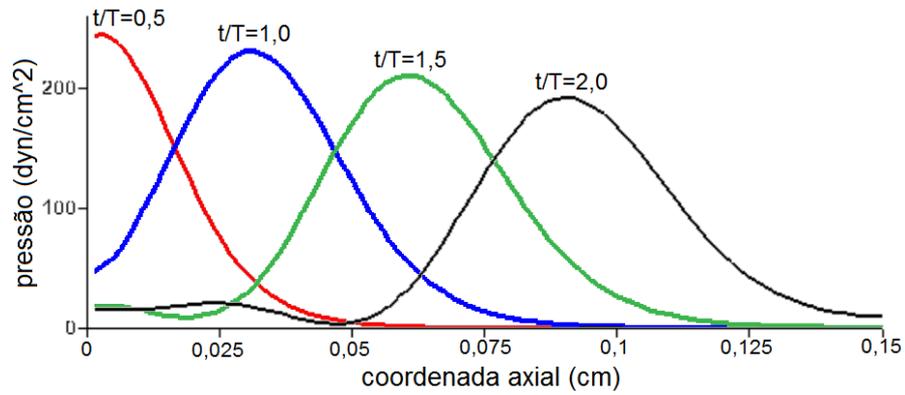


Figura 4.10: Formato da onda de pressão ao longo do canal em quatro instantes de tempo (indicados pelas cores) com $k_f = 1 \times 10^7 \text{g/s}^2$.

apresentado na Seção 4.4.2.

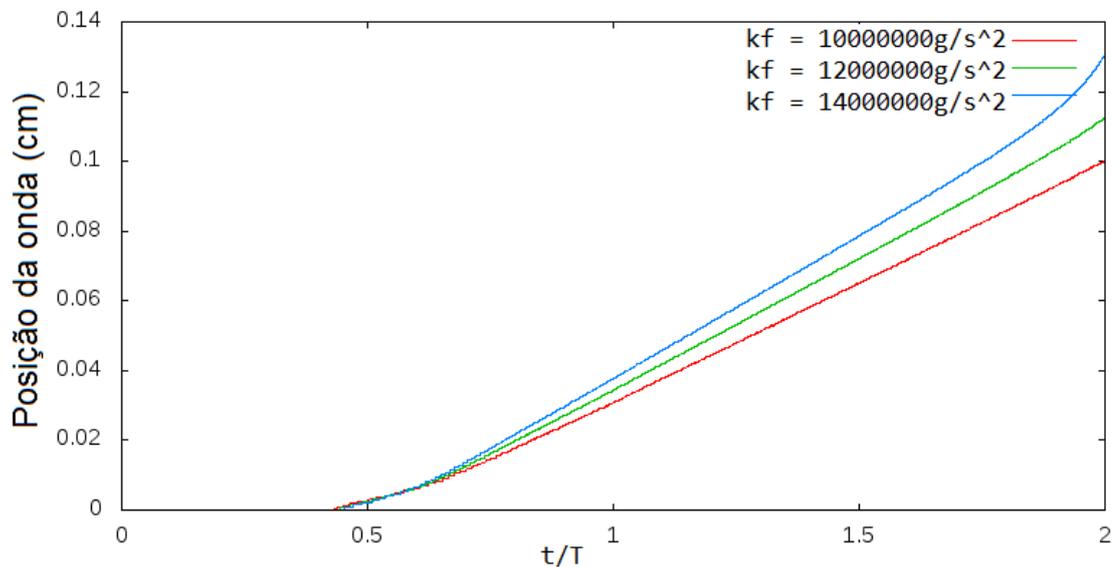


Figura 4.11: Deslocamento da onda de pressão ao longo de dois períodos para simulações com $k_f = 1 \times 10^7 \text{g/s}^2$, $1.2 \times 10^7 \text{g/s}^2$ e $1.4 \times 10^7 \text{g/s}^2$.

De fato, o efeito do fluido externo é uma consequência da abordagem e não representa a realidade do problema, por isso queremos estudá-lo. A Tabela 4.1 mostra a velocidade da onda de pressão para diferentes larguras do domínio (mantendo o diâmetro do canal fixo) e diferentes valores de k_f . Perceba que a velocidade da onda aumenta quando k_f aumenta e, além disso, a velocidade da onda é afetada pelo tamanho da área externa. Quando a largura do domínio aumenta a massa de fluido externa também aumenta e, com isso, aparece um efeito de dissipação viscosa na parede que afeta a velocidade da onda de pressão. Como esta área externa tem um papel auxiliar na modelagem do problema, esta

deve ser a menor possível e a velocidade de onda fica caracterizada exclusivamente como função de k_f . É importante ressaltar que a velocidade da onda de pressão é uma informação que pode ser usada para caracterizar a parede arterial.

k_f (g/s ²)	largura do domínio (cm)	velocidade da onda (cm/s)
10000000	$1.5D_i$	256.5
10000000	$2.0D_i$	249.0
10000000	$4.0D_i$	230.6
12000000	$2.0D_i$	268.3
14000000	$2.0D_i$	292.2

Tabela 4.1: Velocidade de propagação da onda de pressão em um canal bidimensional com diferentes coeficientes k_f e larguras do domínio.

Como teste complementar, verificamos a influência que a proporção entre o espaçamento das células do fluido (Δx) e o espaçamento dos nós da estrutura (Δs) exerce na simulação. O valor comumente usado é $\Delta x/\Delta s = 4$, visto que o limite teórico é 2 [Cheng e Li (2007)]. Por isso, resolvemos testar $\Delta x/\Delta s = 3$ e notamos que a mudança nos resultados é desprezível se comparado com o caso em que $\Delta x/\Delta s = 4$. Mas, ao testar $\Delta x/\Delta s = 2$ o vazamento de fluido através das fronteiras imersas se tornou significativa. Portanto, como a relação $\Delta x/\Delta s = 3$ representa um número menor de nós da estrutura que a relação $\Delta x/\Delta s = 4$ (o que reduz o custo computacional e o uso de memória), vamos adotar este valor para as próximas simulações.

4.4.2 Propagação de ondas de pressão em 3D

Este problema é semelhante ao anterior, com a diferença que se passa em um vaso cilíndrico tridimensional com paredes modeladas pela estrutura bidimensional imersa.

O vaso modelado tem um diâmetro inicial (D_i) de 0,3 cm e comprimento de 3 cm. O escoamento de entrada tem um perfil parabólico com velocidade máxima dada pela equação:

$$u_{max}(t) = \begin{cases} U \left(\frac{D_i}{D(t)} \right)^2 \sin^2 \left(\frac{\pi t}{T} \right), & t \leq T, \\ 0, & t > T, \end{cases} \quad (4.15)$$

onde $U = 0,1166$ cm/s e $T = 0,1122$ s. Os parâmetros do fluido são: $\rho_0 = 1.05$ g/cm³ e $\nu = 0.035$ cm²/s. O número de Reynolds que caracteriza o problema fica próximo de 1, pois este não afeta a propagação de ondas. E a estrutura imersa tem a mesma lei constitutiva que o caso anterior (veja a equação (4.14)).

O volume externo é definido por uma caixa retangular, com largura de 0,39 cm, que envolve o vaso (como mostrado na Figura 4.12), pois o modelo de imposição de pressão foi projetado para superfícies planas. Como no caso bidimensional, uma pressão de referência é imposta nas fronteiras paralelas aos planos XY e XZ .

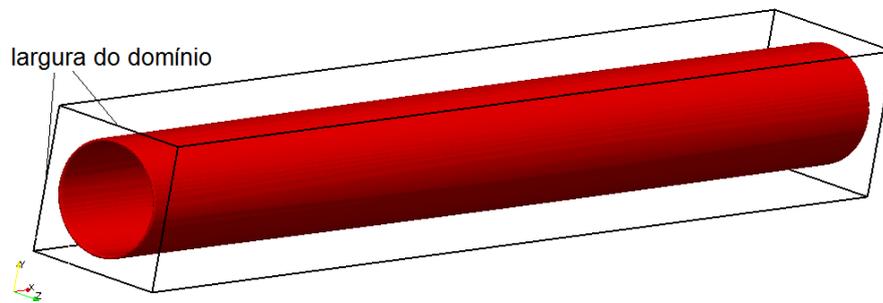


Figura 4.12: Ilustração da geometria do problema tridimensional de propagação de ondas de pressão.

Realizamos simulações deste problema com diferentes valores do coeficiente de elasticidade, com o intuito de caracterizar melhor a velocidade de propagação das ondas de pressão em tubos cilíndricos e pôr em evidência o efeito do fluido externo na velocidade de propagação. A Figura 4.13 mostra os valores da velocidade de propagação da onda de pressão (c_w) para diferentes valores do coeficiente de elasticidade (k_f), com um volume externo fixo, e a seguinte curva de ajuste por mínimos quadrados:

$$c_w \approx 0,1478k_f^{(0,5476)}. \quad (4.16)$$

Visto que necessitaríamos de um canal muito mais comprido (ou uma onda muito mais curta) para medir velocidades próximas às encontradas no sistema cardiovascular (de aproximadamente 500 cm/s [Khbir et al. (2004)]), esta função

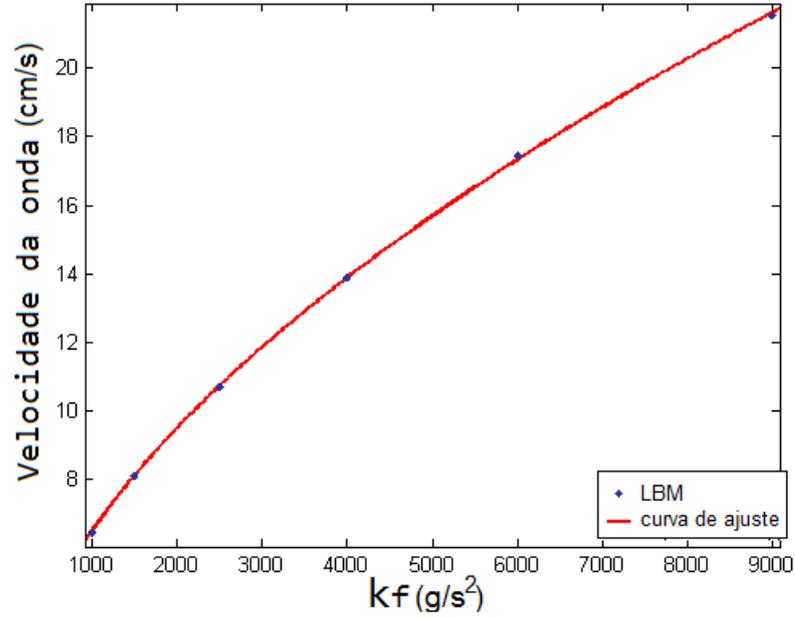


Figura 4.13: Curva de ajuste das velocidades das ondas de pressão com diferentes coeficientes de elasticidade k_f em 3D.

pode ser usada para estimar o coeficiente de elasticidade adequado para modelar as paredes arteriais a partir do conhecimento da velocidade de propagação das ondas em um segmento específico.

Como veremos na Seção 5.5 do próximo capítulo, outra forma de estimar a velocidade da onda de pressão se dá por uma derivação da equação de Moens–Korteweg, da forma:

$$c_w \approx \sqrt{\frac{k_f R}{2\rho}} \approx 0,2673\sqrt{k_f}, \quad (4.17)$$

onde $R = D_i/2$. Recalculando a curva de ajuste dada pela equação (4.16), porém com o expoente de k_f fixo em 0,5, temos:

$$c_w \approx 0,2219\sqrt{k_f}. \quad (4.18)$$

Logo, estas duas formas de estimar a velocidade da onda de pressão apresentam uma diferença de cerca de 17%. Possivelmente esta diferença reduziria se medíssemos a velocidade da onda em problemas com k_f maior, pois o expoente maior que 0,5 da equação (4.16) indica que o coeficiente 0,2219 da função (4.18)

tende a crescer. Mas, por uma questão de custo computacional, estes testes ficam como trabalho futuro.

4.5 Investigação numérica do esquema de acoplamento

Nesta seção vamos discutir uso de acoplamentos implícitos e explícitos entre o fluido e a estrutura, em especial na modelagem de paredes em estruturas tubulares. Além disso, vamos propor uma abordagem com passos temporais distintos para o fluido e a estrutura, visando redução de custo computacional, e indicar seu uso correto.

Como sabemos, o custo computacional de simulações tridimensionais é alto, se comparado ao custo de simulações bidimensionais. O caso da fronteira imersa acoplada ao LBM não foge à regra, pois a estrutura imersa passa a ser bidimensional (com um número maior de nós e mais conexões por nó), a função δ_h aumenta seu suporte de 16 para 64 células e as forças da estrutura passam a ser impostas sobre um número maior de direções do *lattice* (de 8 para 18 direções neste trabalho).

Para reduzir estes custos, propomos aqui o uso de diferentes passos temporais para as dinâmicas do fluido (Δt_f) e da estrutura (Δt_s), usando um passo maior para a estrutura. Detalhamos na Figura 4.14 o uso dos passos temporais, sendo que nas rotinas (B)-(E) é usado o passo temporal da estrutura (Δt_s) e nas rotinas (F)-(H) é usado o passo temporal do fluido (Δt_f). Onde t_s representa o instante de tempo para a estrutura e t_f o instante de tempo para o fluido. Esta abordagem reduz linearmente o custo introduzido pela estrutura e pelo acoplamento. A mesma é viável quando a parede do vaso sofre deformações lentas em relação à velocidade das partículas do LBM (principais responsáveis pela propagação das informações sobre o domínio).

Para analisar estas abordagens, vamos modelar o problema de propagação de ondas apresentado na Seção 4.4.2, onde impomos um escoamento prescrito na entrada e uma pressão de referência na saída do vaso, cuja relação de aspecto é de 10/1. Neste caso, vamos impor uma pressão de referência na saída do vaso,

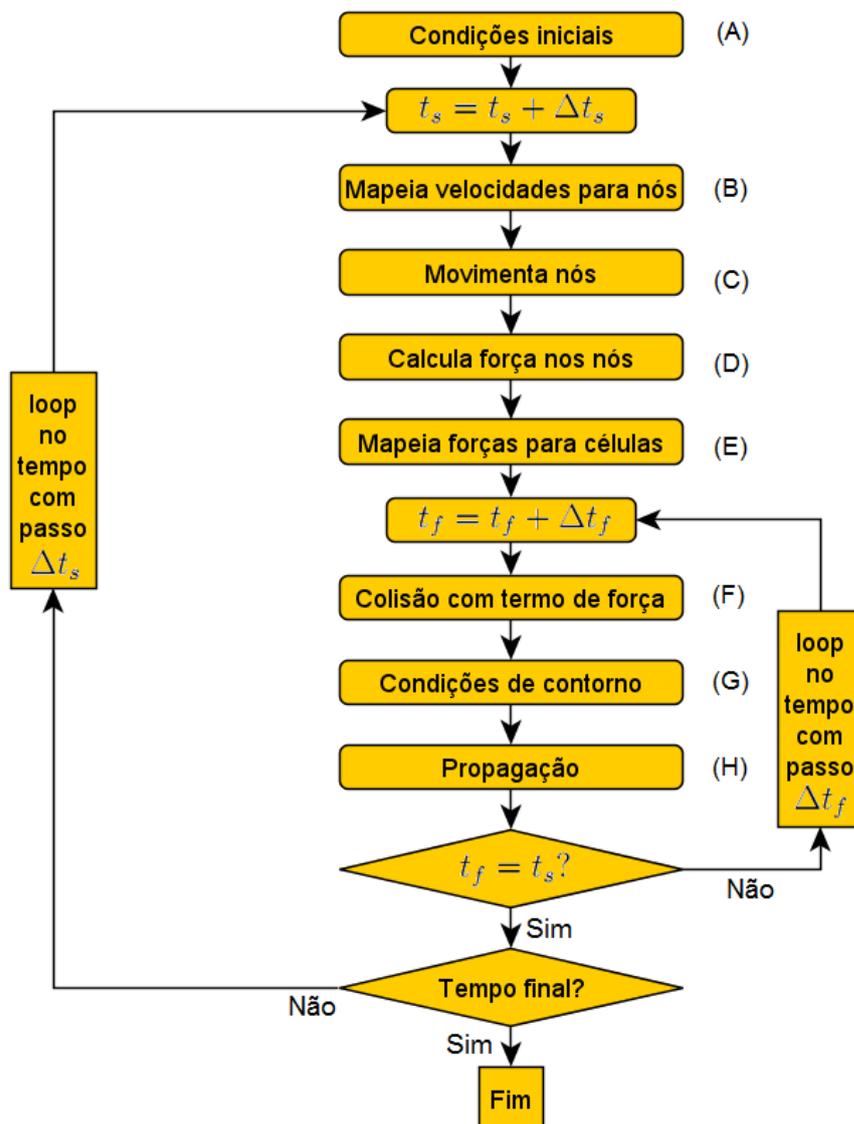


Figura 4.14: Fluxograma das rotinas do método acoplado LB-IB explícito com passos temporais distintos para o fluido e para a estrutura.

permitindo que o fluido saia do mesmo. Para cada problema, vamos comparar o acoplamento implícito, entre o fluido e a estrutura, com o acoplamento explícito usando $\Delta t_s / \Delta t_f = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$ e 128 . Também vamos testar os números de Reynolds $1, 10$ e 100 para ver como estes valores afetam a estabilidade desta metodologia.

Modelamos inicialmente um vaso com coeficiente de elasticidade $k_f = 12000 \text{g/s}^2$ ($c_w \approx 29,28 \text{ cm/s}$, segundo a equação (4.17)), contendo um fluido com viscosidade $\nu = 0.035 \text{ cm}^2/\text{s}$ ($Re = 1$). Considerando $\theta_r = 30$ (ver equação (3.1)) para calcular o passo temporal do fluido (de onde temos $v = 1389 \text{ cm/s}$), foi possível

usar um passo temporal até 64 vezes maior para a estrutura sem afetar os resultados da simulação de forma perceptível. Na Figura 4.15 temos os fluxos na entrada (vermelho) e saída do vaso em função do tempo para o esquema de interação fluido-estrutura implícito (verde) e para os esquemas explícitos com $\Delta t_s/\Delta t_f$ igual a 64 (azul) e 128 (violeta). As curvas de fluxo dos dois primeiros esquemas estão praticamente sobrepostas, enquanto o caso com $\Delta t_s/\Delta t_f = 128$ apresenta um desvio significativo no fluxo de saída. Como salientado, procuramos sempre o caso em que $\Delta t_s \gg \Delta t_f$, visando reduzir o custo computacional.

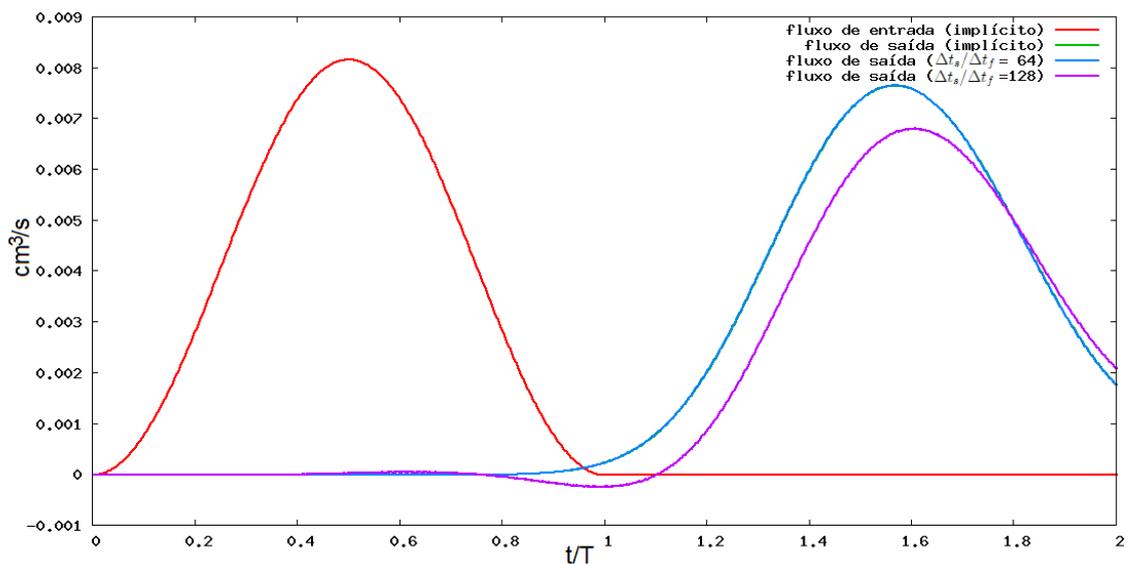


Figura 4.15: Fluxos de entrada e saída do vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$ em função do tempo para o esquema de interação fluido-estrutura implícito e para os esquemas explícitos com $\Delta t_s/\Delta t_f$ igual a 64 e 128.

De forma complementar, mostramos na Figura 4.16 o volume do vaso em função do tempo para o esquema de interação fluido-estrutura implícito (vermelho) e para os esquemas explícitos com $\Delta t_s/\Delta t_f$ igual a 64 (verde) e 128 (azul). Onde, novamente temos a sobreposição das curvas dos dois primeiros esquemas.

Para verificar que não ocorrem oscilações da velocidade no domínio espacial, mostramos na Figura 4.17 o perfil de velocidade na direção axial no instante de máximo fluxo sobre uma linha transversal pelo centro na saída do vaso, usando os mesmos três esquemas anteriores. Observamos que, apesar de conservar a velocidade axial nula sobre a parede do vaso, o caso com $\Delta t_s/\Delta t_f = 128$ se distancia dos outros dois casos sobrepostos no interior do vaso.

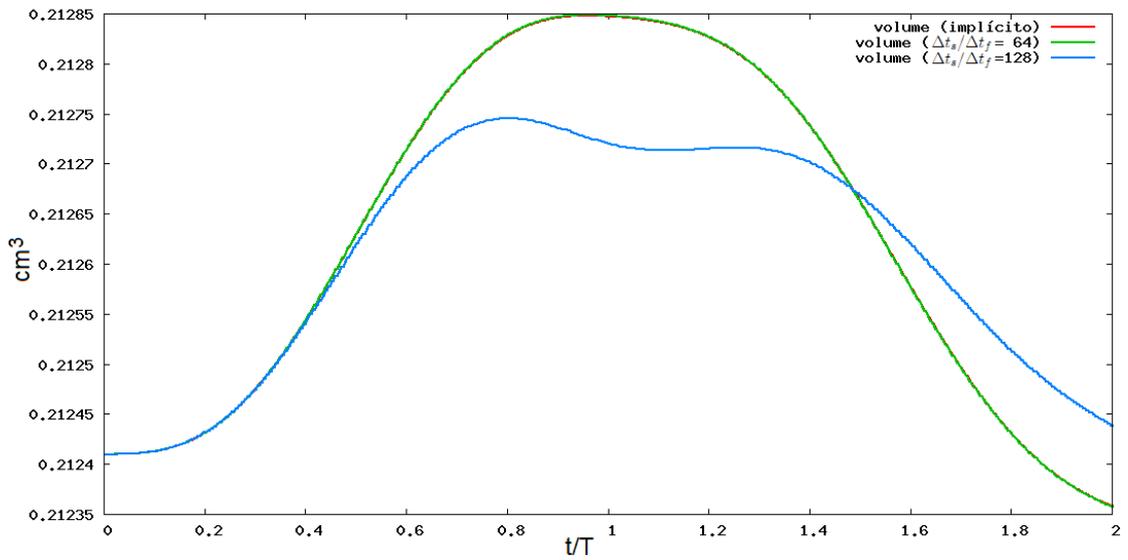


Figura 4.16: Volume do vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$ em função do tempo para o esquema de interação fluido-estrutura implícito e para os esquemas explícitos com $\Delta t_s/\Delta t_f$ igual a 64 e 128.

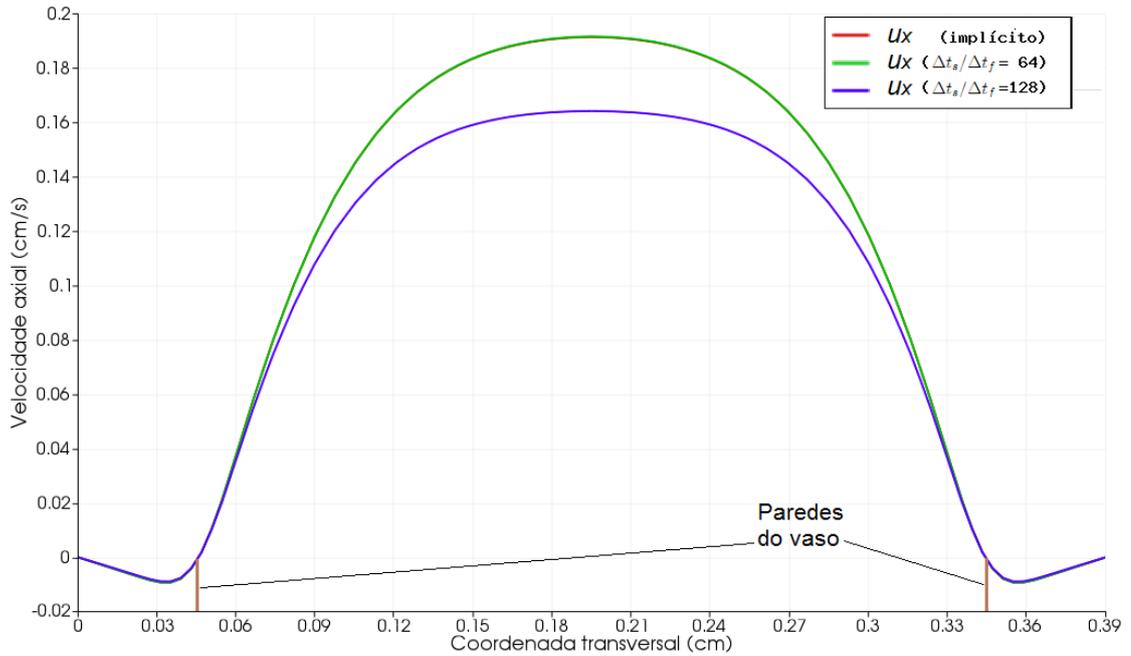


Figura 4.17: Perfis de velocidade axial na saída do vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$ no instante de máximo fluxo para o esquema de interação fluido-estrutura implícito e para os esquemas explícitos com $\Delta t_s/\Delta t_f$ igual a 64 e 128.

Na Figura 4.18 mostramos o valor máximo de pressão no interior do vaso ao longo do tempo para o esquema de interação fluido-estrutura implícito (azul) e para os esquemas explícitos com $\Delta t_s/\Delta t_f$ igual a 8 (verde) e 64 (vermelho). Diferentemente do campo de velocidade, no campo de pressão podemos observar

pequenas oscilações (da ordem de 0,5%) de alta frequência quando o passo temporal da estrutura é 64 vezes maior que o do fluido, as quais não causam alterações significativas na curva de pressão apresentada. Tais oscilações se tornam imperceptíveis quando $\Delta t_s/\Delta t_f = 8$.

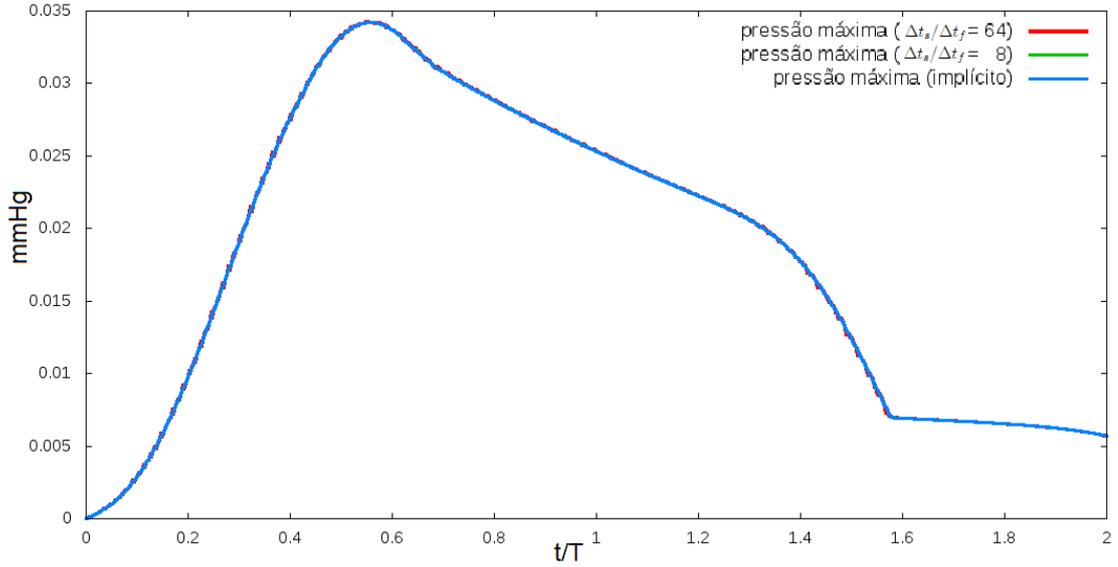


Figura 4.18: Pressão máxima no vaso com $k_f = 12000\text{g/s}^2$ em função do tempo para o esquema de interação fluido-estrutura implícito e para os esquemas explícitos com $\Delta t_s/\Delta t_f$ igual a 8 e 64.

Realizamos os mesmos testes para vasos com os seguintes coeficientes de elasticidade: $k_f = 24000\text{g/s}^2$ ($c_w \approx 41,41$ cm/s), $k_f = 48000$ g/s² ($c_w \approx 58,56$ cm/s), $k_f = 96000$ g/s² ($c_w \approx 82,82$ cm/s), $k_f = 192000$ g/s² ($c_w \approx 117,1$ cm/s), $k_f = 384000$ g/s² ($c_w \approx 165,6$ cm/s), $k_f = 768000$ g/s² ($c_w \approx 234,2$ cm/s) e $k_f = 1536000$ g/s² ($c_w \approx 331,2$ cm/s). Além de variar a viscosidade do fluido de forma que tenhamos os números de Reynolds 1, 10 e 100. Resultando em uma bateria de mais de 150 simulações tridimensionais transientes. Por uma questão de custo computacional nos limitamos a testar somente os valores mencionados da relação $\Delta t_s/\Delta t_f$.

As oscilações que destacamos no campo de pressão se tornam imperceptíveis em todos os casos estáveis quando $\Delta t_s/\Delta t_f \leq 8$. Por isso, resolvemos destacar qual a proporção máxima entre o passo temporal da estrutura e do fluido que não afeta o campo de velocidade obtido pelo esquema implícito. O valor máximo de

$\Delta t_s/\Delta t_f$ para cada problema está exposto na Tabela 4.2.

$k_f/1000$	12	24	48	96	192	384	768	1536
$Re = 1$ ($\tau = 0,510$)	64	32	16	16	8	8	8	4
$Re = 10$ ($\tau = 0,501$)	64	32	16	8	8	8	4	4
$Re = 100$ ($\tau = 0,5001$)	32	16	8	8	8	4	4	4

Tabela 4.2: Valor máximo da proporção $\Delta t_s/\Delta t_f$ que pode ser usado sem afetar o campo de velocidade de forma perceptível nas simulações de propagação de ondas com diferentes coeficientes de elasticidade (k_f) e diferentes valores do número Reynolds e do parâmetro τ .

Analisando cada linha da Tabela 4.2 individualmente, vemos que a relação $\Delta t_s/\Delta t_f$ máxima (sem afetar o campo de velocidade) se torna menor quando o coeficiente de elasticidade da parede aumenta. Porém, esta relação entre k_f e $\Delta t_s/\Delta t_f$, não é inversamente linear como pode parecer pelos primeiros testes. De fato, valores de k_f mais baixos permitem o uso de passos temporais maiores para a estrutura quando a velocidade das partículas do fluido é alta. Isto se deve em parte ao fato de, neste método numérico, o fluido ser o principal condutor de informações.

Por outro lado, percebemos em cada coluna nesta tabela que o valor máximo de $\Delta t_s/\Delta t_f$ decai quando aumentamos o número de Reynolds (reduzindo a viscosidade do fluido e o valor de τ). Isto indica que a estabilidade numérica da simulação (associada a τ) e o número de Reynolds também limitam o uso desta abordagem. Porém, repare que mesmo com $Re = 100$ e um valor muito baixo de $\tau = 0,5001$ o uso de um passo temporal quatro vezes maior para a estrutura não afetou a estabilidade e os resultados dos problemas testados. Indicando que esta abordagem pode ser usada com sucesso em uma ampla gama de escoamentos em vasos deformáveis. Casos complementares podem ser acompanhados na Seção 4.6, onde trabalhamos com variações de pressão em condições fisiológicas.

Escolhemos este problema para tomar medidas de desempenho da implementação do método acoplado LB-IB em função do número de iterações fluido-estrutura, no caso implícito, e em função da proporção entre o passo temporal da estrutura e do fluido, no caso explícito. Fizemos os primeiros testes em uma malha com 61 células ao longo do diâmetro (valor usado em diversos

experimentos deste trabalho), totalizando 3.750.841 células de fluido e 1.015.764 nós de fronteira imersa. Estas medidas de desempenho em MLUPS, feitas no cluster Bull com paralelização OpenMP em 12 núcleos de processamento (ver Seção 3.6.2), é apresentada na Tabela 4.3. Aqui, vemos que no acoplamento implícito o desempenho diminui quase linearmente com o aumento das iterações fluido-estrutura (o número de iterações foi mantido constante em cada teste, desconsiderando o critério de convergência), pois temos que resolver as equações do fluido e da estrutura a cada iteração. Além disso, quando passamos da resolução implícita com uma iteração para a resolução explícita ocorre um aumento de 20% de desempenho, devido ao menor uso de memória RAM (de 3,71GB para 2,45GB) e a outras otimizações feitas no código (ver Apêndice A). Nas medidas do problema explícito vemos um aumento significativo de 61,5% do desempenho quando aumentamos o passo temporal da estrutura em 8 vezes, pois o mapeamento das forças e velocidades entre fluido e estrutura introduz um custo computacional considerável. Esta diferença de desempenho decresce com o refinamento da malha, por exemplo, com o dobro do refinamento este valor passa de 61,5% para 49,5%. Adicionalmente, mostramos nesta mesma tabela os desempenhos usando uma malha menos refinada, com 41 células ao longo do diâmetro.

	Implícito				Explícito			
	8	4	2	1	-	-	-	-
iterações	8	4	2	1	-	-	-	-
$\Delta t_s/\Delta t_f$	1	1	1	1	1	2	4	8
desempenho (n=41)	0,36	0,70	1,32	2,36	2,71	3,66	4,40	4,88
desempenho (n=61)	0,40	0,79	1,50	2,76	3,30	4,15	4,86	5,33

Tabela 4.3: Desempenho em MLUPS da simulação de propagação de ondas em função do número de iterações fluido-estrutura e da proporção entre o passo temporal da estrutura e do fluido, em tubos cilíndricos com 41 e 61 células ao longo do diâmetro.

4.6 Modelagem do efeito da pressão hidrostática

Nesta seção apresentamos uma estratégia para modelar as variações da pressão média (pressão hidrostática) em vasos arteriais através do método acoplado

LB-IB. Esta é uma questão crucial na simulação de condições fisiológicas pelo LBM, como veremos a seguir, pois esta pressão hidrostática determina o nível de deformação das estruturas arteriais.

Na Seção 4.6.1 apresentaremos a forma proposta de modelagem da pressão e na Seção 4.6.2 validaremos e analisaremos o modelo através de experimentos numéricos.

4.6.1 Estratégia de decomposição da pressão

As artérias do sistema cardiovascular apresentam uma variação da pressão média, que também será chamada de hidrostática, durante um ciclo cardíaco de cerca de 40mmHg (variando de 80 a 120mmHg aproximadamente), como veremos a seguir. Além disso, em um segmento arterial, existe um gradiente de pressão, entre as extremidades distal e proximal (associado à circulação do sangue), variável no tempo que tem amplitude muito menor que a pressão hidrostática. Onde estamos empregando a palavra gradiente para caracterizar a perda de pressão entre a entrada e saída em um dado segmento. O principal papel, do ponto de vista mecânico, da pressão hidrostática é o de provocar o efeito de expansão e contração das artérias, enquanto o gradiente de pressão atua diretamente no deslocamento do sangue.

Nas Figuras 4.19 e 4.20 mostramos as curvas da pressão hidrostática e do gradiente de pressão (caracterizado pela perda de pressão entre a entrada e saída do vaso) durante um ciclo cardíaco, onde escolhemos segmentos de 0,3 cm de comprimento da aorta abdominal e da artéria cerebral média para ilustrar tais quantidades em artérias de grande e médio calibre, respectivamente. Estas curvas foram extraídas de uma simulação do sistema cardiovascular humano através de um modelo unidimensional da rede arterial, desenvolvido no grupo HeMoLab [Blanco et al. (2007)]. Aqui podemos ver uma diferença de duas ordens de magnitude entre a amplitude da pressão hidrostática e do gradiente de pressão, além de oscilações de maior frequência no gradiente de pressão. Nestas mesmas figuras, mostramos as

curvas recuperadas a partir da decomposição discreta de frequências de até 11Hz para a pressão hidrostática e 16Hz para o gradiente de pressão (valores mínimos para aproximar de forma razoável as curvas originais). Estas informações serão importantes para os experimentos numéricos de validação mostrados em seguida (Seção 4.6.2). Observe que a magnitude do gradiente de pressão dependerá da artéria analisada e do comprimento do segmento arterial.

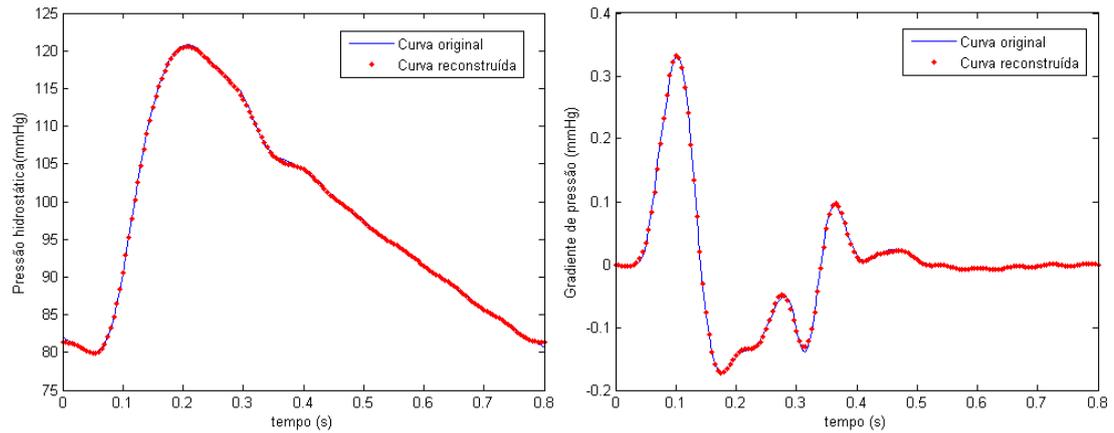


Figura 4.19: Curvas da pressão hidrostática (esquerda) e do gradiente de pressão (direita) em um segmento de 0,3 cm de comprimento da aorta abdominal obtido de um modelo arterial 1D. Em vermelho estão as curvas reconstruídas a partir de frequências discretas de até 11Hz para pressão hidrostática e 16Hz para o gradiente.

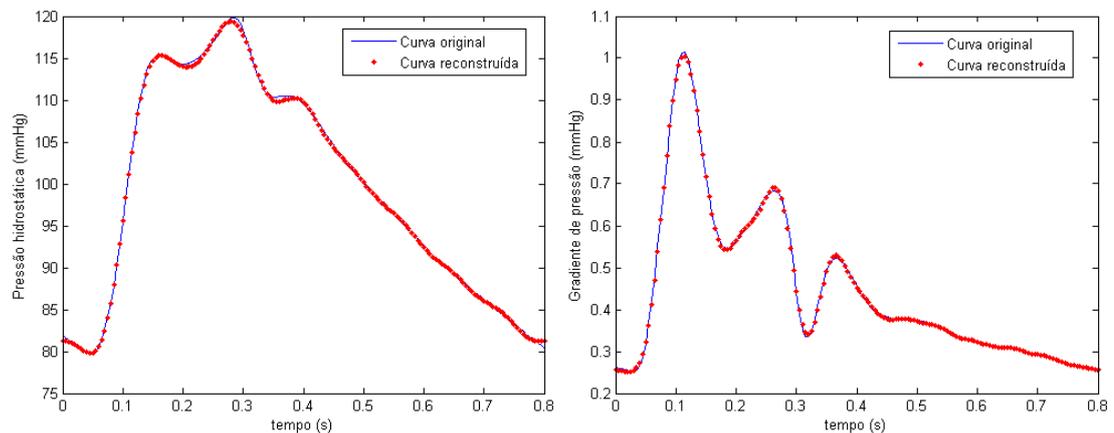


Figura 4.20: Curvas da pressão hidrostática (esquerda) e do gradiente de pressão (direita) em um segmento de 0,3 cm de comprimento da artéria cerebral média obtido de um modelo arterial 1D. Em vermelho estão as curvas reconstruídas a partir de frequências discretas de até 11Hz para pressão hidrostática e 16Hz para o gradiente.

Para modelar o efeito da variação de pressão em um segmento arterial, de forma geral, imporíamos os valores da pressão total nas extremidades do mesmo.

Porém, em métodos explícitos como o LBM, uma variação grande de pressão nas condições de contorno pode levar a instabilidades numéricas. Por isso, propomos a decomposição da pressão na componente hidrostática (p_H , pressão média) e na componente proveniente dos gradientes espaciais de pressão (p_G , diferenças de pressão), de forma que em cada ponto do domínio temos a decomposição:

$$p(\mathbf{x}, t) = p_H(t) + p_G(\mathbf{x}, t). \quad (4.19)$$

Na Figura 4.21 ilustramos a expansão realizada em um vaso com o aumento da pressão hidrostática (p_H).

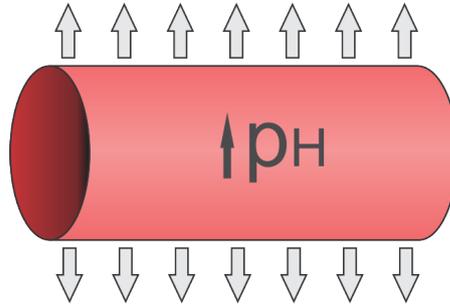


Figura 4.21: Ilustração do efeito da pressão hidrostática sobre um vaso.

Como mencionado anteriormente, a relação constitutiva da parede arterial será modelada de forma puramente elástica, conforme:

$$\mathbf{F} = \mathbf{K}_f(\mathbf{Z}(p_0) - \mathbf{X}), \quad (4.20)$$

onde p_0 é a pressão na configuração de referência (igual à pressão externa do vaso). Poder-se-ia interpretar, de forma equivalente, que a pressão externa é nula e a configuração de referência da parede se concentra no eixo central do vaso.

Note agora que nas equações de Navier–Stokes (ver sistema (4.1)) está presente somente o gradiente da pressão, ou seja, variações de pressão constantes no domínio serão percebidas somente através da interação com a estrutura. Por outro lado, em qualquer ponto da parede de um vaso (assumindo regularidade desta superfície) teremos, da conservação do momento, que a força exercida pela pressão nas direções tangenciais está associada às variações de pressão no interior

do vaso, enquanto a força exercida na direção normal (\mathbf{n}) dependerá da diferença entre as pressões interna e externa do vaso. Portanto, do balanço de forças, temos que:

$$\begin{aligned} [p(\mathbf{x}, t) - p_0 + f^*(\mathbf{x}, t)] \mathbf{n} &= -[\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} \\ &= -[\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} \\ &= k_f \{[\mathbf{X}(t) - \mathbf{Z}(p_0)] \cdot \mathbf{n}\} \mathbf{n}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

sendo $\mathbf{x} = \mathbf{X}$ e $f^*(\mathbf{x}, t)$ a componente de força proveniente dos demais termos (relativos ao campo de velocidade). Logo, decompondo a pressão da forma exposta em (4.19), temos:

$$\begin{aligned} [p(\mathbf{x}, t) - p_0 + f^*(\mathbf{x}, t)] \mathbf{n} &= [p_H(t) + p_G(\mathbf{x}, t) - p_0 + f^*(\mathbf{x}, t)] \mathbf{n} \\ &= k_f \{[\mathbf{X}(t) - \mathbf{Z}(p_0)] \cdot \mathbf{n}\} \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Devido à escolha particular da relação constitutiva da estrutura, podemos reescrever esta equação como:

$$\begin{aligned} [p_G(\mathbf{x}, t) + f^*(\mathbf{x}, t)] \mathbf{n} &= k_f \left\{ [\mathbf{X}(t) - \mathbf{Z}(p_0)] \cdot \mathbf{n} - \frac{(p_H(t) - p_0)}{k_f} \right\} \mathbf{n} \\ &= k_f \{[\mathbf{X}(t) - \mathbf{Z}(p_H(t))] \cdot \mathbf{n}\} \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Com estas observações podemos concluir que impor a pressão total (p) no fluido e a posição de referência ($\mathbf{Z}(p_0)$) para a estrutura é equivalente a impor a componente p_G da pressão no fluido e a posição de referência ($\mathbf{Z}(p_H)$) para a estrutura. Portanto, propomos impor somente a componente p_G ao fluido e modelar o efeito da componente da pressão p_H diretamente através do deslocamento da referência da parede do vaso (referente a este valor de pressão), conforme:

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = -k_f [\mathbf{X}(t) - \mathbf{Z}(p_H(t))], \quad (4.24)$$

onde,

$$\mathbf{Z}(p_H(t)) = \mathbf{Z}(p_0) + \frac{(p_H(t) - p_0)}{k_f} \mathbf{n}. \quad (4.25)$$

Portanto, agora a posição de referência de cada nó da estrutura imersa passa a ter dependência temporal, função de $p_H(t)$. Assim, podemos impor nas condições de contorno do vaso somente a componente $p_G(\mathbf{x}, t)$ da pressão, a qual apresenta menores variações. Note que não estamos restringindo a deformação da parede arterial ao valor de p_H .

4.6.2 Validação e análise numérica

Para validar esta abordagem, elaboramos dois tipos de testes com variações de pressão e dados semelhantes aos encontrados no sistema cardiovascular humano. O sangue é modelado como fluido Newtoniano com viscosidade cinemática $0,035 \text{ cm}^2/\text{s}$ e densidade de $1,05 \text{ g/cm}^3$. O vaso modelado tem diâmetro de $0,3 \text{ cm}$ à pressão de referência p_0 (largura do domínio de $0,36\text{cm}$, ver Figura 4.12), relação de aspecto $2/1$ e $k_f = 3.500.000 \text{ g/s}^2$ (com $c_w = 500 \text{ cm/s}$, calculado pela fórmula (4.17)). A malha usada nos testes a seguir possui 41 células ao longo do diâmetro do vaso, totalizando cerca de 200.000 células de fluido e 90.000 nós de estrutura.

4.6.2.1 Oscilações na pressão hidrostática

No primeiro teste vamos contrair e dilatar um vaso, variando a pressão hidrostática segundo a função senoidal:

$$p_H(t) = p_0 + \frac{A}{2} \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi t}{T} \right) \right], \quad (4.26)$$

com frequências de oscilação de 2Hz, 4Hz e 8Hz e com amplitude da pressão de $A = 40\text{mmHg}$. As frequências de oscilação e a amplitude da pressão foram escolhidas com base na análise das curvas de pressão hidrostática apresentadas nas Figuras 4.19 e 4.20.

Pela conservação de massa e pela incompressibilidade do escoamento, sabemos que, ao contrair e dilatar o vaso, a diferença do fluxo que entra e sai do vaso tem que ser equivalente à variação temporal do volume. Portanto, a

solução analítica do fluxo que sai e entra no vaso é dada pela derivada do volume em relação ao tempo. Observe que, no instante $t = 0$, a função senoidal (4.26) é igual a p_0 e sua derivada é nula, portanto a condição inicial com pressão p_0 e fluxo nulo coincide com a solução analítica do problema.

Nas simulações a seguir vamos analisar as três frequências de oscilação selecionadas por separado, considerando como tempo característico $T = 1/8s$ (referente à frequência de 8Hz) para o cálculo de θ_r (ver equação (3.1)).

Na Figura 4.22 mostramos os fluxos de entrada e saída do vaso obtidos pela simulação numérica com oscilação de 2Hz e $\theta_r = 30$, além dos erros relativos. Aqui, podemos observar que o fluxo de entrada e saída obtidos pela simulação numérica estão consistentes com os fluxos gerados pela variação prescrita de volume do vaso (solução analítica), com erros da ordem de 1% do fluxo máximo. Podemos observar que com $\theta_r = 30$ obtemos uma solução estável e acurada desde o primeiro ciclo, com oscilações no primeiro ciclo da ordem do erro presente nos demais ciclos.

Na Figura 4.23 mostramos os fluxos de entrada e saída do canal obtidos pela simulação numérica com oscilação de 4Hz e $\theta_r = 30$ e 60, além dos erros relativos. Aqui, podemos observar que os fluxos da simulação numérica com $\theta_r = 30$ apresentam oscilações perceptíveis no primeiro ciclo, porém aproximam consistentemente a solução a partir do segundo ciclo. Enquanto, ao aumentar θ_r para 60, estas oscilações se tornam da ordem do erro presente nos demais ciclos.

Por fim, na Figura 4.24 mostramos os fluxos de entrada e saída do canal obtidos pela simulação numérica com oscilação de 8Hz e $\theta_r = 30, 60$ e 120, além dos erros relativos. Veja que neste caso precisamos aumentar θ_r para 120 para que as oscilações se tornem da ordem dos erros presentes nos demais ciclos. Caso contrário, somente a partir do segundo ciclo se tem uma solução estável no sentido de ausência de oscilações perceptíveis.

Destes três experimentos extraímos a indicação de uma velocidade mínima de propagação da informação no fluido de aproximadamente $v = 1000$ cm/s (referente a $\theta_r = 120$), necessária para modelar oscilações da ordem de 8Hz (ou menores)

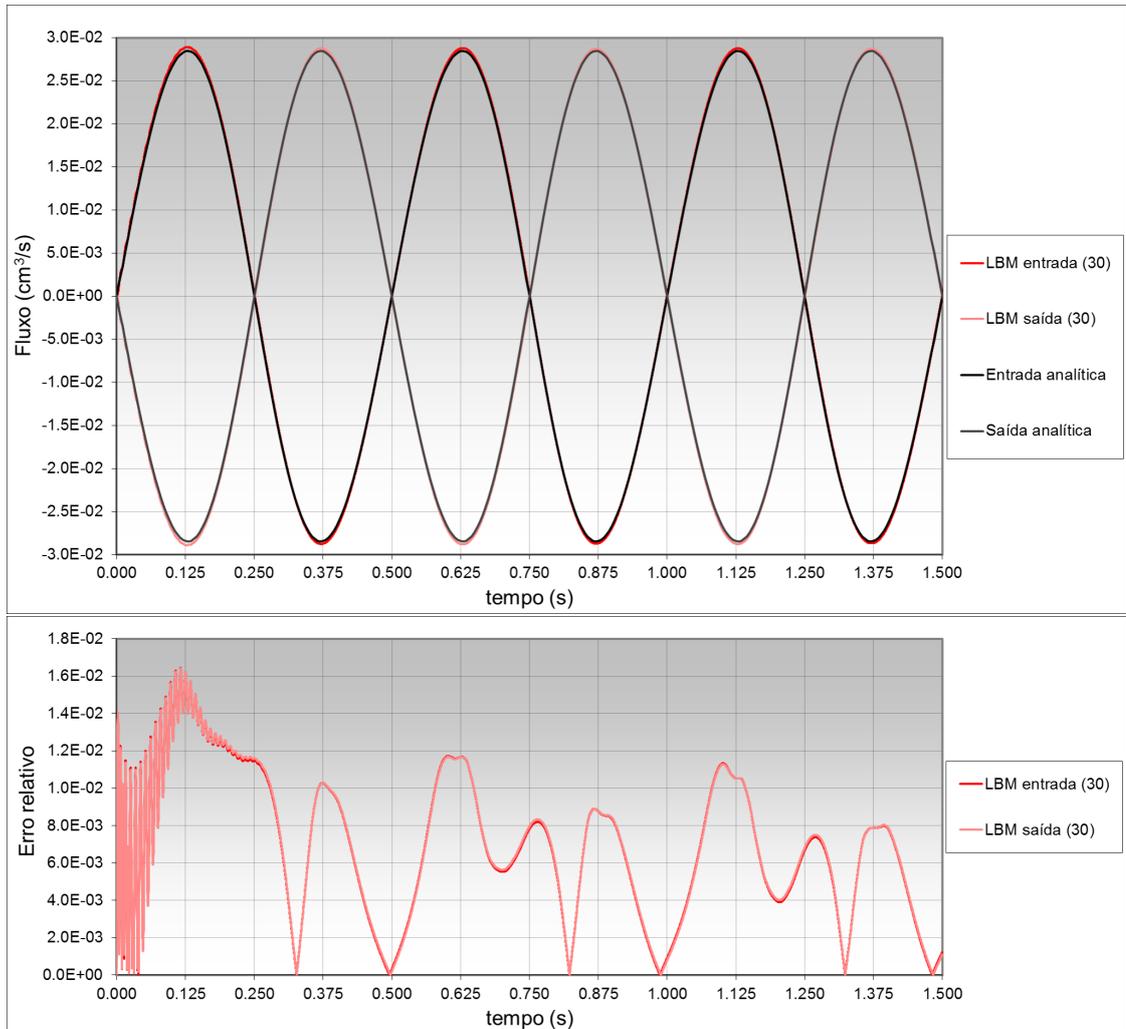


Figura 4.22: Acima, fluxos na entrada e saída do vaso provenientes da solução analítica e da solução numérica (com $\theta_r = 30$) ao dilatar e contrair o mesmo (de forma equivalente ao aumento de 40mmHg de pressão) com frequência de 2Hz. Abaixo, erros relativos entre as soluções numéricas e a analítica.

com amplitude de até 40mmHg da componente hidrostática da pressão, seguindo a forma proposta nesta seção.

Como vimos na Seção 4.5, mesmo nos casos em que a parede do vaso apresenta alto coeficiente k_f é possível adotar um passo temporal maior para a estrutura (desde que v seja alto). Nos três testes acima verificamos que os resultados sofreram modificações imperceptíveis ao usar acoplamento explícito com $\Delta t_s/\Delta t_f = 1, 2$ e 4 nos casos em que $\theta_r = 30, 60$ e 120 , respectivamente.

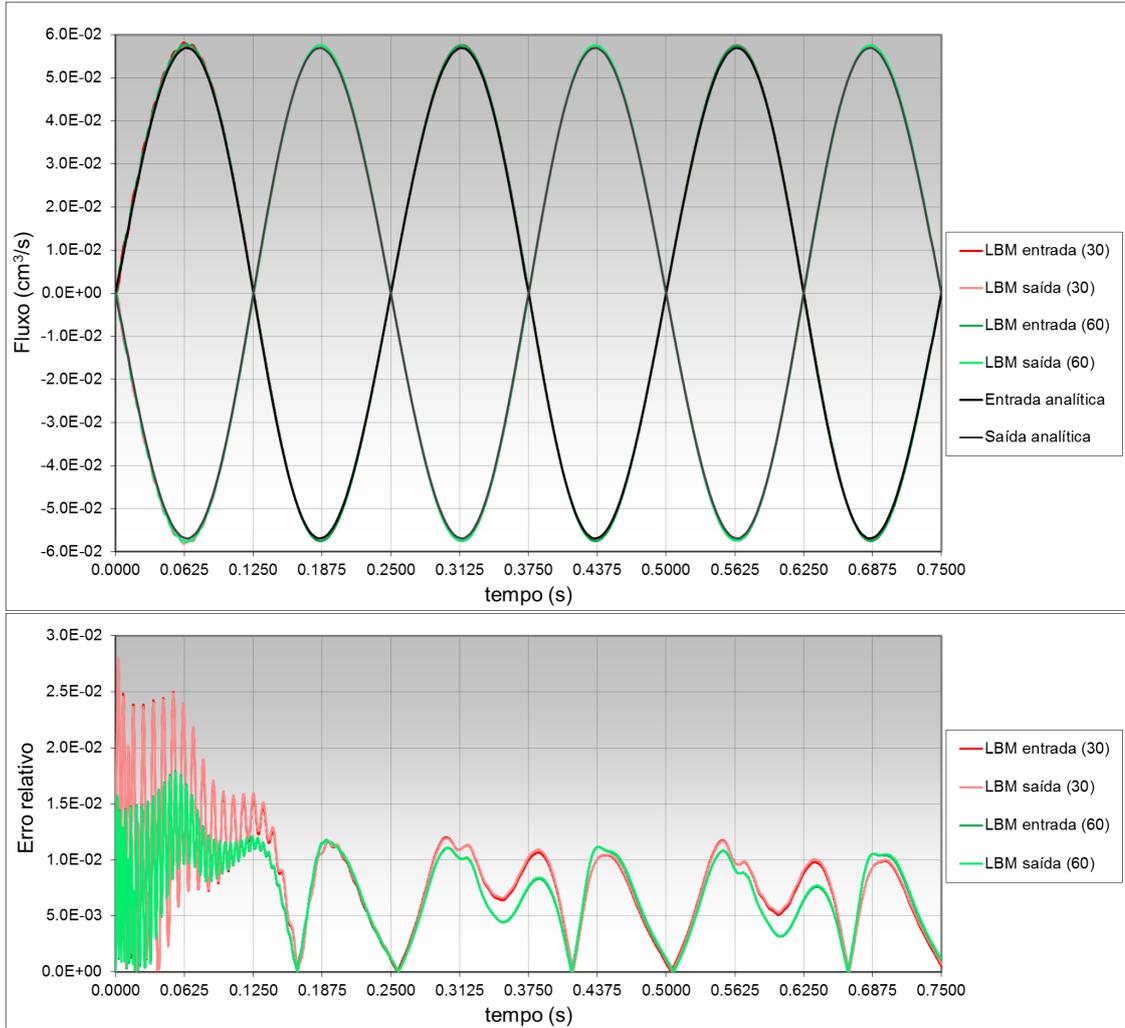


Figura 4.23: Acima, fluxos na entrada e saída do vaso provenientes da solução analítica e das soluções numéricas (com $\theta_r = 30$ e 60) ao dilatar e contrair o mesmo (de forma equivalente ao aumento de 40mmHg de pressão) com frequência de 4Hz. Abaixo, erros relativos entre as soluções numéricas e a analítica.

4.6.2.2 Adição de oscilações no gradiente de pressão

No segundo teste, além da variação da pressão hidrostática, descrita na seção anterior, acrescentamos um gradiente de pressão oscilatório descrito pela função:

$$p(t) = B \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right), \quad (4.27)$$

sendo impostas as componentes p_G^i da pressão total nas extremidades de entrada ($i = 1$) e saída ($i = 2$) do vaso da forma:

$$p_G^1(t) = \frac{B}{2} \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) \quad \text{e} \quad p_G^2(t) = -\frac{B}{2} \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right), \quad (4.28)$$

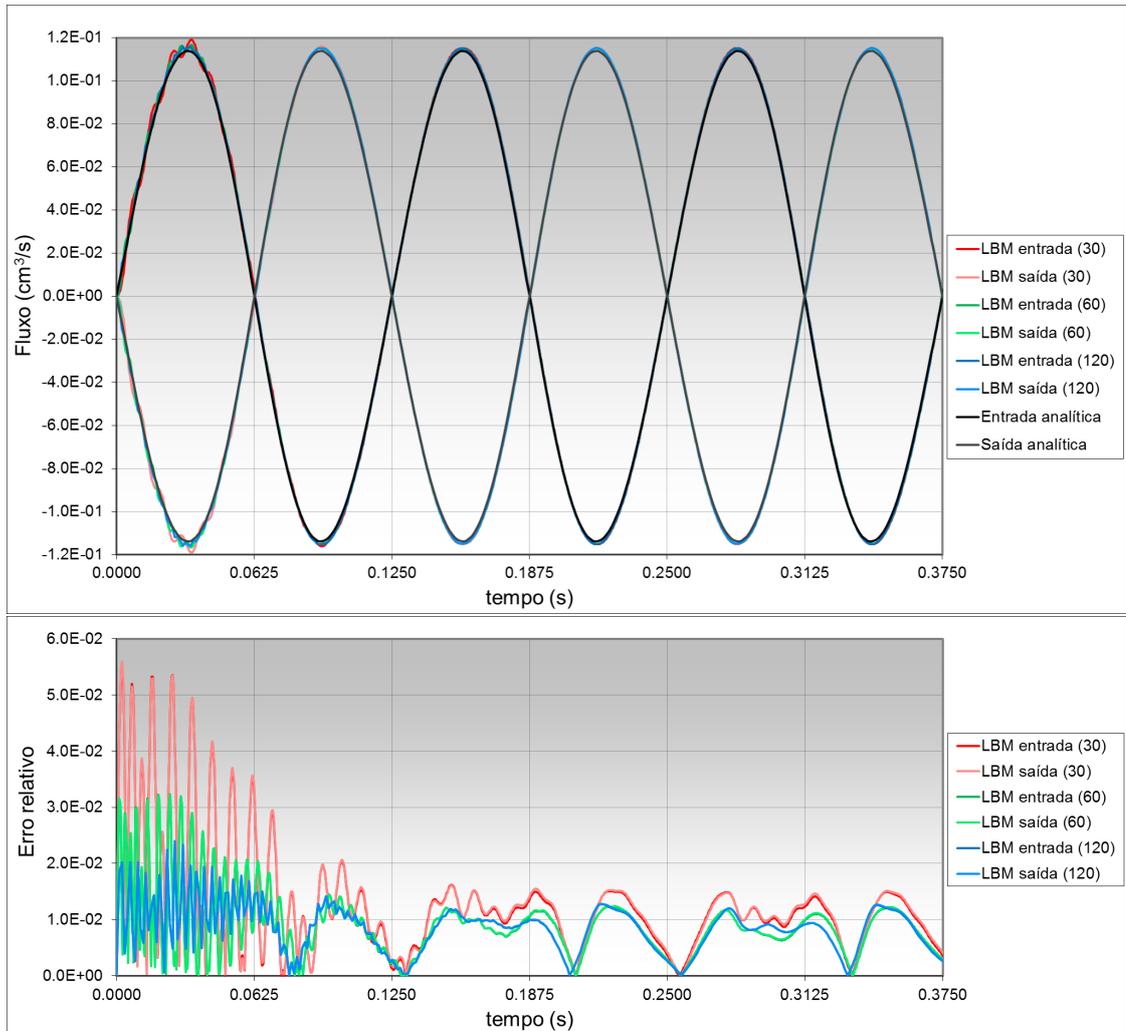


Figura 4.24: Acima, fluxos na entrada e saída do vaso provenientes da solução analítica e das soluções numéricas (com $\theta_r = 30, 60$ e 120) ao dilatar e contrair o mesmo (de forma equivalente ao aumento de 40mmHg de pressão) com frequência de 8Hz . Abaixo, erros relativos entre as soluções numéricas e a analítica.

com frequências de oscilação de 2Hz , 4Hz , 8Hz e 16Hz e com amplitudes do gradiente de $B = 0,1, 0,2, 0,4$ e $0,8\text{mmHg}$, respectivamente. As frequências de oscilação do gradiente de pressão foram escolhidas com base na análise das Figuras 4.19 e 4.20 e as amplitudes foram escolhidas de forma que os números de Reynolds fiquem entre 200 e 400 (valores normais no SCVH), mantendo os números de Mach menores que $0,1$ com o passo temporal indicado pelo primeiro teste. Visto que o tempo característico deste teste é $T = 1/16\text{s}$ (referente à frequência de 16Hz), temos a relação $\theta_r = 60$ ao adotar o passo temporal indicado pelo primeiro teste.

Este gradiente de pressão oscilante caracteriza o escoamento de Womersley, quando a amplitude de p_H é nula, em tubos quase rígidos (apresentado na

Seção 4.3.2), pois as variações do raio são menores que 0,25%. Os números adimensionais de Womersley (ver equação (3.17)) são 2,84, 4,02, 5,68 e 8,04 para as frequências de 2Hz, 4Hz, 8Hz e 16Hz, respectivamente. Já no caso de nosso interesse, com amplitude de p_H igual 40mmHg, o raio varia em cerca de 10%.

Nas simulações a seguir vamos analisar as 4 frequências de oscilação selecionadas para p_G por separado, juntamente com as oscilações de p_H apresentadas anteriormente. Os resultados serão mostrados após 8 ciclos da oscilação de p_G , para analisarmos o problema já na fase periódica.

Na Figura 4.25 mostramos os fluxos na entrada e saída do vaso submetido a um gradiente de pressão com frequência de 16Hz e com as frequências de p_H testadas anteriormente, além do caso com $p_H = 0$. No caso em que p_H oscila em 2Hz (marrom) vemos que o fluxo está inicialmente próximo da solução com $p_H = 0$ (preto), porém a medida que o vaso dilata ($t = 0,75s$) este passa a se afastar desta solução para voltar a se aproximar novamente em $t = 1s$. Já no caso em que p_H oscila em 4Hz (laranja), percebemos uma maior diferença entre os fluxos de entrada e saída (causada pela maior velocidade de dilatação e contração) e a maior distância para a solução com $p_H = 0$ ocorre em $t = 0,6250$, repetindo o mesmo padrão na segunda metade do gráfico. Por fim, no caso em que p_H oscila em 8Hz (azul) temos uma separação ainda maior do fluxos de entrada e saída, observada nos picos de fluxo positivo onde as velocidades de dilatação e contração atingem máximos de forma alternada. Além disso, podemos ver em todos os casos defasagens dos picos de fluxo no tempo causados pela complacência do vaso.

Na Figura 4.26 mostramos os fluxos na entrada e saída do vaso submetido a um gradiente de pressão com frequência de 8Hz. Como no caso anterior, podemos observar comportamentos semelhantes dos fluxos com frequências de oscilação de p_H inferiores a 8Hz. Porém, no caso em que p_H oscila em 8Hz (azul), mesma frequência de p_G , percebemos que as curvas de fluxo se deslocam para cima pois o vaso dilata quando o gradiente é positivo e contrai quando o gradiente é negativo.

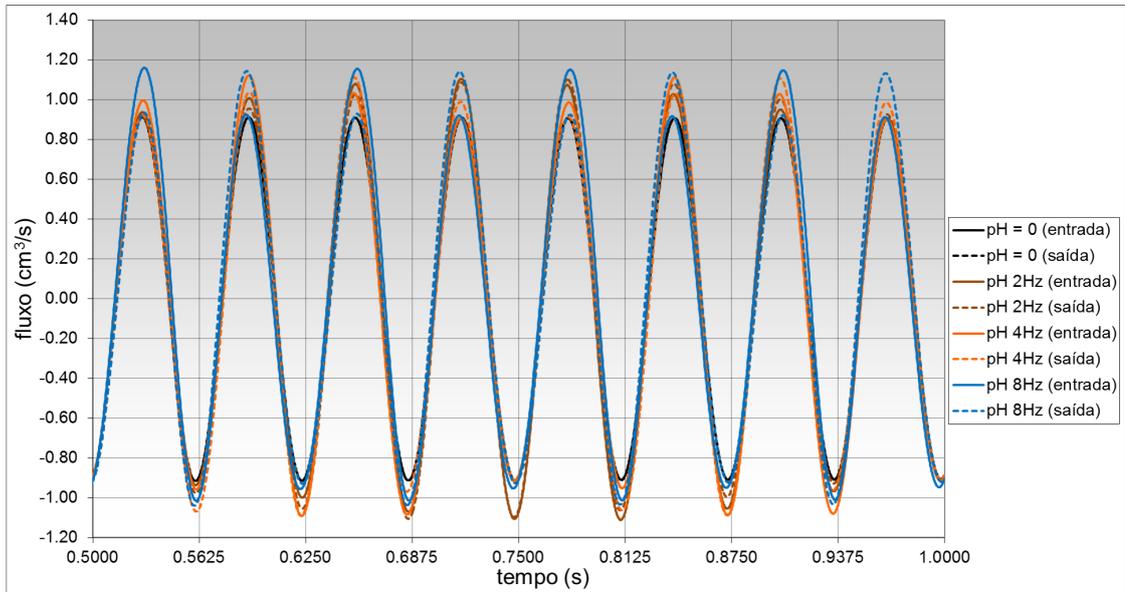


Figura 4.25: Fluxos na entrada e saída do vaso provenientes das soluções numéricas ao oscilar p_G com frequência de 16Hz (amplitude de 0,8mmHg) e p_H com frequências de 2Hz, 4Hz e 8Hz (amplitude de 40mmHg), além do caso com $p_H = 0$.

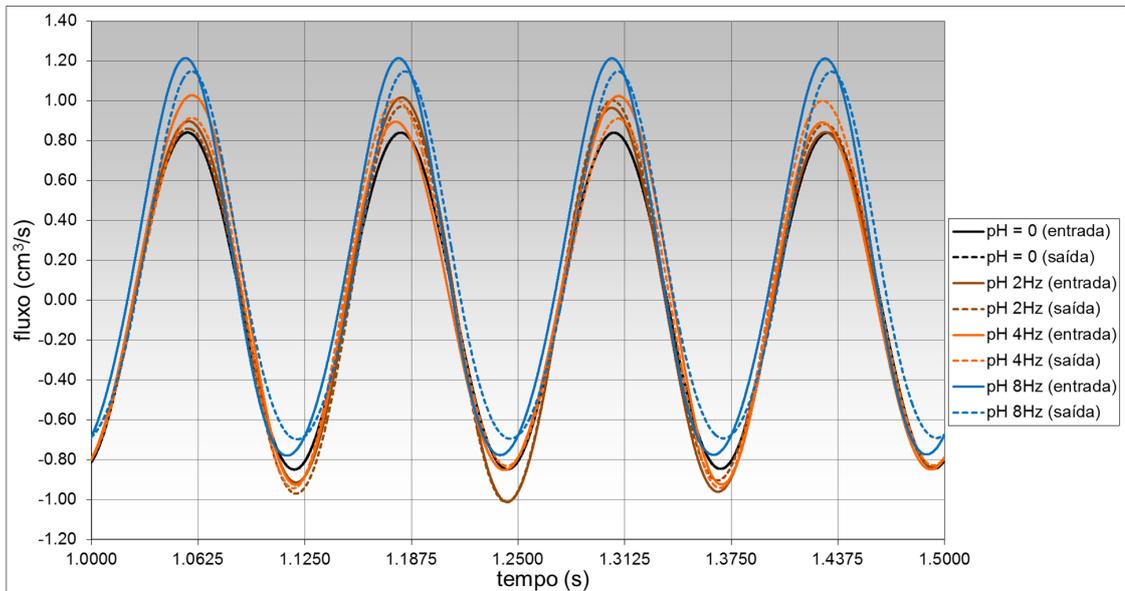


Figura 4.26: Fluxos na entrada e saída do vaso provenientes das soluções numéricas ao oscilar p_G com frequência de 8Hz (amplitude de 0,4mmHg) e p_H com frequências de 2Hz, 4Hz e 8Hz (amplitude de 40mmHg), além do caso com $p_H = 0$.

Na Figura 4.27 mostramos os fluxos na entrada e saída do vaso submetido a um gradiente de pressão com frequência de 4Hz. Assim como nos casos anteriores, podemos observar comportamentos semelhantes dos fluxos com frequências de oscilação de p_H até a frequência de p_G . Porém, no caso em que p_H oscila em 8Hz (azul), frequência maior que a de p_G , percebemos que as curvas de fluxo perdem o

formato senoidal devido às contrações e dilatações do vaso.

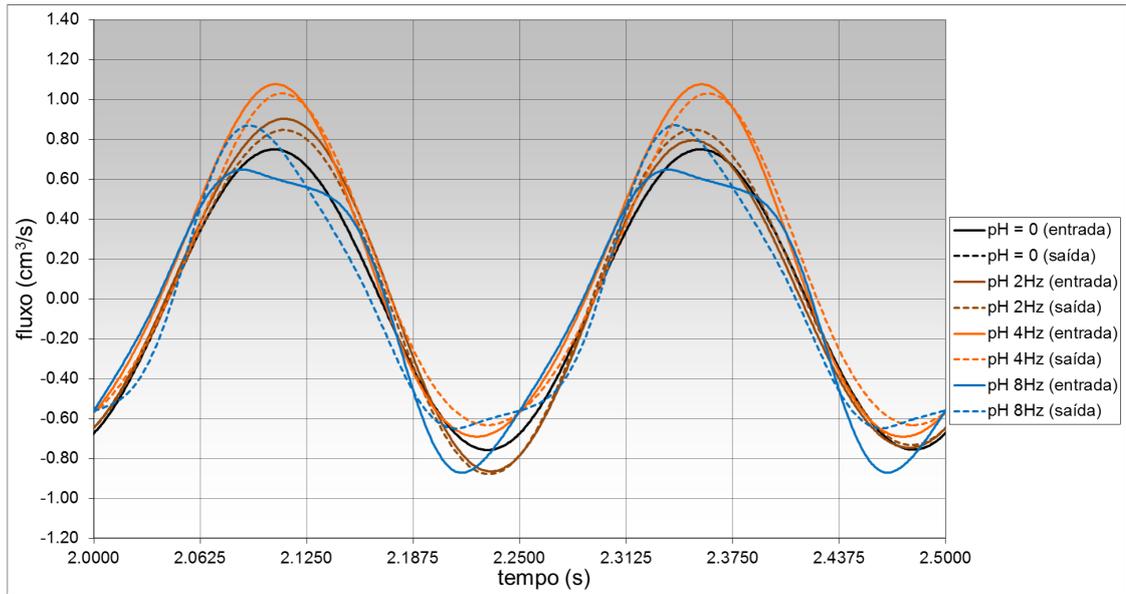


Figura 4.27: Fluxos na entrada e saída do vaso provenientes das soluções numéricas ao oscilar p_G com frequência de 4Hz (amplitude de 0,2mmHg) e p_H com frequências de 2Hz, 4Hz e 8Hz (amplitude de 40mmHg), além do caso com $p_H = 0$.

Na Figura 4.28 mostramos os fluxos na entrada e saída do vaso submetido a um gradiente de pressão com frequência de 2Hz. Aqui destaca-se o caso em que p_H oscila em 8Hz (azul), frequência quatro vezes maior que a de p_G . Nele observamos a intercalação dos fluxos de entrada e saída por 8 vezes durante um período de oscilação p_G .

Assim como no primeiro teste, os resultados do segundo teste não foram afetados ao usar um passo temporal 4 vezes maior para a estrutura. Além disso, ao reduzir o passo temporal do fluido pela metade os fluxos medidos variaram menos de 1%, mostrando que o passo temporal adotado é adequado para tais problemas.

Podemos concluir destes experimentos que a abordagem de decomposição da pressão proposta nesta seção permite a modelagem de condições de pressão fisiológicas através do método acoplado LB-IB, mesmo em malhas pouco refinadas como a testada. Vale a pena frisar que, no método de *lattice* Boltzmann, isto não é viável com a abordagem tradicional de imposição da pressão total nas extremidades do vaso. Veremos no próximo capítulo simulações do escoamento sanguíneo em segmentos arteriais específicos. Comparando os resultados de modelos 1D com

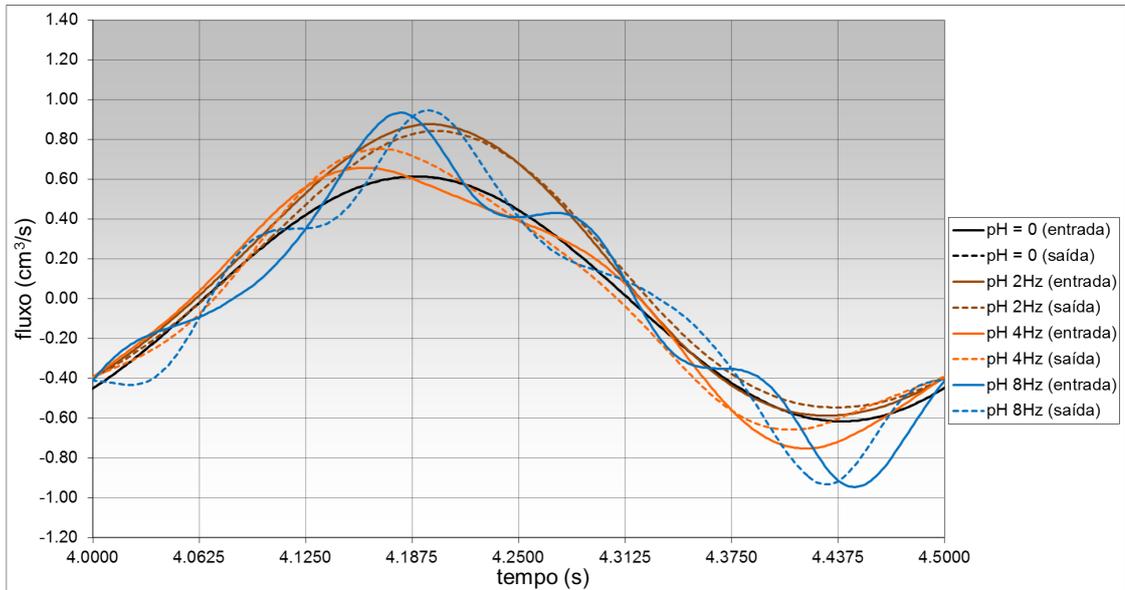


Figura 4.28: Fluxos na entrada e saída do vaso provenientes das soluções numéricas ao oscilar p_G com frequência de 2Hz (amplitude de 0,1mmHg) e p_H com frequências de 2Hz, 4Hz e 8Hz (amplitude de 40mmHg), além do caso com $p_H = 0$.

modelos 3D e modelos acoplados 1D-3D.

Ressaltamos que estes resultados não implicam que o escoamento sanguíneo em qualquer segmento arterial possa ser modelado com uma malha pouco refinada. A necessidade de malhas mais refinadas surge em problemas com números de Reynolds mais elevados ou comprimentos característicos maiores. Pois, estes casos requerem passos temporais menores (o que implica em τ menor), que podem levar a instabilidades numéricas se a malha não for refinada o suficiente.

Repare que, nos exemplos apresentados no segundo teste, o passo temporal foi o adequado para manter o número de Mach abaixo de 0,1. Isto indica que, para valores de Reynolds desta ordem ou maiores, o acoplamento com a estrutura não requer modificações no passo temporal do fluido. Algo semelhante ocorre quando o comprimento característico do vaso é maior que este e mantemos $\theta_r \geq 30$. Ambos casos, que requerem um passo temporal pequeno no LBM, são comumente encontrados em problemas de hemodinâmica em artérias. Desta forma, a introdução de paredes flexíveis em problemas de hemodinâmica não se mostra custosa, pois, em muitos casos, não afeta o passo temporal do fluido e o acoplamento com a estrutura pode ser feito a cada 4 passos temporais do fluido.

Contribuições do Capítulo

Neste capítulo apresentamos as metodologias propostas para modelar interações do tipo fluido-estrutura, com foco na modelagem da interação de um fluido escoando internamente por estruturas tubulares com capacidade de deformação. As principais contribuições do capítulo foram:

- a extensão e implementação dos modelos usados de fronteira imersa para problemas tridimensionais;
- a análise dos parâmetros numéricos introduzidos pela fronteira imersa e pelo acoplamento com o LBM, através de experimentos numéricos de forma a entender o impacto no modelo físico e no desempenho computacional em estruturas tubulares (Seções 4.4, 4.5 e 4.6);
- a proposta e análise do uso de passo temporais distintos para o fluido e para a estrutura, visando redução de custo computacional (Seção 4.5);
- a proposta e teste de uma metodologia para a decomposição do efeito da pressão arterial em componentes hidrostática e proveniente do gradiente de pressão, visando manter a estabilidade e acurácia do método LB-IB perante grandes variações da pressão hidrostática, como ocorre no sistema cardiovascular (Seção 4.6).

Capítulo 5

Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos

Neste capítulo tratamos do acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos na modelagem de escoamentos incompressíveis em vasos deformáveis. Esta abordagem visa, por um lado, reduzir o custo computacional das simulações ao substituir porções tridimensionais do domínio por modelos simplificados unidimensionais. Por outro lado, como dito na introdução, o principal interesse neste tipo de abordagem surge no momento de definir as condições de contorno para modelos tridimensionais quando isolados do resto do sistema. De fato, os modelos unidimensionais são capazes de prover o ambiente hemodinâmico imposto pelo resto do sistema cardiovascular (ou regiões vasculares adjacentes) a um custo relativamente baixo.

Os métodos numéricos usados para modelar o escoamento em domínios tridimensionais e suas interações com estruturas foram detalhados nos capítulos anteriores (modelagem de escoamentos em domínios rígidos nos Capítulos 2 e 3 e modelagem das interações fluido-estrutura no Capítulo 4). Enquanto o método numérico adotado na modelagem de escoamentos de forma unidimensional será detalhado no presente capítulo, juntamente com o seu acoplamento aos métodos anteriormente mencionados.

Começamos este capítulo revisando os avanços feitos nos últimos anos no acoplamento de modelos tridimensionais a modelos simplificados na Seção 5.1.

Para então descrever as equações de Navier–Stokes, condensadas à dimensão axial em estruturas tubulares, e sua discretização através de um método de diferenças finitas (DF) na Seção 5.2. Em seguida, tratamos da estimativa de perfis de velocidade consistentes com o regime do escoamento, assumidos *a priori* no modelo unidimensional, através da composição de soluções de Womersley na Seção 5.3. Verificamos e analisamos a implementação deste modelo através de simulações de escoamentos em vasos na Seção 5.4. O acoplamento entre este modelo unidimensional e o modelo tridimensional descrito anteriormente é detalhado na Seção 5.5, onde propomos também o uso de distintos esquemas numéricos de acoplamento. Este modelo acoplado é testado em problemas acadêmicos de escoamentos em vasos na Seção 5.6. Por fim, aplicamos o modelo acoplado na modelagem de escoamentos sanguíneos em dois segmentos arteriais (de grande e médio calibre), com geometria simplificada no formato cilíndrico e condições de escoamento fisiológicas, na Seção 5.7.

5.1 Introdução

Devido ao alto custo computacional e aos, ainda, limitados métodos disponíveis para aquisição de imagens médicas, resulta quase impraticável modelar e simular computacionalmente de maneira detalhada (3D) a hemodinâmica que ocorre em todo o SCVH. Além disso, ao modelar tridimensionalmente segmentos arteriais isolados surgem, naturalmente, incertezas sobre as condições de contorno a serem impostas nos contornos artificiais que emergem ao realizar o isolamento do distrito de interesse. Por isso, diante da necessidade de uma modelagem acurada de escoamentos em distritos específicos de interesse levando em consideração a dinâmica do sistema completo, foram introduzidos os modelos acoplados 1D-3D em Formaggia (2001), Formaggia et al. (2003), Urquiza et al. (2006), Vignon-Clementel et al. (2006), Blanco et al. (2007) e Blanco et al. (2010). A derivação destes modelos pode surgir da análise de equações diferenciais parciais [Formaggia (2001)], princípios variacionais [Blanco et al. (2007)] ou análises baseadas na impedância

[Vignon-Clementel et al. (2006)]. Nestes trabalhos foram empregadas aproximações por elementos finitos para a resolução do escoamento sanguíneo no espaço 3D.

Assim sendo, a alternativa viável é modelar de maneira detalhada (3D) os segmentos arteriais de maior interesse (hemodinâmica local) e modelar de maneira simplificada (1D) o restante do sistema (hemodinâmica global). Nesta abordagem, após o modelo global 1D ser calibrado, este é usado como um fornecedor de condições de contorno auto-adaptativas para os modelos 3D.

Neste trabalho propomos um modelo de acoplamento 1D-3D sendo que na parte unidimensional usaremos um método de diferenças finitas e na parte 3D usaremos o LBM. Escolhemos o método explícito de diferenças finitas (assim como o LBM), proposto por Kufahl e Clark (1985), para o modelo unidimensional, visto que este usará um passo temporal ao menos tão pequeno quanto o do LBM. Este estudo está focado no acoplamento entre estes modelos e suas peculiaridades quando tratamos do escoamento sanguíneo em vasos de diferentes calibres. Por isso, nos limitaremos à modelagem de segmentos arteriais, porém este estudo pode ser estendido a redes arteriais complexas sem maiores modificações no que tange ao acoplamento.

5.2 Modelo 1D

Nesta seção detalharemos o modelo unidimensional derivado das equações de Navier–Stokes (2.51), onde são tomados valores médios das quantidades de interesse sobre as seções transversais dos vasos (Seção 5.2.1). Em seguida, estudaremos o método numérico de diferenças finitas proposto por Kufahl e Clark (1985) para discretizar tais equações (Seção 5.2.2).

5.2.1 Equações de balanço

No modelo unidimensional das equações de Navier–Stokes as quantidades de interesse são o fluxo através de uma seção transversal do vaso, a pressão média e a área desta seção. No modelo apresentado a seguir as curvaturas dos vasos não são

consideradas e o perfil de velocidade pode assumir formas gerais.

Os detalhes sobre a dedução destas equações a partir das equações tridimensionais podem ser encontrados nos trabalhos de Hughes e Lubliner (1973) e Wan et al. (2002).

No modelo unidimensional o balanço da quantidade de movimento é dado por:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \frac{Q^2}{A} \right) + \frac{A}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + 2\pi\nu R_0 \zeta \frac{Q}{A} = 0, \quad (5.1)$$

onde Q representa o fluxo, p representa a pressão e A a área de uma seção transversal. Além disso, os termos α e ζ dependem do perfil de velocidade assumido para efetuar a redução ao problema unidimensional (assumindo valores constantes no caso de perfil parabólico ou plano), conforme abaixo:

$$\alpha = \frac{A}{Q^2} \int_A u^2 dA \quad \Rightarrow \quad \alpha = \frac{4}{3} \text{ (com perfil parabólico)} \quad (5.2)$$

e

$$\zeta = \left. \frac{\partial \Omega}{\partial r} \right|_{r=R_0} \quad \Rightarrow \quad \zeta = -\frac{4}{R_0} \text{ (com perfil parabólico)}, \quad (5.3)$$

onde

$$\Omega(t, x, r) = \frac{u(t, x, r) A_0}{Q}. \quad (5.4)$$

No caso de um perfil parabólico, temos os valores constantes $\alpha = 4/3$ e $\zeta = -4/R_0$ e, no caso de um perfil plano, temos $\alpha = 1$ e ζ tende a infinito.

O balanço de massa é feito através da equivalência entre a variação temporal da área e a variação espacial do fluxo, conforme:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0. \quad (5.5)$$

Neste trabalho, o comportamento constitutivo da parede arterial será modelado como puramente elástico, da forma:

$$p(A) = p_0 + \frac{Eh_0}{R_0} \left(\sqrt{\frac{A}{A_0}} - 1 \right), \quad A_0 = \pi R_0^2, \quad (5.6)$$

onde E é o módulo de elasticidade, R o raio da artéria, h a espessura da parede arterial e o índice 0 indica valores de referência.

Assim, podemos reescrever a equação constitutiva (5.6) da forma:

$$\sqrt{A} = \sqrt{A_0} \left[(p - p_0) \frac{R_0}{Eh_0} + 1 \right] \quad (5.7)$$

e, portanto,

$$\frac{\partial A}{\partial p} = \frac{R_0}{Eh_0} 2\sqrt{A_0 A}. \quad (5.8)$$

Tal relação será usada na discretização do modelo contínuo, apresentada a seguir.

5.2.2 Esquema de diferenças finitas

Para discretizar estas equações, optamos pelo método explícito de diferenças finitas (DF) proposto por Kufahl e Clark (1985). Esta escolha se deve ao fato de este método conseguir modelar de forma satisfatória o escoamento sanguíneo, mesmo em regiões com anastomoses e circuitos fechados (como no círculo de Willis), sendo ao mesmo tempo um método de fácil implementação computacional. A escolha de um método explícito também é conveniente pois o acoplamento com o modelo explícito tridimensional se dará a cada passo temporal (o qual já é pequeno). Entretanto, este último fato poderia ser contornado se usados métodos numéricos implícitos para o problema 1D.

Neste método numérico, a pressão (e a área) e o fluxo são calculados em pontos alternados, conforme ilustrado na Figura 5.1. De forma que os pontos onde a pressão é calculada estão a meio passo espacial ($\Delta x/2$) de distância dos pontos onde o fluxo é calculado.

O processo de discretização das equações de balanço da massa (5.5) e do momento (5.1) é detalhado a seguir [Kufahl e Clark (1985)]. Empregando a relação:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} \frac{\partial A}{\partial p}, \quad (5.9)$$

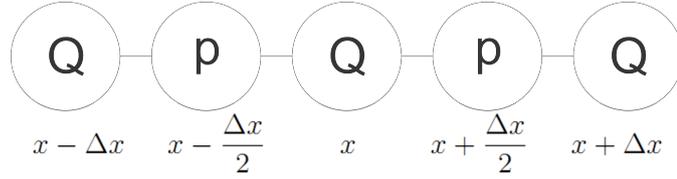


Figura 5.1: Ilustração da intercalação dos nós onde são calculados a pressão e o fluxo no modelo 1D por diferenças finitas.

a equação do balanço de massa (5.5) fica:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{\frac{\partial A}{\partial p}} \frac{\partial Q}{\partial x} = 0. \quad (5.10)$$

Faremos as seguintes aproximações nas derivadas parciais, considerando um ponto na posição $x + \Delta x/2$:

$$\frac{\partial p}{\partial t} \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} \approx \frac{p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} - p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t}{\Delta t}, \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \approx \frac{Q_{x+\Delta x}^t - Q_x^t}{\Delta x}, \quad (5.12)$$

para chegar à versão discretizada da equação de balanço de massa:

$$p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} = p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - \frac{1}{\left(\frac{\partial A}{\partial p}\right)^t} \frac{\Delta t}{\Delta x} (Q_{x+\Delta x}^t - Q_x^t), \quad (5.13)$$

onde, da equação (5.8), temos:

$$\frac{\partial A}{\partial p} \Big|_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t = \frac{R_0}{Eh_0} 2\sqrt{A_0 A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t}. \quad (5.14)$$

Para discretizar a equação de balanço da quantidade de movimento, aproximamos a derivada temporal, considerando um ponto na posição x , da forma:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} \Big|_x^{t+\Delta t} \approx \frac{Q_x^{t+\Delta t} - Q_x^t}{\Delta t}, \quad (5.15)$$

e as derivadas espaciais segundo a orientação do fluxo, se $Q(x, t) < 0$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \frac{Q^2}{A} \right) \Big|_x^t \approx \frac{\alpha_{x+\Delta x}^t (Q_{x+\Delta x}^t)^2 - \alpha_x^t (Q_x^t)^2}{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \Delta x} - \frac{\alpha_x^t Q_x^{t+\Delta t} Q_x^t}{(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t)^2} \left[\frac{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t}{\Delta x} \right] \quad (5.16)$$

e, se $Q(x, t) > 0$, temos:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha \frac{Q^2}{A} \right) \Big|_x^t \approx \frac{\alpha_x^t (Q_x^t)^2 - \alpha_{x-\Delta x}^t (Q_{x-\Delta x}^t)^2}{A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t \Delta x} - \frac{\alpha_x^t Q_x^{t+\Delta t} Q_x^t}{(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t)^2} \left[\frac{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t}{\Delta x} \right]. \quad (5.17)$$

O termo da derivada espacial da pressão é aproximado da forma:

$$\frac{A}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_x^{t+\Delta t} \approx \frac{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t}}{\rho \Delta x}. \quad (5.18)$$

Logo, o modelo resulta nas seguintes equações para atualização da pressão e do fluxo:

$$p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} = p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - \frac{1}{\frac{2R_0}{Eh_0} \sqrt{A_0 A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t}} \frac{\Delta t}{\Delta x} (Q_{x+\Delta x}^t - Q_x^t) \quad (5.19)$$

$$Q_x^{t+\Delta t} = \left\{ Q_x^t - \Delta t \left[\frac{1}{\rho \Delta x} \left(A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} \right) + \frac{\alpha_{x+\Delta x}^t (Q_{x+\Delta x}^t)^2 - \alpha_x^t (Q_x^t)^2}{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \Delta x} + 2\pi\nu R_0 \varsigma \frac{Q_x^t}{\left(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t + A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \right) / 2} \right] \right\} / \left[1 - \Delta t \frac{\alpha_x^t Q_x^t}{(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t)^2} \left(\frac{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t}{\Delta x} \right) \right], \quad \text{para } Q(x, t) < 0 \quad (5.20)$$

e

$$\begin{aligned}
Q_x^{t+\Delta t} = & \left\{ Q_x^t - \Delta t \left[\frac{1}{\rho \Delta x} \left(A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} \right) \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\alpha_x^t (Q_x^t)^2 - \alpha_{x-\Delta x}^t (Q_{x-\Delta x}^t)^2}{A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t \Delta x} + 2\pi\nu R_0 \varsigma \frac{Q_x^t}{\left(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t + A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \right) / 2} \right] \right\} \\
& / \left[1 - \Delta t \frac{\alpha_x^t Q_x^t}{\left(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t \right)^2} \left(\frac{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t}{\Delta x} \right) \right], \quad \text{para } Q(x, t) > 0. \quad (5.21)
\end{aligned}$$

Perceba que o termo ς assume valores que tendem a infinito sempre que Q tender a zero, o que ocorre em alguns dos exemplos apresentados neste capítulo. Uma forma de superarmos isto seria impondo um valor limite para este termo, porém se tem que definir qual seria este valor limite de forma que não gere instabilidades na simulação e ainda aproxime de forma correta o problema.

A alternativa que propomos aqui é a seguinte mudança de variável:

$$\varsigma^* = \varsigma Q, \quad (5.22)$$

a qual faz com que o novo termo (ς^*) deixe de tender a infinito quando Q tende a zero. Com isso, modificamos as equações de diferenças finitas da atualização do fluxo (5.20)-(5.21) para:

$$\begin{aligned}
Q_x^{t+\Delta t} = & \left\{ Q_x^t - \Delta t \left[\frac{1}{\rho \Delta x} \left(A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} \right) \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\alpha_{x+\Delta x}^t (Q_{x+\Delta x}^t)^2 - \alpha_x^t (Q_x^t)^2}{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \Delta x} + 2\pi\nu R_0 \varsigma^* \frac{1}{\left(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t + A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \right) / 2} \right] \right\} \\
& / \left[1 - \Delta t \frac{\alpha_x^t Q_x^t}{\left(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t \right)^2} \left(\frac{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t}{\Delta x} \right) \right], \quad \text{para } Q(x, t) < 0 \quad (5.23)
\end{aligned}$$

e

$$Q_x^{t+\Delta t} = \left\{ Q_x^t - \Delta t \left[\frac{1}{\rho \Delta x} \left(A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t p_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{t+\Delta t} \right) + \frac{\alpha_x^t (Q_x^t)^2 - \alpha_{x-\Delta x}^t (Q_{x-\Delta x}^t)^2}{A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t \Delta x} + 2\pi \nu R_0 \zeta^* \frac{1}{\left(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t + A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t \right) / 2} \right] \right\} / \left[1 - \Delta t \frac{\alpha_x^t Q_x^t}{\left(A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t \right)^2} \left(\frac{A_{x+\frac{\Delta x}{2}}^t - A_{x-\frac{\Delta x}{2}}^t}{\Delta x} \right) \right], \quad \text{para } Q(x, t) > 0. \quad (5.24)$$

Repare que as equações (5.23)-(5.24) não possuem mais o termo de fluxo que existia nas equações (5.20)-(5.21). Portanto, se torna necessário que o fluxo inicial esteja consistente com a solução do problema, mesmo em problemas que atingem um estado estacionário ou periódico, pois o mesmo deixa de ser corrigido pelas equações.

5.3 Perfil de velocidade composto

O perfil de velocidade do escoamento pode afetar de forma significativa os resultados de uma simulação, em especial quando as frequências características da curva de fluxo estão associadas a altos números adimensionais de Womersley. Por isso, vamos explorar nesta seção uma abordagem para aproximar o perfil transiente associado à curva de fluxo em um segmento unidimensional.

No modelo unidimensional, o perfil de velocidade assumido afeta os valores dos parâmetros α e ζ (ver equações (5.2) e (5.3)). Como vimos anteriormente, no caso de um perfil parabólico, temos os valores constantes $\alpha = 4/3$ e $\zeta = -4/R_0$ e no caso de um perfil plano temos $\alpha = 1$ e ζ tende a infinito. Mas, estes valores podem variar significativamente com outros perfis mais complexos, afetando o escoamento.

Esta seção começa com o detalhamento da abordagem de construção do perfil de velocidade a partir da composição de soluções de Womersley referentes às frequências que caracterizam o escoamento (Seção 5.3.1). Em seguida, apresentamos o esquema iterativo para aproximar o perfil composto em um escoamento unidimensional (Seção 5.3.2).

5.3.1 Composição das soluções de Womersley

Usando a teoria de Womersley vamos propor uma forma de aproximar o perfil de velocidade no modelo 1D (o qual necessita desta informação *a priori*), baseada no trabalho de Reymond et al. (2009).

Consideremos inicialmente o escoamento em um tubo cilíndrico rígido sujeito a um gradiente de pressão com variação temporal senoidal, conforme ilustra a Figura 5.2. Onde os valores de α e ς do modelo 1D podem ser calculados a partir do perfil de velocidade deste escoamento.

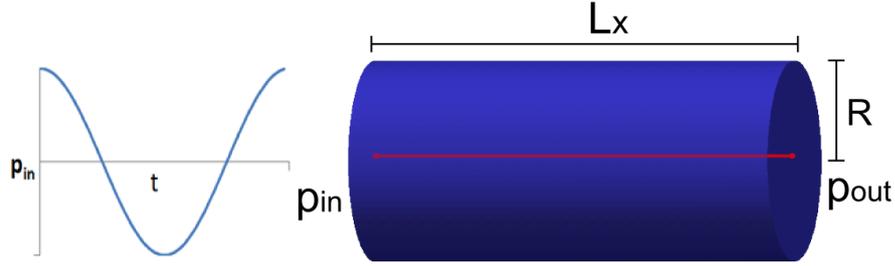


Figura 5.2: Figura ilustrativa do escoamento de Womersley em 3D e sua simplificação para um segmento 1D (vermelho).

A solução analítica do campo de velocidade deste problema é dada por [Womersley (1955)]:

$$u(r, t) = \text{Re} \left\{ \frac{\hat{Q}}{\pi R^2} \frac{\left[1 - \frac{J_0(\kappa \frac{r}{R} \hat{i}^{3/2})}{J_0(\kappa \hat{i}^{3/2})} \right]}{\left[1 - \frac{2J_1(\kappa \hat{i}^{3/2})}{\kappa \hat{i}^{3/2} J_0(\kappa \hat{i}^{3/2})} \right]} e^{\hat{i}\eta t} \right\}, \quad (5.25)$$

onde $J_0(\cdot)$ e $J_1(\cdot)$ são as funções de Bessel de primeira espécie e ordens 0 e 1, \hat{i} é a unidade imaginária, $\kappa = R\sqrt{\eta/\nu}$ é o número de Womersley. Onde assumimos que o fluxo é caracterizado pela amplitude $\hat{Q} \in \mathbb{C}$ e frequência η , da forma:

$$\begin{aligned} Q(t) &= \text{Re} \left\{ \hat{Q} e^{\hat{i}\eta t} \right\} \\ &= \text{Re} \left\{ [A - \hat{i}B][\cos(\eta t) + \hat{i} \sin(\eta t)] \right\} \\ &= A \cos(\eta t) + B \sin(\eta t). \end{aligned} \quad (5.26)$$

De forma geral, o escoamento em um vaso arterial do SCVH apresentará uma série de frequências características. Portanto, nosso interesse é discretizar uma

curva de fluxo nas componentes de frequência, de forma que possamos calcular o perfil de velocidade gerado por cada frequência discreta e, com isto, aproximar o perfil de velocidade deste escoamento. Aplicando a transformada discreta de Fourier, podemos aproximar a curva de fluxo com n frequências, associadas ao período T , como:

$$\begin{aligned} Q(t) &\approx Q_0 + \sum_{k=1}^{n-1} \operatorname{Re} \left\{ \hat{Q}_k e^{i\eta_k t} \right\} \\ &= Q_0 + \sum_{k=1}^{n-1} [A_k \cos(\eta_k t) + B_k \sin(\eta_k t)], \end{aligned} \quad (5.27)$$

onde $\eta_k = 2\pi k/T$.

Assim, o perfil de velocidade pode ser aproximado pela composição dos perfis de Womersley com os números de Womersley associados a cada frequência discreta usada, da forma:

$$u(r, t) \approx \frac{2}{\pi R^2} \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) Q_0 + \sum_{k=1}^{n-1} u_k(r, t), \quad (5.28)$$

onde os perfis são dados pela solução do escoamento de Womersley (5.25), da forma

$$u_k(r, t) = \operatorname{Re} \left\{ \frac{\hat{Q}_k}{\pi R^2} \frac{\left[1 - \frac{J_0(\kappa_k \frac{r}{R} i^{3/2})}{J_0(\kappa_k i^{3/2})} \right]}{\left[1 - \frac{2J_1(\kappa_k i^{3/2})}{\kappa_k i^{3/2} J_0(\kappa_k i^{3/2})} \right]} e^{i\eta_k t} \right\}. \quad (5.29)$$

Esta abordagem está baseada no escoamento em tubos rígidos, porém vamos assumir que é válida no caso de vasos deformáveis devido à baixa velocidade radial quando comparada com a axial.

5.3.2 Esquema iterativo para obter o perfil de velocidade

Vamos descrever a seguir o esquema iterativo proposto para aproximar o perfil de velocidade em um segmento unidimensional.

Como descrito acima, a curva de fluxo no intervalo da simulação determina um perfil de velocidade que pode ser composto por soluções do escoamento de

Womersley. Porém, assumindo este perfil de velocidade transiente o escoamento será modificado e, portanto, a curva de fluxo será afetada, modificando as distintas componentes de frequência. Por isso, necessitamos de um processo iterativo para encontrar este perfil de velocidade.

O esquema proposto consiste em usar a curva de fluxo da solução do problema unidimensional para estimar o perfil de velocidade transiente composto através das soluções conhecidas de Womersley, para então voltar a simular o problema unidimensional com o novo perfil transiente. Isto é, uma abordagem de iterações sucessivas. Seguindo este processo até que o seguinte critério de convergência seja satisfeito para cada nó do domínio 1D:

$$\frac{1}{N_T} \sum_{n=1}^{N_T} \frac{Q_n^m - Q_n^{m-1}}{Q_{max}} < \varepsilon, \quad (5.30)$$

onde N_T é o número de instantes temporais usados para representar a curva de fluxo e m representa a iteração.

Ilustramos na Figura 5.3 o fluxograma do esquema iterativo para obtenção do perfil de velocidade composto. Como condição inicial (etapa (A)) pode-se assumir um perfil de velocidade parabólico ou plano (constante no tempo) para então iniciar o processo iterativo. Mais detalhadamente, considerando que na iteração $m + 1$ temos da iteração anterior, em cada ponto do domínio 1D, o fluxo ($Q_{1D,n}^m$) e os termos α_n^m e ζ_n^m calculados a partir do perfil estimado, em N_T instantes de tempo, vamos usar uma abordagem do tipo Gauss-Seidel para calcular o fluxo através da simulação do escoamento 1D (etapa (B)) da forma:

$$Q_{1D,n}^{m+1} \Leftarrow \text{Solução 1D}[\alpha_n^m, \zeta_n^m], \quad n = 1, \dots, N_T, \quad (5.31)$$

e os termos do perfil de velocidade a partir do escoamento (etapas (C) e (D)), da forma:

$$(\alpha_n^{m+1}, \zeta_n^{m+1}) \Leftarrow \text{Estimativa perfil}[Q_{1D,n}^{m+1}], \quad n = 1, \dots, N_T, \quad (5.32)$$

onde os termos entre colchetes simbolizam os dados usados em cada etapa.

Ressaltamos que a estimativa do perfil de velocidade pode ser realizada de forma independente para cada nó do domínio 1D, porém a solução do escoamento 1D necessita dos perfis em todos os nós.

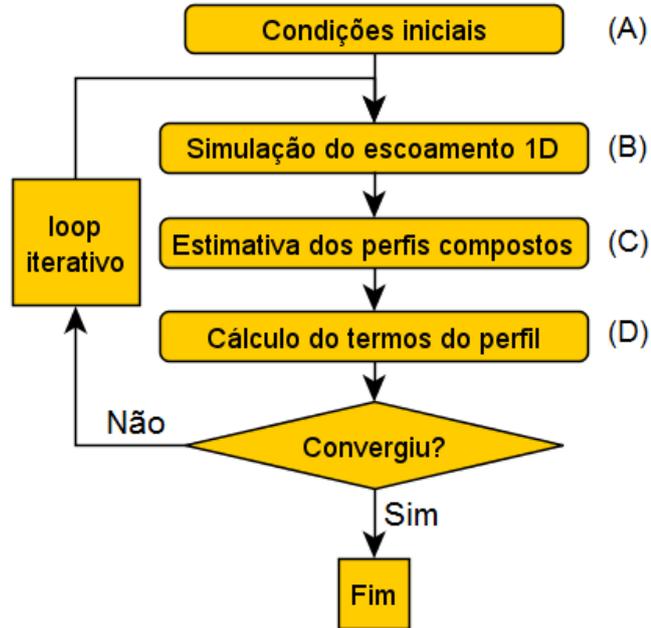


Figura 5.3: Fluxograma do esquema para estimar o perfil de velocidade transiente em um escoamento unidimensional.

A introdução de um termo de relaxamento pode acelerar e estabilizar este esquema iterativo, sendo feita da forma:

$$Q_{1D,n}^{m+1} \Leftarrow \text{Solução 1D}[\omega\alpha_n^m + (1 - \omega)\alpha_n^{m-1}, \omega\zeta_n^m + (1 - \omega)\zeta_n^{m-1}] \quad (5.33)$$

e

$$(\alpha_n^{m+1}, \zeta_n^{m+1}) \Leftarrow \text{Estimativa perfil}[\omega Q_{1D,n}^{m+1} + (1 - \omega)Q_{1D,n}^m], \quad (5.34)$$

para $n = 1, \dots, N_T$.

Perceba que esta técnica pode ser usada para aproximar o perfil de velocidade mesmo nos casos em que simulamos um escoamento unidimensional acoplado a um escoamento tridimensional. Onde se sugere modelar todo problema de forma unidimensional no momento da estimativa dos perfis velocidade para manter o baixo custo computacional.

Na Seção 5.7.2 aplicaremos esta técnica para estimar os perfis de velocidade de um escoamento sanguíneo na aorta abdominal.

5.4 Validações e exemplos numéricos do modelo 1D

Nesta seção, vamos analisar escoamentos em tubos através da sua modelagem unidimensional pelo método numérico apresentado neste capítulo. Aqui visamos validar a implementação e verificar a influência do perfil de velocidade assumido nos resultados de problemas transientes.

Na Seção 5.4.1, modelamos o escoamento estacionário de Poiseuille. Em seguida, na Seção 5.4.2, modelamos o escoamento transiente de Womersley, onde exploraremos a influência do perfil de velocidade para números de Womersley altos.

Nestes problemas vamos usar um valor para o coeficiente de elasticidade (E) grande o suficiente para que a área da seção transversal do vaso se mantenha quase constante, visando modelar um vaso sem complacência.

5.4.1 Escoamento de Poiseuille

Apresentamos inicialmente a implementação do escoamento estacionário de Poiseuille usando o método proposto por Kufahl e Clark (1985), detalhado na Seção 5.2.2. Este problema foi escolhido para fins de validação da implementação por possuir solução analítica. Para este problema, vamos assumir o perfil parabólico para o campo de velocidade, portanto temos os seguintes valores constantes para os termos dependentes do perfil de velocidade:

$$\alpha = \frac{A}{Q^2} \int_A u^2 dA = \frac{4}{3} \quad \text{e} \quad \varsigma = \frac{A}{Q} \frac{\partial u(t, x, r)}{\partial r} \Big|_{r=R_0} = -\frac{4}{R_0}. \quad (5.35)$$

Na modelagem unidimensional o tubo cilíndrico é representado por uma linha com os valores médios da velocidade e pressão sobre cada seção transversal, conforme ilustrado na Figura 5.4.

A solução das equações de Navier–Stokes pode ser achada de forma analítica

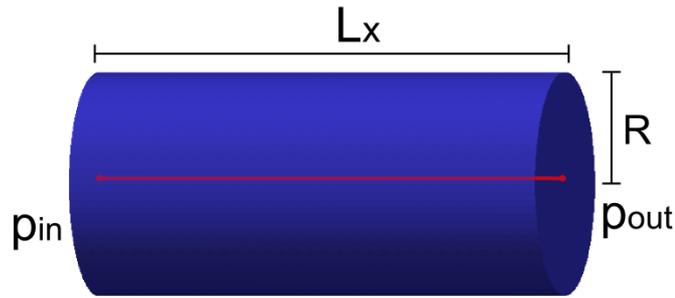


Figura 5.4: Figura ilustrativa do escoamento de Poiseuille em 1D.

neste caso simples e é descrita pelas seguintes equações

$$\begin{aligned}
 u_x(r) &= \frac{\Delta p}{4\nu\rho}(R - r)^2, \\
 u_y &= 0, \\
 u_z &= 0,
 \end{aligned}
 \tag{5.36}$$

$$p(x, y, z) = p_{in} + x\Delta p,$$

onde p é a pressão do fluido, $\Delta p = (p_{out} - p_{in})/L_x$ é o gradiente de pressão e r é a distância ao eixo do vaso.

Como o escoamento de Poiseuille não depende da coordenada axial, podemos resolvê-lo no modelo unidimensional independentemente do número de nós usados na discretização. Isto não ocorre na modelagem tridimensional, pois a seção transversal depende da discretização neste caso.

Simulamos o escoamento de Poiseuille com Reynolds de 1 a 1000 no modelo 1D usando apenas 3 nós. Para alterar o número de Reynolds modificamos a viscosidade do fluido. Verificamos que o escoamento é estável independentemente do número de Reynolds, desde que o número de Mach seja mantido baixo. Em todos os casos o erro relativo máximo foi da mesma ordem, próximo de 10^{-5} , e proveniente da complacência quase ínfima do vaso.

Neste problema, a estabilidade do modelo passa a depender da relação entre o passo temporal e as variações da área transversal, dependente do coeficiente de elasticidade (E), e das variações da pressão.

Como a simulação de um escoamento unidimensional tem custo

computacional muito menor que a de um escoamento tridimensional, vamos adotar nas simulações um passo temporal menor que o necessário para o modelo 1D. De forma que não iremos investigar aqui o passo temporal ideal para cada caso.

5.4.2 Escoamento de Womersley

A segunda implementação desta seção trata do escoamento transiente de Womersley em um tubo cilíndrico (ver Seção 3.3.2) modelado de forma unidimensional (ver Figura 5.2).

Em escoamentos com número de Womersley alto se estará cometendo um erro significativo ao assumir um perfil de velocidade parabólico para o modelo 1D. De fato, ao modelar o escoamento de Womersley com $Wo = 5$ e $Re = 100$ em um tubo com relação de aspecto 2/1 ($R = 0,5\text{ cm}$), obtemos curvas de fluxo com 30% de erro em relação à solução analítica. Mostramos na Figura 5.5 as curvas de fluxo médio no tubo, obtidas da solução numérica com perfil parabólico (vermelho) e da solução analítica do escoamento de Womersley (verde), ao longo de 6 períodos. O perfil parabólico superestima os valores de fluxo, pois no período característico curto deste problema o perfil não se desenvolve até o perfil parabólico como estamos assumindo.

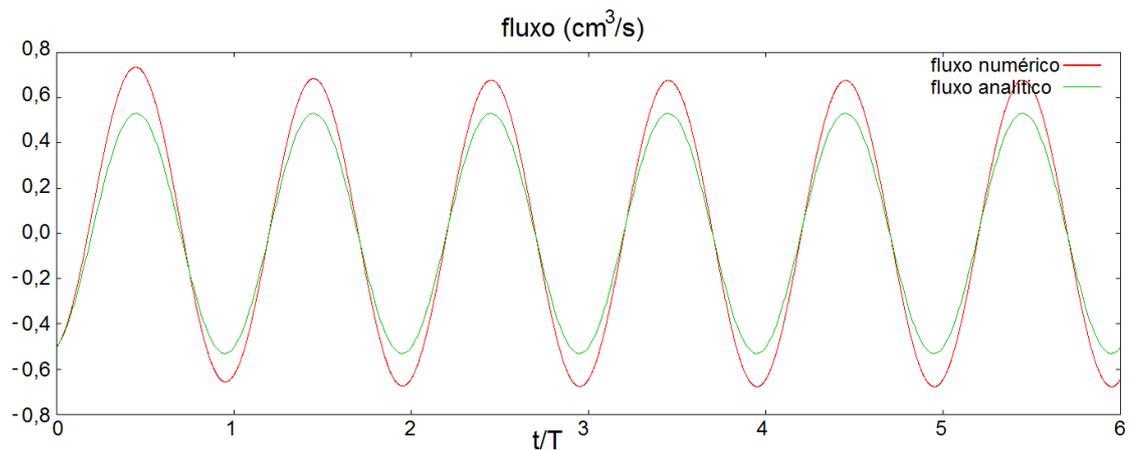


Figura 5.5: Curvas de fluxo médio no tubo ao longo de 6 períodos, obtidas da solução numérica com perfil parabólico (vermelho) e da solução analítica do escoamento de Womersley (verde).

Por isso, vamos usar o perfil de Womersley conhecido da solução analítica

(equação (3.16)) para calcular os termos α e ζ (ver equações (5.2) e (5.3)), variantes no tempo. Conforme mostramos na Figura 5.6, estes valores possuem assíntotas verticais nas singularidades que ocorrem quando o fluxo tende a zero.

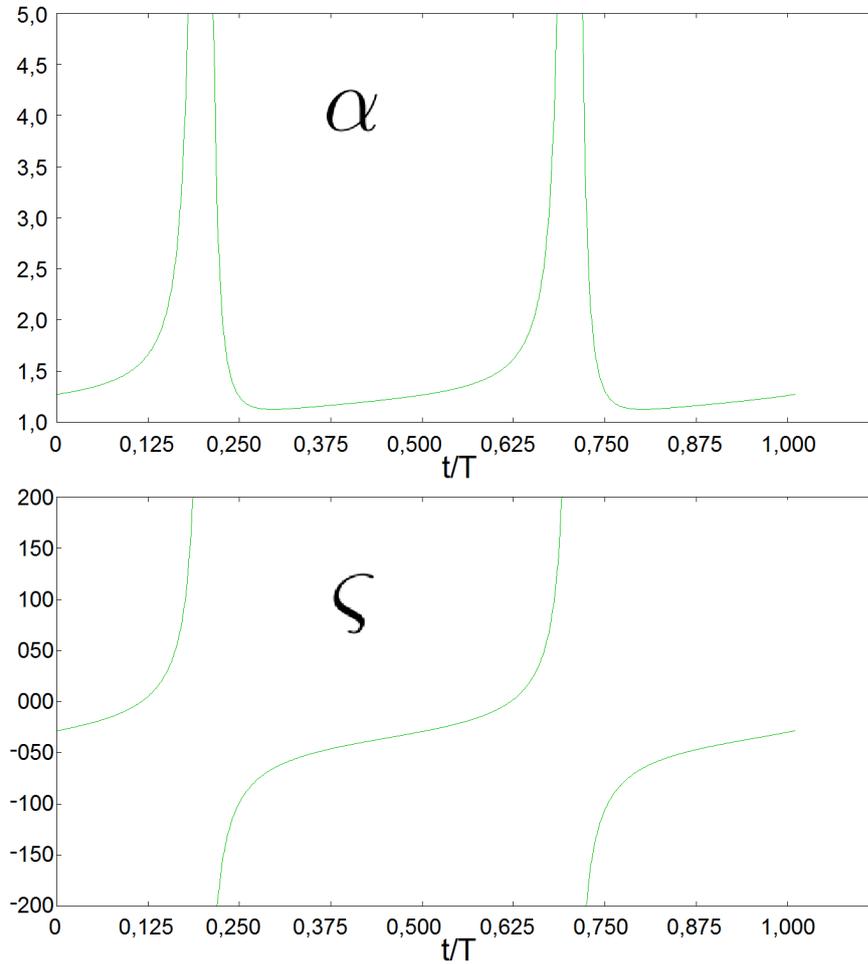


Figura 5.6: Valores dos termos α (acima) e ζ (abaixo) do modelo 1D ao longo de um ciclo do escoamento com $Wo = 5$.

Como, no escoamento de Womersley, a velocidade do fluido é constante na direção axial em um dado instante temporal, o termo α não influencia significativamente a solução por multiplicar um termo da derivada espacial do fluxo. Portanto, vamos mantê-lo fixo igual a 1 (valor referente a um perfil plano). Para contornar as singularidades nos valores de ζ tentamos inicialmente limitá-lo a um valor máximo e um mínimo, porém o modelo 1D se mostrou sensível a esta escolha e surgiram perturbações na solução pela irregularidade da curva de ζ . Por isso, vamos cancelar o termo de fluxo que o divide com o presente na equação de balanço da quantidade de movimento (5.1). Isto é, substituímos ζ por ζ^* ($= \zeta Q$),

conforme detalhado na Seção 5.2.2. Na Figura 5.7 mostramos a curva de ζ^* ao longo de um ciclo.

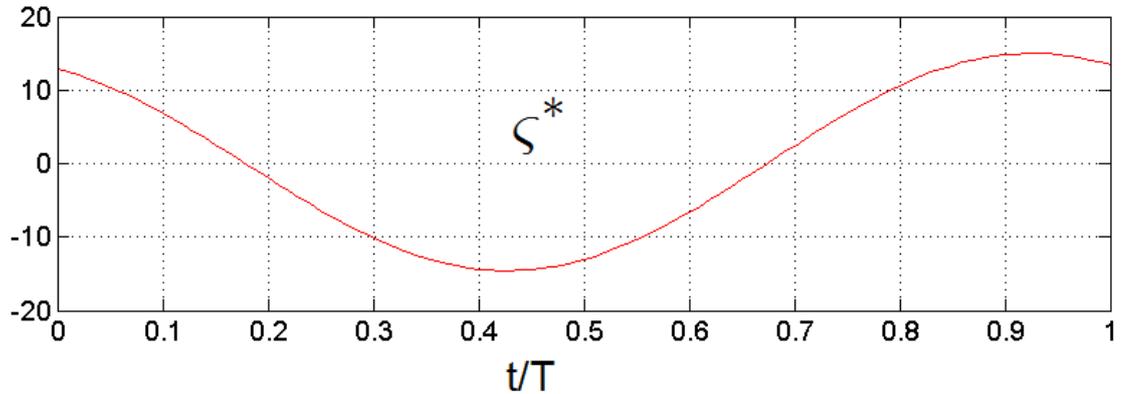


Figura 5.7: Valores do termo $\zeta^* = \zeta Q$ do modelo 1D ao longo de um ciclo do escoamento com $Wo = 5$ e $Re = 100$.

Usando estes valores de ζ^* , o fluxo da simulação numérica (vermelho) se torna consistente com a solução analítica de Womersley (verde), conforme vemos na Figura 5.8. Lembrando que, ao fazer esta troca de variável, a condição inicial deve ser consistente ou a curva de fluxo ficará deslocada.

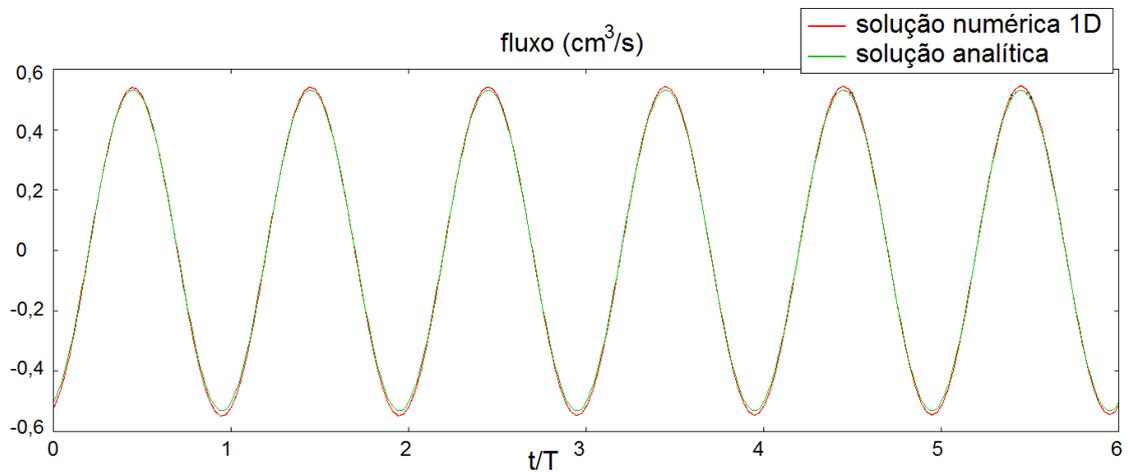


Figura 5.8: Comparação do fluxo médio no tubo obtido do modelo 1D (vermelho), com ζ^* do perfil de Womersley, e da solução analítica do escoamento de Womersley (verde) ao longo de 6 ciclos.

Em conclusão, as principais diferenças observadas na Figura 5.5 surgem porque os efeitos viscosos levados em conta por meio da hipótese de perfil parabólico são significativamente diferentes dos efeitos viscosos no caso de fluxo pulsátil. Como veremos na Seção 5.7, sobre a modelagem do escoamento sanguíneo, o perfil

de velocidade assumido também influencia significativamente nas curvas de fluxo obtidas pelo modelo 1D.

5.5 Acoplamento entre o modelo 1D e o modelo 3D

Nesta seção vamos explorar as possíveis formas de acoplamento entre os modelos 1D e 3D e os esquemas numéricos que podem ser usados para realizar tal acoplamento.

Como condições de acoplamento entre os modelos 3D e 1D devemos ter a conservação da massa e o equilíbrio de esforços na interface de acoplamento, o que implica na classe de modelos com a qual estamos trabalhando a continuidade da pressão nestas interfaces de acoplamento Γ_i . Assim, tais condições de acoplamento podem ser escritas da forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_i^{1D} = \int_{\Gamma_i} \mathbf{u}^{3D} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma_i, \quad i = 1, \dots, N_{cf} \quad (\text{Acoplamento 3D} \rightarrow \text{1D}) \\ p^{3D} \Big|_{\Gamma_i} = p_i^{1D}, \quad i = 1, \dots, N_{cf} \quad (\text{Acoplamento 1D} \rightarrow \text{3D}) \end{array} \right. \quad (5.37)$$

onde N_{cf} é o número de faces de acoplamento, Q_i^{1D} e p_i^{1D} são o fluxo e a pressão dados pelo modelo unidimensional no ponto correspondente à face de acoplamento Γ_i de normal \mathbf{n} e p^{3D} e \mathbf{u}^{3D} são a pressão e a velocidade no modelo 3D.

No método proposto a seguir vamos transferir o fluxo do modelo 3D para o 1D e a pressão do modelo 1D para o 3D. Pode-se fazer o acoplamento de diferentes formas, porém adotamos esta por permitir que o modelo 3D desenvolva o perfil de velocidade na interface, sem que seja imposto.

Destacamos também a importância de modelar a complacência dos vasos de forma equivalente. Como vimos anteriormente, a área de uma seção do vaso no modelo 1D segue a equação:

$$\sqrt{A} = \sqrt{A_0} \left[(p - p_0) \frac{R_0}{Eh_0} + 1 \right] \quad (5.38)$$

e, portanto o raio varia da forma:

$$R = R_0 \left[(p - p_0) \frac{R_0}{Eh_0} + 1 \right]. \quad (5.39)$$

Por outro lado, no modelo 3D temos que o deslocamento de um nó da parede na direção radial ocorre da forma:

$$\mathbf{X} = \mathbf{Z} - \frac{\mathbf{F}}{k_f}, \quad (5.40)$$

ou seja, o raio se modifica da forma:

$$R = R_0 - \frac{F_R}{k_f}, \quad (5.41)$$

sendo F_R a componente da força na direção radial.

Assumindo que, como feito no modelo 1D, a pressão é a principal responsável pelo deslocamento da parede na direção radial, teremos de (5.39) e (5.41) a relação:

$$R_0 \left[(p - p_0) \frac{R_0}{Eh_0} + 1 \right] = R_0 + \frac{(p - p_0)}{k_f}, \quad (5.42)$$

logo, chegamos à relação de equivalência entre os modelos:

$$k_f = \frac{Eh_0}{R_0^2}. \quad (5.43)$$

Portanto quando modelarmos a parede de um vaso através de um modelo acoplado 1D-3D estaremos respeitando a relação (5.43).

Vamos ver a seguir alguns dos diferentes esquemas numéricos para realizar este acoplamento entre os modelo 1D e 3D (Seção 5.5.1) e as particularidades do acoplamento entre os métodos numéricos de diferenças finitas e *lattice* Boltzmann (Seção 5.5.2). Tais esquemas serão testados nos exemplos numéricos das Seções 5.6 e 5.7.

5.5.1 Esquemas numéricos de acoplamento

Propomos a seguir esquemas numéricos de acoplamento baseados no método Gauss–Seidel (i.e. usando a informação mais atual disponível):

- (1) Gauss–Seidel: nesta abordagem resolvemos de forma explícita o acoplamento entre os modelos 1D e 3D. Mais detalhadamente, podemos começar realizando um passo temporal do modelo 1D e passar a pressão atualizada na interface para realizar um passo temporal do modelo 3D. Para, em seguida, realizar o passo temporal seguinte do modelo 1D com o fluxo recém obtido na interface do modelo 3D.
- (2) Gauss–Seidel + interpolação: esta abordagem pode ser usada quando o passo temporal do modelo 1D é menor que o passo do modelo 3D. Nela acrescentamos ao esquema (1) uma interpolação linear (podendo ser de mais alta ordem) do fluxo do modelo 3D na interface passado ao modelo 1D, para evitar grandes saltos e manter o modelo 1D estável.
- (3) Gauss–Seidel + iterações: aqui introduzimos ao esquema (1) iterações da resolução de um passo temporal dos modelos 1D e 3D até que um critério de convergência seja atingido. Adotamos a seguinte condição, baseada na variação relativa da pressão do modelo 1D em cada interface entre as iterações m e $m + 1$:

$$\frac{|p_{i,m+1}^{1D} - p_{i,m}^{1D}|}{p_{\max}} < \varepsilon, \quad i = 1, \dots, N_{cf}. \quad (5.44)$$

- (4) Gauss–Seidel + iterações + sub-relaxação: para aumentar a estabilidade e acelerar a convergência do esquema (3), propomos ainda o uso de um parâmetro de sub-relaxação (ω) para as informações transmitidas entre os dois modelos, da forma:

$$Q_{i,m+1}^{1D} = \int_{\Gamma_i} [\omega \mathbf{u}_m^{3D} + (1 - \omega) \mathbf{u}_{m-1}^{3D}] \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma_i, \quad i = 1, \dots, N_{cf} \quad (5.45)$$

$$p_{m+1}^{3D} \Big|_{\Gamma_i} = \omega p_{i,m+1}^{1D} + (1 - \omega) p_{i,m}^{1D}, \quad i = 1, \dots, N_{cf}. \quad (5.46)$$

Observe que diferentes combinações destes esquemas podem ser usadas. Na Seção 5.6, testaremos estas combinações e seus efeitos na estabilidade, acurácia e custo computacional de simulações.

Mostramos na Figura 5.9 o fluxograma do método acoplado 1D-3D, com detalhamento das rotinas do modelo 1D e das rotinas de acoplamento, onde Δt_1 é o passo temporal do modelo 1D e Δt_f é o passo temporal do fluido no modelo 3D. Neste fluxograma incluímos todos os esquemas numéricos para o acoplamento descritos acima. Onde o esquema (2) inclui no fluxograma a rotina (D) e o loop no tempo com passo Δt_1 , o esquema (3) inclui o loop iterativo 1D-3D e o esquema (4) inclui o relaxamento mencionado entre a troca de informações dos modelos.

A rotina (I), de atualização da parte 3D no domínio correspondente, refere-se à solução de um passo temporal do problema tridimensional (fluido e estrutura, se presente). Ou seja, esta rotina pode representar os passos descritos no fluxograma da Figura 2.1 (rotinas (B)-(D)) em problemas somente do escoamento de fluidos ou os passos descritos no fluxograma da Figura 4.2 (rotinas (B)-(H)) em problemas com interação fluido-estrutura. No caso do uso de passos temporais maiores para a estrutura que para o fluido, o loop com passo Δt_f do fluxograma da Figura 4.14 seria substituído pelo loop com passo Δt_f do fluxograma da Figura 5.9.

5.5.2 Acoplamento entre os métodos de DF e LB

Nesta seção vamos explorar os detalhes do acoplamento entre os métodos de diferenças finitas (usado no modelo 1D) e de *lattice* Boltzmann (usado no modelo 3D).

Como vimos acima, o modelo 1D irá receber o fluxo proveniente do modelo 3D e transmitir a pressão em retorno. Este fluxo é calculado integrando-se a componente normal da velocidade do modelo 3D na interface de acoplamento, conforme escrito na equação (5.37). A pressão obtida do modelo 1D é imposta como condição de contorno no modelo 3D, nas mesmas células usadas para calcular

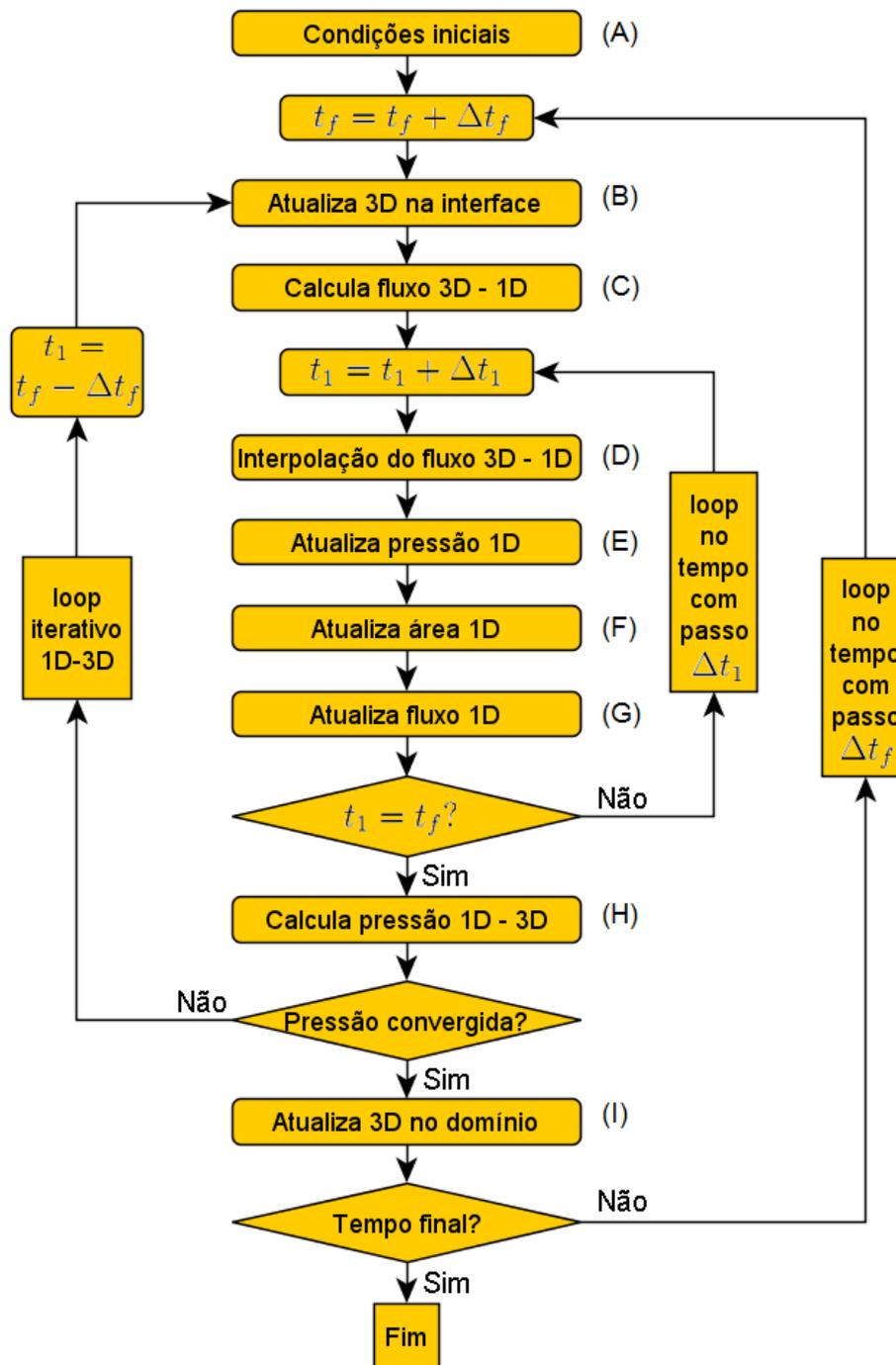


Figura 5.9: Fluxograma das rotinas do método acoplado 1D-3D implícito com iterações sucessivas do método de Gauss-Seidel.

o fluxo.

Já no modelo 1D, visto que o fluxo e pressão são calculados em pontos intercalados no método de diferenças finitas escolhido (ver Figura 5.1), optamos por usar um ponto onde se calcula o fluxo para representar a interface de acoplamento entre os modelos. De forma que o fluxo recebido do modelo 3D é diretamente

imposto como condição de contorno do modelo 1D. Por outro lado, temos que estimar a pressão no ponto de interface do modelo 1D, pois a mesma é calculada a meio espaçamento de distância na direção do interior do domínio. Para isso, fazemos uma extrapolação linear dos valores da pressão nos dois nós mais próximos, da forma (supondo que os nós mais próximos estejam na direção decrescente da coordenada espacial):

$$p_x \approx \frac{3}{2}p_{x-\frac{\Delta x}{2}} - \frac{1}{2}p_{x-\frac{3\Delta x}{2}}. \quad (5.47)$$

Um aspecto importante dos métodos explícitos é a localidade do acoplamento quando propomos um esquema iterativo (ver Seção 5.5.1). Isto ocorre porque a propagação das informações nestes modelos tem uma velocidade característica finita, ou seja, a porção do domínio que irá influenciar no acoplamento definido em um passo temporal Δt (máximo entre os passos temporais dos dois modelos) é a que estiver a uma distância menor ou igual à percorrida pela velocidade característica neste intervalo de tempo. Em outras palavras, a cada iteração do esquema de acoplamento entre os modelos teremos que simular a porção correspondente de cada domínio (1D e 3D). O ideal é não definirmos o passo temporal da parte tridimensional menor que o da parte unidimensional, pois assim somente as células a uma distância Δx (vizinhas) da interface de acoplamento participarão do esquema de acoplamento iterativo no modelo 3D.

A cada iteração iremos aplicar os passos descritos a seguir, seguindo o fluxograma da Figura 5.9. Vamos assumir que o passo temporal do modelo 3D é maior ou igual ao passo temporal do modelo 1D.

No modelo 3D, na etapa (B), poderíamos fazer a colisão, a imposição de condições de contorno e a propagação (ver Figura 2.1) nas células vizinhas à interface de acoplamento. Mas, veja que nas células de fronteira, após a propagação, não temos como calcular a velocidade, pois é conhecida somente uma parte da distribuição das partículas f_i (ver Figura 2.5 para maior clareza). Por isso, vamos calcular o fluxo segundo as velocidades calculadas na etapa de imposição de condições de contorno. Pela equação (2.43), vemos que a velocidade na direção

normal à interface pode ser calculada conhecendo-se a pressão a ser imposta (a partir da qual se determina a densidade). Como iremos impor a mesma pressão em todas as células de uma interface, podemos calcular uma única vez por passo temporal a parte da equação (2.43) que depende diretamente das distribuições f_i , ficando o fluxo como uma função escalar da pressão. Isto significa que para realizar m iterações, no modelo 3D, temos que (etapa (B)) construir uma única vez a função escalar (percorrendo as células da interface), que terá como entrada a pressão do modelo 1D, e (etapa (C)) obter m vezes o fluxo a partir desta função escalar. Por isso, além de ser um acoplamento local, no sentido de estar restrito às células da fronteira de acoplamento, temos a vantagem de precisar percorrer as células da fronteira uma única vez por passo temporal. Existem outras alternativas para calcular o fluxo a ser informado para o modelo 1D (por isso mostramos o loop iterativo 1D-3D começando na etapa (B)), ao reordenar as etapas do LBM. Porém, esta forma apresenta um custo computacional menor e provê resultados acurados, como veremos nos exemplos das próximas seções.

No modelo 1D devemos determinar qual a porção do domínio que influencia a interface de acoplamento, caso tenha um passo temporal menor que o do modelo 3D. Para então, seguir as etapas de interpolação do fluxo (D), atualização da pressão (E), da área (F) e do fluxo (G) somente nesta porção do domínio (visando reduzir o custo computacional) até que chegue o próximo instante de interação com o modelo 3D. Na sequência, a pressão é transmitida ao modelo 3D da forma apresentada na equação (5.47). Com isto, temos que no modelo 1D o acoplamento também tem uma característica de localidade, sendo que a porção do domínio envolvida neste processo será proporcional à relação entre os passo temporais do modelo 3D e do modelo 1D ($\Delta t_f/\Delta t_1$).

Após ser atingida a condição de convergência (equação (5.44)) do acoplamento 1D-3D, é simulado um passo temporal em todo o domínio 3D e em todo o 1D, de maneira que obtenhamos a solução do escoamento convergido em ambos os modelos para aquele passo de tempo.

Com isso, concluímos que o acoplamento iterativo 1D-3D introduz um pequeno custo computacional, se comparado com o custo de resolver as equações do LBM em todo o domínio. Além disso, este loop iterativo é considerado independente do loop iterativo fluido-estrutura (da Figura 4.2), no caso de problemas com interação fluido-estrutura implícita, sendo ambas etapas calculadas em momentos distintos de cada passo temporal.

5.6 Validações e exemplos numéricos do modelo acoplado 1D-3D

Nesta seção vamos apresentar dois exemplos acadêmicos de escoamentos em tubos cilíndricos, onde visamos explorar a viabilidade da substituição de segmentos tridimensionais por segmentos unidimensionais. O principal ponto a ser explorado é a influência da condição de acoplamento na acurácia, estabilidade e custo computacional das simulações.

Primeiramente vamos estudar o acoplamento do modelo 1D com o modelo de domínio não deformável em 3D, empregando o escoamento de Womersley na Seção 5.6.1. Para então, modelar novamente este escoamento, porém com paredes deformáveis no modelo 3D (Seção 5.6.2), onde podemos verificar a equivalência dos dois modelos usados para a estrutura.

5.6.1 Escoamento de Womersley em tubo rígido

Neste primeiro problema vamos modelar o escoamento de Womersley em um tubo, caracterizado pelas quantidades adimensionais $Re = 100$ e $Wo = 5$. Onde a parte tridimensional em um domínio não deformável (sem interações entre fluido e estrutura), como foi feito na Seção 3.3.2. Enquanto no modelo 1D vamos usar um coeficiente de elasticidade grande o suficiente para que as variações da área do vaso sejam desprezíveis.

Na Figura 5.10 ilustramos o esquema de acoplamento das geometrias dos modelos 1D (diferenças finitas, DF) e 3D (método de *lattice* Boltzmann, LBM) na modelagem do escoamento em um tubo cilíndrico.

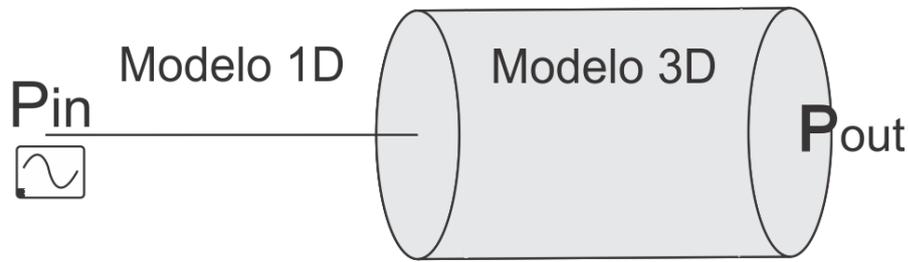


Figura 5.10: Ilustração do esquema de acoplamento, feito entre o modelo 1D (DF) e o modelo 3D (LBM), na modelagem do escoamento de Womersley em tubos rígidos.

Na Tabela 5.1 apresentamos a influência dos diferentes esquemas de acoplamento entre os modelos 1D e 3D (apresentados na Seção 5.5) no erro relativo máximo, em relação à solução analítica em tubos rígidos (equação (3.16)), e no custo computacional relativo à simulação de todo o tubo de forma tridimensional. Mais detalhadamente, mostramos para cada esquema o passo temporal ($\Delta t'$) relativo ao do problema 3D completo, exigido pelo problema acoplado na parte 3D para manter a estabilidade numérica da simulação, e o número de iterações para atingir a condição de convergência (5.44) com $\varepsilon = 10^{-4}$. Onde o parâmetro de relaxação usado no último caso é $\omega = 0,5$, escolhido por exigir um número menor de iterações para atingir o critério de convergência mencionado, conforme expõe a Tabela 5.2. Nesta tabela testamos relaxações entre 0,1 e 1 e o número médio de iterações variou de 3,05 ($\omega = 0,5$) a 19,30 ($\omega = 1$).

Esquema	$\Delta t'$	Iterações	Erro	Custo'
3D tubo completo	1	-	3,07%	100%
3D metade do tubo	2	-	3,41%	25,00%
1D-3D Gauss-Seidel (1)	1,43	-	1,80%	35,42%
1D-3D Iterativo (3)	1,54	20,11	1,66%	36,35%
1D-3D Interpolado (2)	1,43	-	1,76%	35,42%
1D-3D Iterat.(3) + Interp.(2)	2	19,30	1,79%	27,18%
1D-3D Iterat.(3) + Interp.(2) + Relax.(4)	2	3,05	1,75%	25,35%

Tabela 5.1: Custo computacional e erro relativo máximo dos esquemas numéricos propostos para o acoplamento entre os modelos 1D e 3D no escoamento de Womersley.

Como se observa na Tabela 5.1, a forma de acoplamento entre os modelos 1D e 3D afeta significativamente o custo computacional da simulação e pode

Relaxação (ω)	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
Iterações	9,37	6,49	5,08	4,04	3,05	3,71	4,48	5,85	8,67	19,30

Tabela 5.2: Número médio de iterações entre os modelos 1D e 3D no escoamento de Womersley para cada valor do parâmetro de sub-relaxação (ω).

torná-la instável, a ponto de exigir que a parte 3D seja modelada com um passo temporal menor (esquemas (1), (2) e (3)). Porém, ao acoplar os modelos fazendo a interpolação do fluxo do modelo 3D para o modelo 1D e o acoplamento iterativo não foi necessário modificar o passo temporal da parte 3D. Ainda, a introdução da sub-relaxação em ambos modelos, além de tornar o acoplamento mais estável, foi capaz de reduzir ainda mais o custo computacional, ao reduzir o número de iterações. O problema acoplado apresenta erros relativos menores que o problema totalmente tridimensional porque nesta malha pouco refinada (31 nós ao longo do diâmetro do vaso) há erros significativos na representação tridimensional da geometria cilíndrica do tubo em questão.

Observe ainda que o custo computacional ideal ao simular metade do tubo de forma tridimensional no problema acoplado seria 25% do custo de modelar todo problema de forma tridimensional. Pois, o passo temporal do problema 3D pode ser reduzido pela metade (de acordo com a relação $\theta_r = 30$, ver equação (3.1)) e o número de células do LBM é reduzida pela metade. Ao introduzir a interpolação do fluxo do modelo 3D para o 1D, o acoplamento iterativo e a sub-relaxação conseguimos reduzir o custo para 25,35% (1,4% maior que o custo ideal). Assim, vemos que o acoplamento com o modelo 1D pode ser feito com custo desprezível. Sendo que, o custo introduzido pelo modelo 1D será proporcional à quantidade de nós. Ressaltamos que para malhas do LBM mais refinadas o custo relativo da parte unidimensional se torna menos significativo. A característica importante do esquema de acoplamento a ser frisada é que o passo temporal da parte tridimensional não tenha que ser reduzido para manter a estabilidade.

5.6.2 Escoamento de Womersley em tubo quase rígido

Neste exemplo vamos simular o mesmo problema descrito na seção anterior, porém a parte tridimensional do tubo também é modelada com parede quase rígidas (diante da variação de pressão), levando em consideração a interação fluido-estrutura. Utilizaremos um coeficiente de elasticidade equivalente ao usado na parte unidimensional, de forma que a parede de todo o tubo tenha as mesma relação constitutiva. A descrição da geometria do problema e do uso de modelos 1D e 3D é descrita na Figura 5.11, onde a caixa que envolve o tubo no modelo 3D representa a região onde está contido o fluido externo.

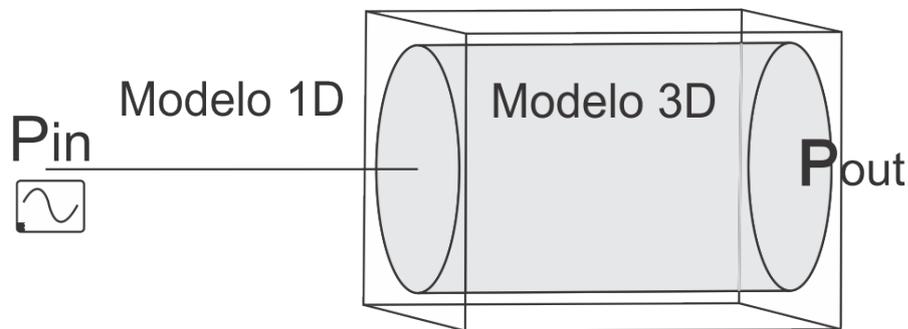


Figura 5.11: Ilustração do esquema de acoplamento, feito entre o modelo 1D (DF) e o modelo 3D (LBM), na modelagem do escoamento de Womersley em tubos quase rígidos.

Assim como no problema anterior, substituímos metade do tubo cilíndrico por um segmento unidimensional. Optamos por usar o esquema numérico de acoplamento, entre os modelos 1D e 3D, que mostrou melhores resultados na seção anterior, no qual interpolamos o fluxo do modelo 3D para o modelo 1D e realizamos iterações com sub-relaxação em ambos modelos ($\omega = 0,5$). Na Figura 5.12 expomos as curvas de fluxo na entrada, no meio (interface) e na saída do vaso, além da solução analítica de Womersley para tubo rígidos. Repare que as variações do fluxo ao longo do tubo não se mostram significativas, conforme desejado.

Na Figura 5.13 mostramos a continuidade da pressão ao longo do tubo em diferentes instantes de tempo, mostramos os instantes em que a pressão atinge os valores máximo e mínimo na entrada do canal e instantes em que atinge pressões intermediárias. Percebemos pequenas oscilações de pressão na interface, as quais

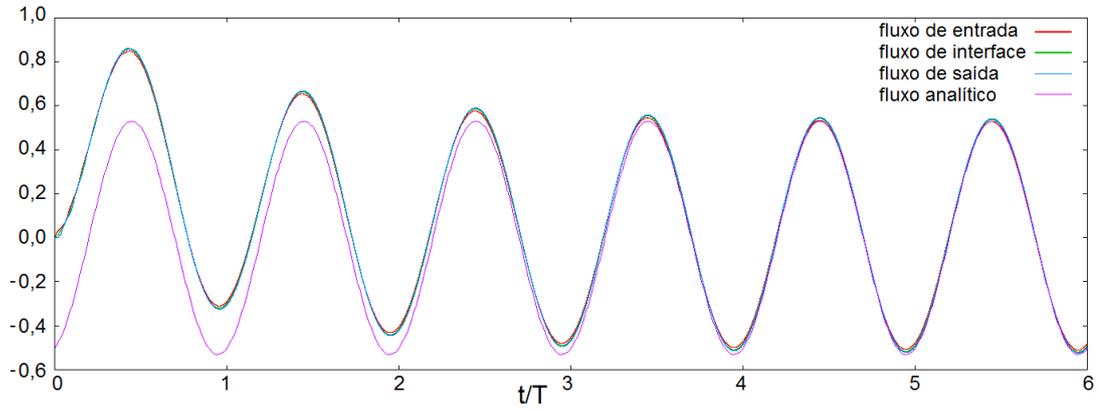


Figura 5.12: Curvas de fluxo na entrada, no meio (interface) e na saída do canal, além da solução analítica de Womersley para tubos rígidos com $Wo = 5$ e $Re = 100$.

são comuns devido a reflexões que ocorrem na interface entre os modelos. Nesta figura destacamos a continuidade da pressão entre os modelos e a consistência do acoplamento e da modelagem da parede do vaso.

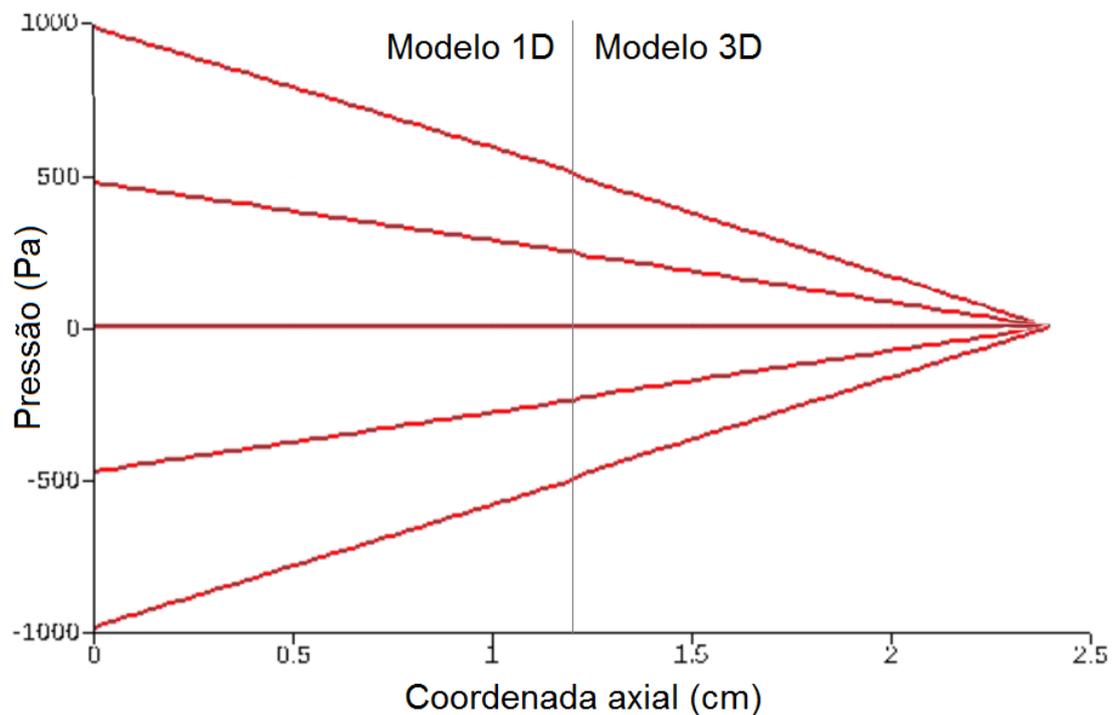


Figura 5.13: Pressão ao longo do vaso na modelagem 1D-3D do escoamento de Womersley em tubos quase rígidos com $Wo = 5$ e $Re = 100$, em 5 instantes de tempo.

A condição de acoplamento com sub-relaxação possibilitou, assim como no caso anterior, que o número de iterações do esquema de acoplamento fosse baixo. Como vemos na Figura 5.14, o número de iterações se manteve na maior parte da

simulação entre 1 e 2.

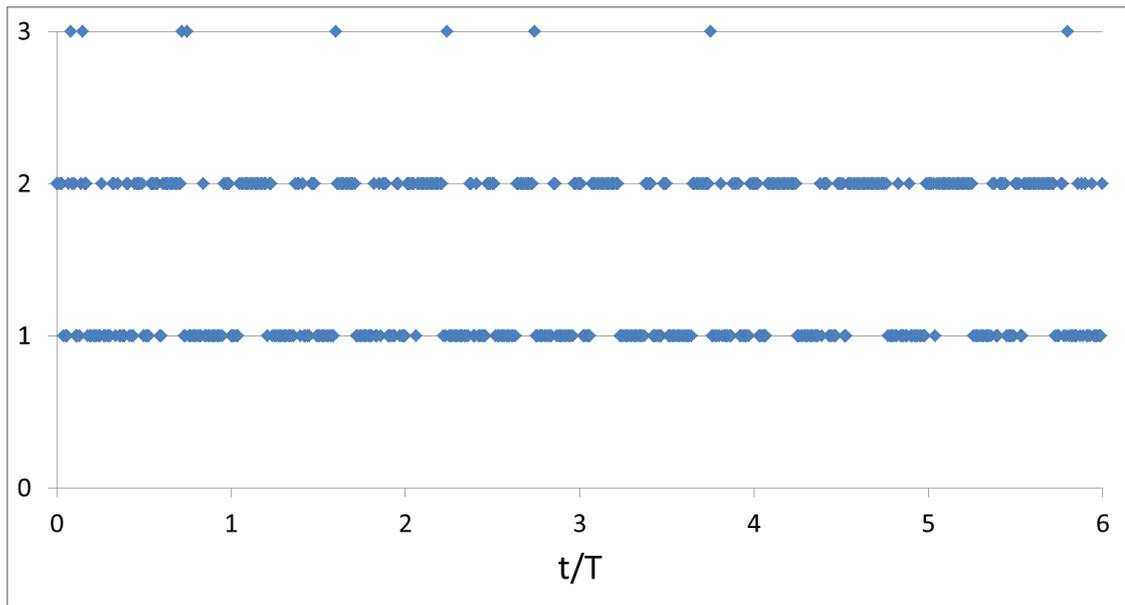


Figura 5.14: Número de iterações do esquema de acoplamento entre os modelos 1D e 3D no escoamento de Womersley em tubos quase rígidos.

5.7 Modelagem 1D-3D de escoamentos sanguíneos

Neste seção vamos estudar a modelagem do escoamento sanguíneo em segmentos arteriais (representados, de forma simplificada, por tubos cilíndricos) através do acoplamento dos modelos unidimensional e tridimensional com interação fluido-estrutura. Este estudo visa explorar as potencialidades e limitações dos métodos propostos na modelagem do escoamento sanguíneo no SCVH.

Como mencionado anteriormente, o sangue será modelado como fluido Newtoniano com viscosidade cinemática de $0,035 \text{ cm}^2/\text{s}$ e densidade de $1,05 \text{ g/cm}^3$. E a parede arterial será modelada segundo a velocidade de propagação de ondas característica do vaso em questão (c_w), calculada a partir da equação de Moens-Korteweg, da forma:

$$E = \frac{2c_w \rho R_0}{h_0}, \quad (5.48)$$

onde a elasticidade da parede do modelo 3D é dada pela equação (5.43).

O primeiro escoamento modelado, apresentado na Seção 5.7.1, acontece em um segmento da artéria cerebral média, com raio representativo das artérias de

pequeno a médio calibre. E o segundo escoamento, apresentado na Seção 5.7.2, se passa na aorta abdominal, representando a modelagem da hemodinâmica em uma artéria de grande calibre. Os dados de pressão usados nas condições de contorno das simulações foram obtidos de simulações do sistema cardiovascular humano através de um modelo unidimensional da rede arterial, desenvolvido no grupo HeMoLab [Blanco et al. (2007)].

5.7.1 Escoamento sanguíneo na artéria cerebral média

O segmento da artéria cerebral selecionado possui raio de 0,08 cm, comprimento de 1,6 cm (relação de aspecto 10/1) e parede com espessura de 0,026 cm. Sendo que, a parede arterial será modelada com uma velocidade de propagação de ondas de aproximadamente 1000 cm/s. O escoamento neste segmento é caracterizado por um número de Reynolds da ordem de 400.

Na Figura 5.15 mostramos as curvas da pressão hidrostática (média) e do gradiente de pressão, do segmento da artéria cerebral descrito acima, durante o primeiro ciclo de uma simulação global do SCVH (partindo da situação de repouso). Aqui, estamos empregando a palavra gradiente para caracterizar a perda de pressão entre a entrada e saída em um dado segmento. Concentramos nossas análises no primeiro ciclo da simulação por questões de custo computacional, sendo que os demais ciclos apresentam escoamentos com características semelhantes.

Conforme detalhado na Seção 4.6, vamos decompor a pressão no modelo 3D na componente hidrostática (p_H) e na componente proveniente do gradiente de pressão (p_G). Sendo que, no modelo 3D, imporemos a componente p_H através dos deslocamentos equivalentes na parede arterial e a componente p_G será imposta nas extremidades do vaso. Enquanto, no modelo 1D, a pressão total é imposta nas extremidades do vaso.

Primeiramente, modelamos o escoamento neste segmento da artéria cerebral média através do modelo 1D, com perfil parabólico de velocidade. Onde usamos uma discretização espacial equivalente à do modelo 3D, descrita a seguir e um

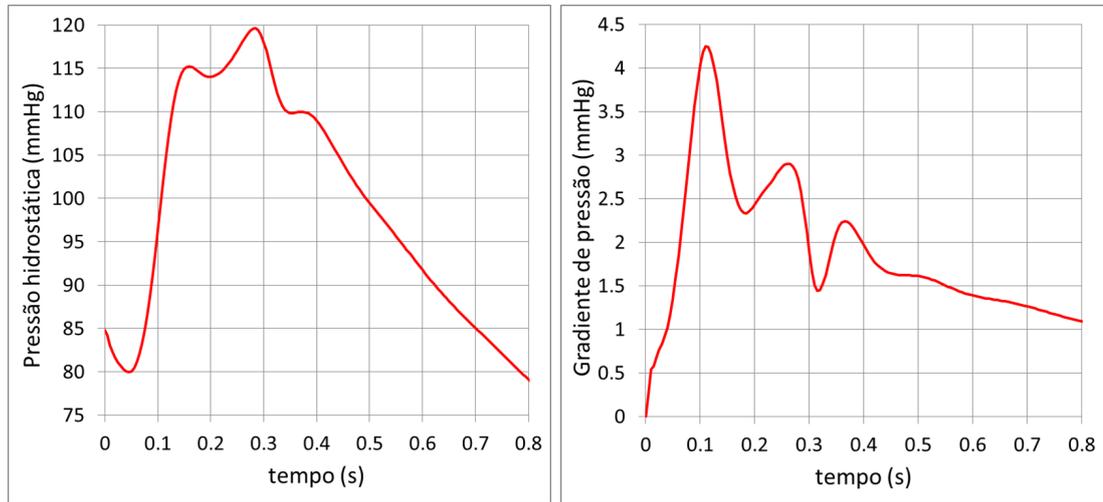


Figura 5.15: Curvas da pressão hidrostática (média) e do gradiente de pressão em um segmento de 1,6 cm da artéria cerebral média.

passo temporal 10 vezes menor para manter a estabilidade. As curvas de fluxo na entrada e saída do vaso são apresentadas na Figura 5.17, onde ampliamos a região de fluxo máximo para destacar a separação dos fluxos (devido à pequena dilatação do vaso).

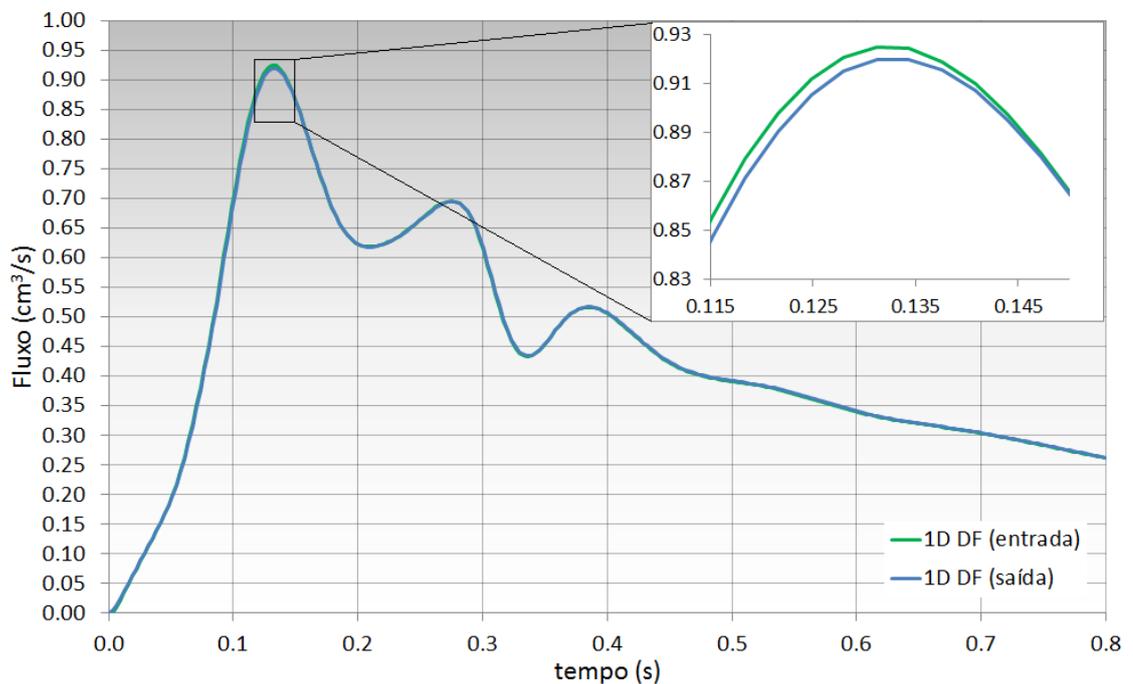


Figura 5.16: Curva de fluxo médio no segmento da artéria cerebral média em função do tempo, obtidos do modelo 1D de diferenças finitas.

Para modelar este escoamento de forma tridimensional vamos considerar um tubo cilíndrico com 81 células ao longo do diâmetro inicial, sendo que adicionamos

10% do diâmetro na largura do domínio que contém o tubo imerso. O passo temporal de $1,9 \times 10^{-6}$ s foi calculado de forma que tenhamos o número de Mach menor que 0,15 e $\theta_r \geq 30$, considerando como tempo característico um décimo do ciclo cardíaco (0,08s).

As curvas de fluxo médio obtidas dos modelos 1D e 3D ao longo do tempo são exibidas na Figura 5.17. Observamos uma diferença entre as curvas de aproximadamente 14% do fluxo máximo. Tal diferença se deve principalmente ao perfil parabólico assumido no modelo 1D. No exemplo seguinte do escoamento sanguíneo na aorta abdominal veremos como o perfil de velocidade influencia o escoamento.

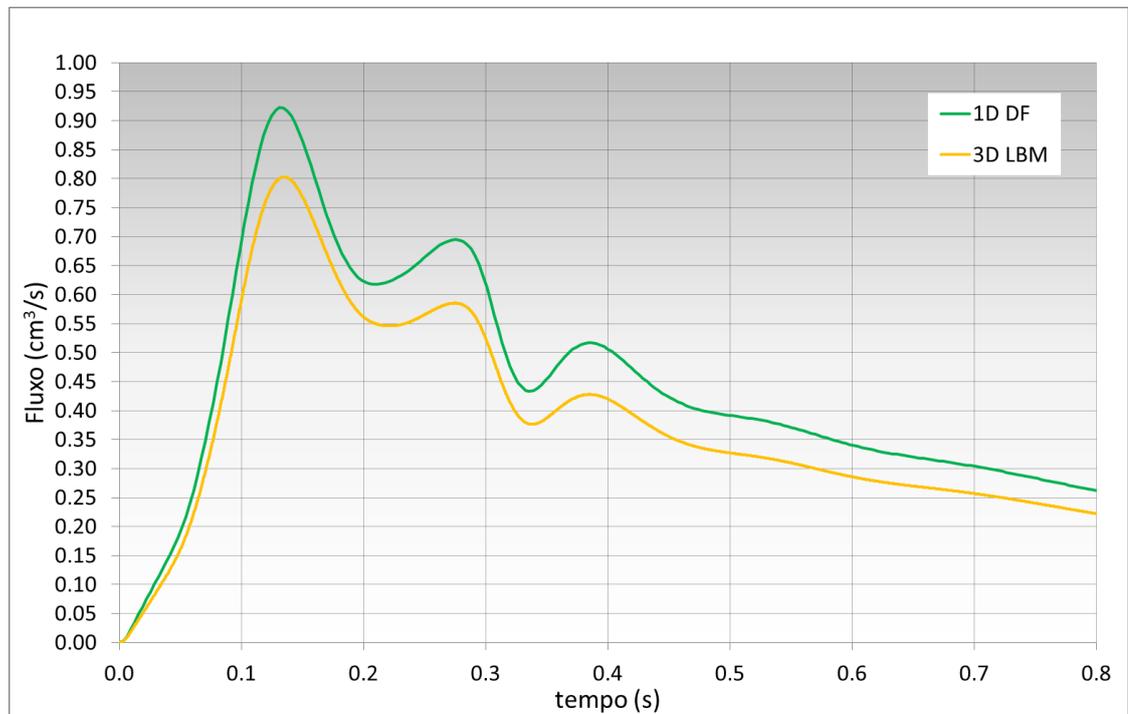


Figura 5.17: Curvas do fluxo médio no segmento da artéria cerebral média em função do tempo, obtidos pelos modelos 1D e 3D.

Visando reduzir o custo computacional das simulações tridimensionais, vamos substituir uma parte do segmento arterial tridimensional pelo equivalente segmento unidimensional. Como no modelo 1D impomos a pressão total e no modelo 3D somente a componente p_G , vamos subtrair a componente p_H quando a pressão do modelo 1D for transmitida para o modelo 3D.

Primeiramente, substituímos a metade proximal do vaso por um segmento

unidimensional, onde ficamos com dois segmentos acoplados de 0,8 cm de comprimento cada. Na Figura 5.18 mostramos as curvas de fluxo médio obtidas dos modelos 1D e 3D e do modelo acoplado 1D-3D recém descrito ao longo do tempo. Conforme esperado, o fluxo do modelo acoplado se encontra entre os fluxos dos modelos 1D e 3D. Na região ampliada (parte direita superior) podemos observar que o fluxo na entrada, na metade (interface entre os modelos 1D e 3D) e na saída do vaso estão dispostos de forma quase linear. Isto se deve ao fato do segmento não sofrer grandes deformações, o que está relacionado também com a alta velocidade de propagação de ondas.

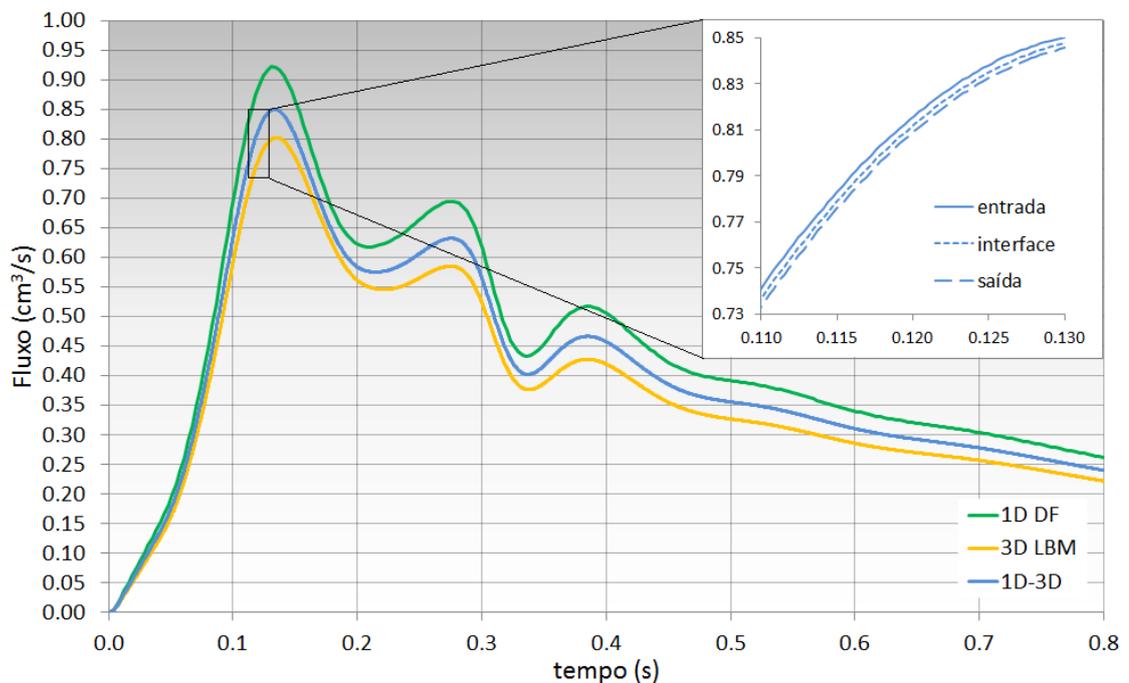


Figura 5.18: Curvas do fluxo médio na artéria cerebral média ao longo do tempo obtidas do modelo 1D, do modelo 3D e do modelo acoplado 1D-3D (sendo metade do segmento modelado de forma unidimensional).

Em seguida, substituímos 80% e 90% da parte proximal do segmento 3D por um segmento 1D. Na Figura 5.19 mostramos o esquema de modelagem do vaso com 50%, 80% e 90% do segmento modelado de forma unidimensional, sendo o restante modelado de forma tridimensional.

Na Figura 5.20 mostramos as curvas de fluxo médio dos casos em que substituímos 50%, 80% e 90% do segmento 3D por segmentos 1D. Como esperado, as curvas de fluxo se aproximam da curva do segmento 1D à medida que uma

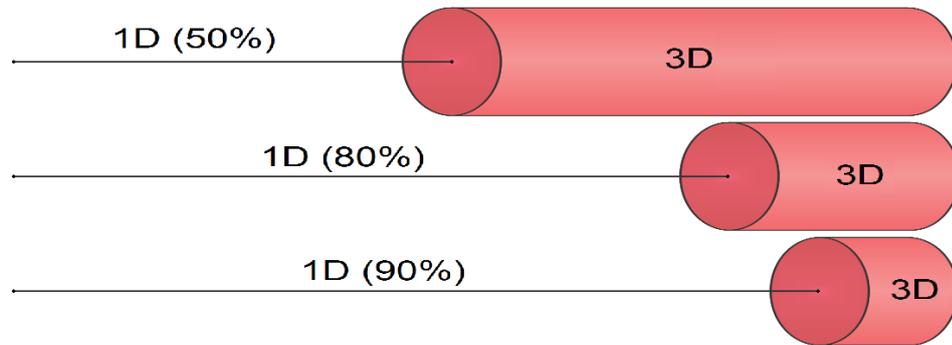


Figura 5.19: Ilustração do esquema de acoplamento entre os modelos 1D e 3D em um vaso com 50%, 80% e 90% do segmento modelado de forma unidimensional.

porção maior do segmento é modelada de forma unidimensional. Nos três casos mantivemos o passo temporal da parte tridimensional igual para manter o número de Mach menor que 0,15, mas caso a velocidade do fluido fosse menor poderíamos reduzir o passo temporal juntamente com o comprimento característico.

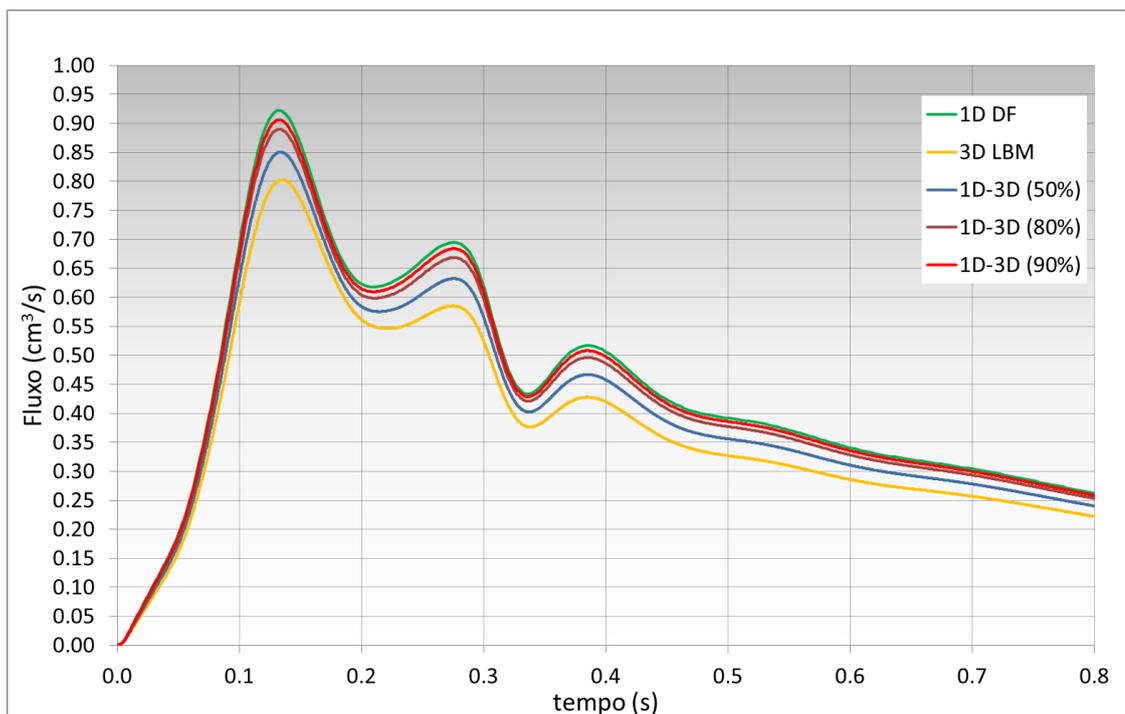


Figura 5.20: Curvas do fluxo médio na artéria cerebral média ao longo do tempo obtidas do modelo 1D, do modelo 3D e do modelo acoplado 1D-3D com 50%, 80% e 90% do segmento modelado de forma unidimensional.

Na Figura 5.21 mostramos a continuidade da área das seções transversais ao longo do vaso e a continuidade do fluxo que as atravessa, em 3 instantes do ciclo cardíaco, nas simulações em que substituímos 50%, 80% e 90% do segmento 3D por um segmento 1D. Mais precisamente, escolhemos o momento em que a pressão

hidrostática tem maior variação temporal ($t = 0, 100s$), o momento em que o fluxo atinge o valor máximo ($t = 0, 135s$) e o momento em que a pressão hidrostática atinge seu valor mínimo ($t = 0, 040s$). Podemos observar que tanto a área quanto o fluxo estão consistentes entre os modelos 1D e 3D, porém oscilações pequenas da área surgem nas extremidades do modelos 3D quando o fluxo atinge seu valor máximo. Estas oscilações se tornam menores quando a malha é refinada. Em todas as simulações feitas com esta discretização as oscilações se mantêm menores que 0,04% da área do vaso e não afetam de forma significativa os resultados das simulações.

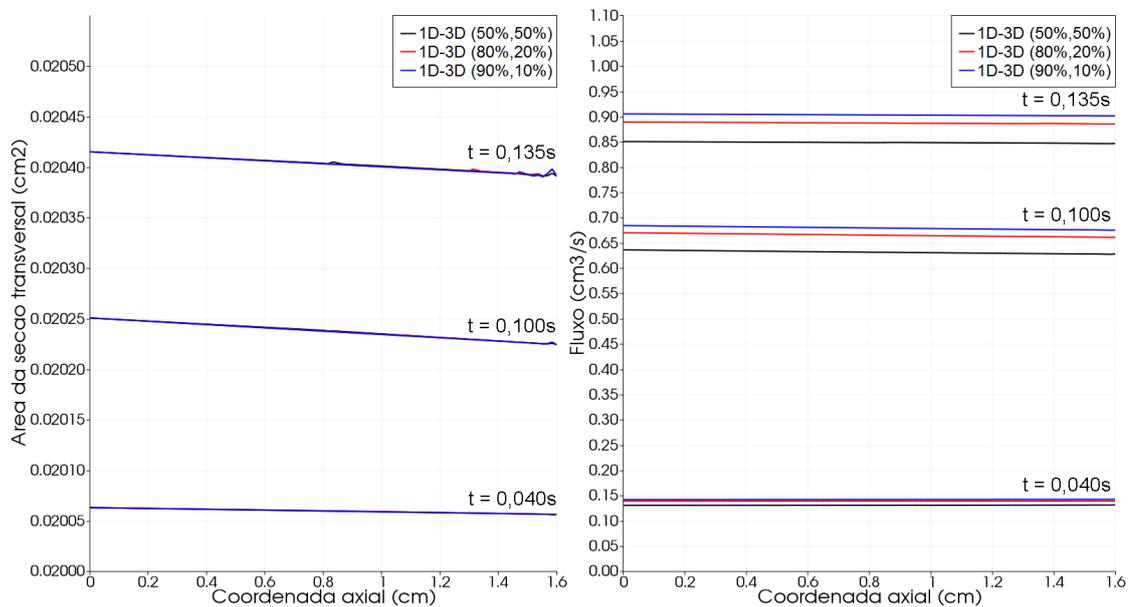


Figura 5.21: Curvas da área das seções transversais ao longo da artéria cerebral média e do fluxo que as atravessa em 3 instantes do ciclo cardíaco.

É importante ressaltar que, para obter esta continuidade da área e fluxo sem oscilações significativas, foi necessário impor no modelo 3D o movimento dos nós da estrutura que tocam a interface de acordo com a força introduzida pela pressão. Introduzindo velocidades transversais sobre a interface consistentes com o movimento da estrutura.

Devido ao alto custo computacional desta simulação nos limitamos a testar o esquema numérico de acoplamento, entre os modelos 1D e 3D, que mostrou melhores resultados na Seção 5.6, no qual interpolamos o fluxo do modelo 3D para o modelo 1D e realizamos iterações com sub-relaxação em ambos modelos.

Porém, para ter uma garantia maior de estabilidade, usamos um parâmetro de sub-relaxação baixo ($\omega = 0,1$) e uma condição de convergência alta ($\varepsilon = 10^{-10}$ na equação (5.44)). Por isso, vemos na Figura 5.22 um número considerável de iterações entre os modelos 1D e 3D (aproximadamente 15). Apesar do alto número de iterações o custo computacional adicionado pelo acoplamento com o modelo 1D foi de somente 3%, se comparado com a simulação somente da parte 3D. O valor de ε pode ser maior que 10^{-10} para reduzir o número de iterações, porém não faremos esta análise aqui. Repare ainda como o número de iterações cai nos cinco instantes em que o fluxo apresenta máximos e mínimos locais.

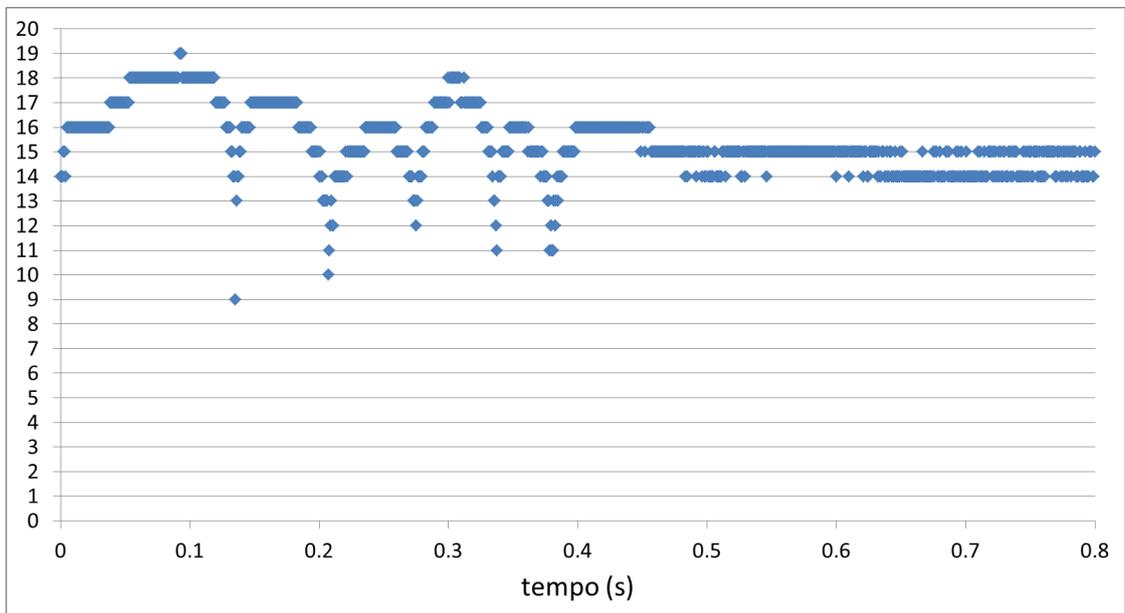


Figura 5.22: Número de iterações entre os modelos 1D e 3D na modelagem do escoamento sanguíneo na artéria cerebral média.

Para que o acoplamento entre os modelos 1D e 3D seja estável não foi necessário alterar o passo temporal da parte 3D. Somente foi necessário reduzir a relação entre os passos temporais da estrutura e do fluido no modelo 3D ($\Delta t_s/\Delta t_f$) de 4 para 2, pois o primeiro caso introduziu instabilidades numéricas quando o modelo 1D foi acoplado.

5.7.2 Escoamento sanguíneo na aorta abdominal

Nesta seção vamos modelar o escoamento sanguíneo em um segmento da aorta abdominal. A aorta é a artéria de maior diâmetro do corpo humano, sendo dividida em aorta ascendente, torácica e abdominal. Na aorta abdominal, apesar de estar mais distante do coração que os demais segmentos, ainda apresenta um escoamento com alto número de Reynolds (próximo de 1600 na sístole). A parede arterial será modelada com velocidade de propagação de ondas de aproximadamente 500 cm/s.

De forma semelhante ao problema anterior, vamos impor informações de pressão provenientes do modelo 1D do SCVH. A pressão hidrostática e o gradiente de pressão de um segmento da aorta abdominal, com 2,28 cm de comprimento e 0,57 cm de raio (relação de aspecto de 2/1), são apresentados na Figura 5.23. Aqui, notamos a presença de gradientes positivos e também negativos, que levam a um refluxo sanguíneo na região.

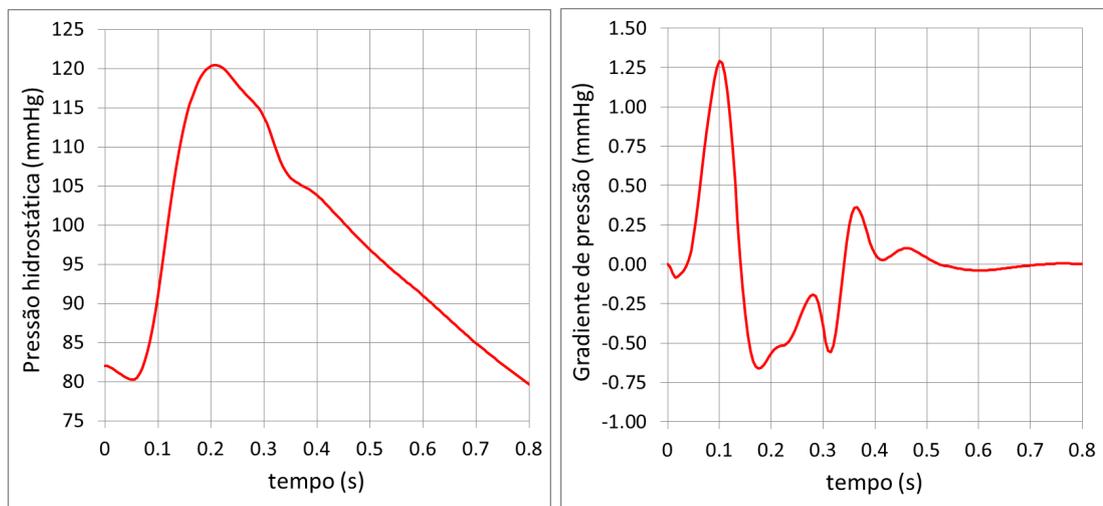


Figura 5.23: Curvas da pressão hidrostática (média) e do gradiente de pressão em um segmento de 2,28 cm da aorta abdominal.

Na modelagem unidimensional deste escoamento, assim como no problema anterior, empregamos uma discretização equivalente à do problema tridimensional e um passo temporal 10 vezes menor. Vamos assumir inicialmente um perfil parabólico de velocidade para o escoamento, de onde obtemos as curvas de fluxo, na entrada e saída do segmento, expostas na Figura 5.24. Podemos notar um

pequeno refluxo após a sístole, algo comum nesta região e causado pelos gradientes negativos de pressão. Notamos uma separação das curvas de fluxo na entrada e saída do segmento mais significativa que no problema anterior, pois o vaso é mais complacente e dilata mais (cerca de 10% de variação no raio) durante um ciclo cardíaco. Por se encontrar em uma região mais próxima do coração, o fluxo se encontra mais concentrado na sístole (chegando a uma ordem de magnitude maior que no caso da seção anterior) e se torna quase estagnado durante a parte final da diástole.

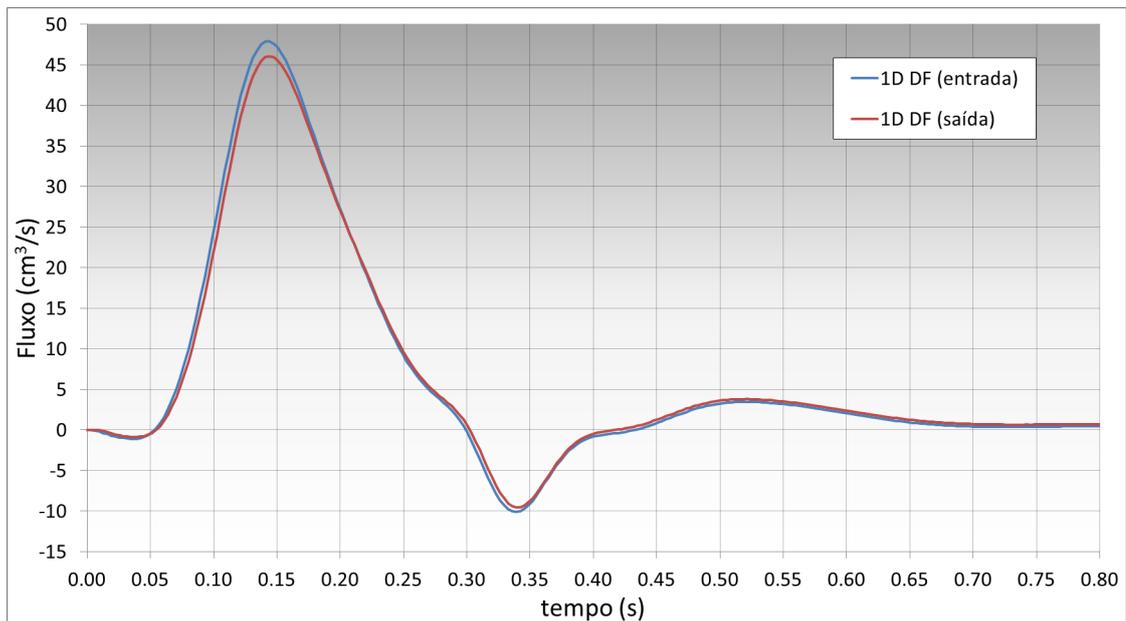


Figura 5.24: Fluxo obtido na modelagem 1D com perfil parabólico do escoamento em um segmento da aorta abdominal.

Para modelar este escoamento de forma tridimensional vamos considerar um tubo cilíndrico com 201 células ao longo do diâmetro inicial, sendo que adicionamos 20% do diâmetro na largura do domínio que contém o tubo imerso. O alto número de células foi necessário para manter a simulação estável e consistente, devido ao alto número de Reynolds. O passo temporal de $7,7 \times 10^{-6}$ s foi calculado de forma que tenhamos o número de Mach menor que 0,1 e $\theta_r \geq 30$, considerando como tempo característico um décimo do ciclo cardíaco (0,08s).

Ao modelar o escoamento de forma tridimensional, vemos na Figura 5.25 que os fluxos obtidos anteriormente assumindo um perfil parabólico para o modelo

unidimensional estão distantes desta solução durante a sístole. Esta diferença, que chega a quase 25% do fluxo máximo, se deve principalmente ao perfil parabólico de velocidade assumido no modelo unidimensional.

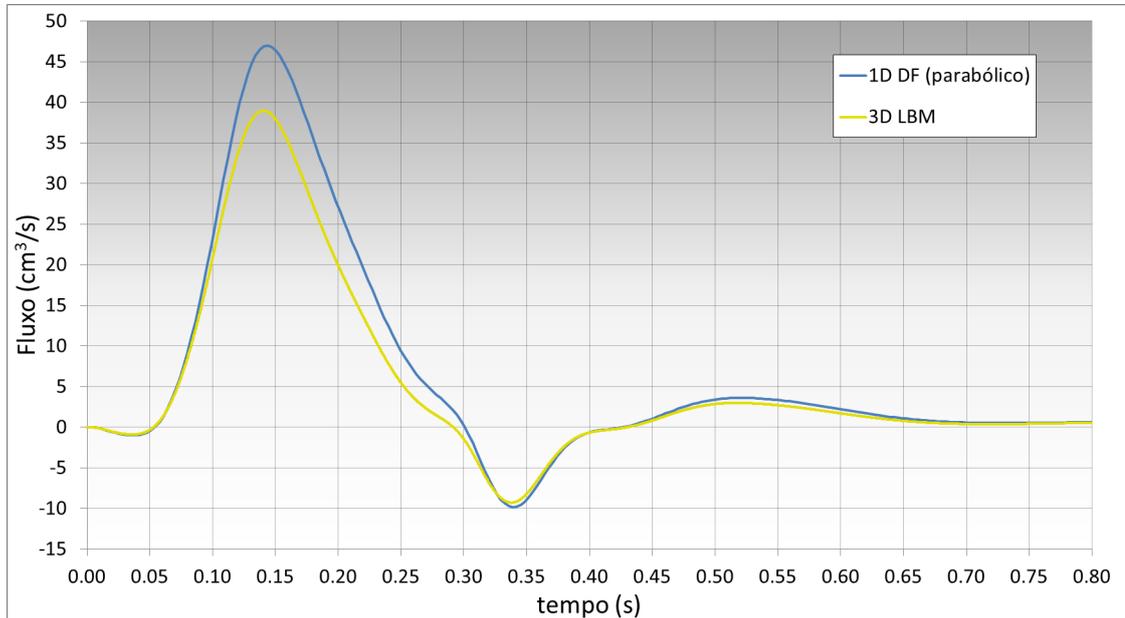


Figura 5.25: Comparação dos fluxos obtidos na modelagem 1D com perfil parabólico e na modelagem 3D do escoamento em um segmento da aorta abdominal.

Por isso, vamos aproximar a modelagem destes problemas, através da alteração do perfil de velocidade assumido no modelo 1D, antes acoplá-los. Pois, como podemos observar na Figura 5.26, os perfis de velocidade da modelagem tridimensional do escoamento sanguíneo, sobre um corte transversal na metade do vaso, não são parabólicos. Escolhemos expor o momento em que a pressão hidrostática tem maior variação temporal ($t = 0,115s$), nos momentos em que o fluxo atinge os valores mínimo ($t = 0,335s$) e máximo ($t = 0,140s$) e no momento em que a pressão hidrostática atinge seu valor máximo ($t = 0,205s$). Além disso, destacamos em preto a posição da parede do vaso, onde a velocidade axial é nula, pois mostramos também o região do fluido externo que circunda o vaso. Aqui notamos em $t = 0,115s$ um perfil mais plano, com altos gradientes de velocidade próximo à parede do vaso, o que afeta significativamente o valor do parâmetro ς (constante no perfil parabólico).

Para melhorar o resultado obtido com o modelo 1D, vamos usar a abordagem

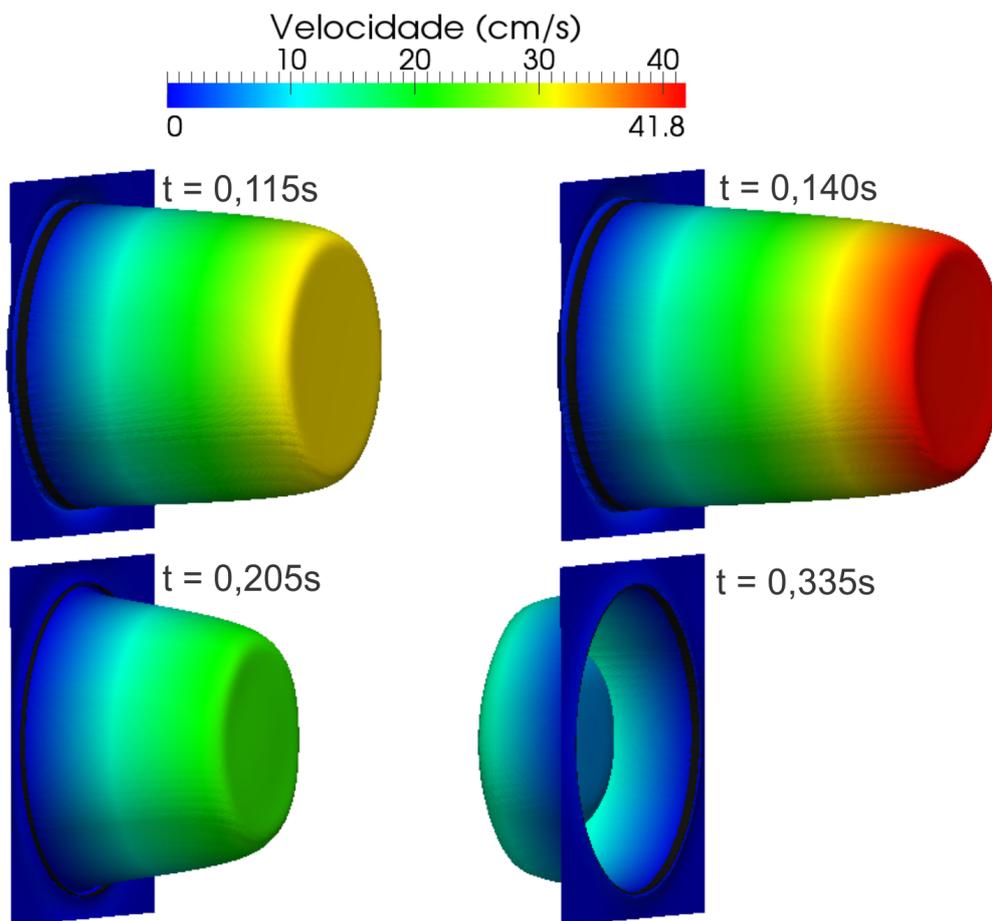


Figura 5.26: Perfis de velocidade (em colorido) e posição da parede do vaso (em preto) da modelagem tridimensional do escoamento sanguíneo na aorta abdominal em quatro instantes de tempo.

exposta na Seção 5.3 para construir um perfil de velocidade transiente, composto a partir de soluções de escoamentos de Womersley. Usamos o procedimento iterativo descrito na Seção 5.3, para obter a curva de fluxo do modelo unidimensional com perfil composto de velocidade. Sendo que, como o algoritmo do modelo 1D foi implementado em linguagem Fortran e o algoritmo da estimativa do perfil de velocidade foi implementado em MatLab, esta iteração foi realizada de forma manual. Dificultando a realização de uma análise extensiva deste esquema. Por isso, nos limitamos ao esquema em que calculamos um perfil independente da coordenada axial do vaso, baseado no fluxo médio, e estimamos somente o valor de ζ^* (pois é uma curva suave e necessita do perfil somente na parede), assumindo $\alpha = 1$ (referente a um perfil plano). Para atingir a convergência (5.30) da curva de fluxo foram necessárias 13 iterações entre a solução do modelo unidimensional

e a estimativa do perfil de velocidade, usando uma sub-relaxação de $\omega = 0,5$ e $\varepsilon = 10^{-4}$.

Mostramos na Figura 5.27 os coeficientes das funções base da decomposição em 121 frequências discretas de até 150Hz da curva de fluxo, obtida pelo procedimento recém mencionado (usando informações do fluxo em 250 instantes do ciclo). Como podemos ver pela amplitude dos coeficientes, não são necessárias frequências tão altas para aproximar a curva de fluxo. Porém, por se tratar de um processo iterativo e pelo baixo custo computacional, resolvemos usar frequências de até 150Hz. Possivelmente frequência de até 20Hz seriam suficientes para esta aproximação, mas nos limitamos a testar o caso com mais frequências.

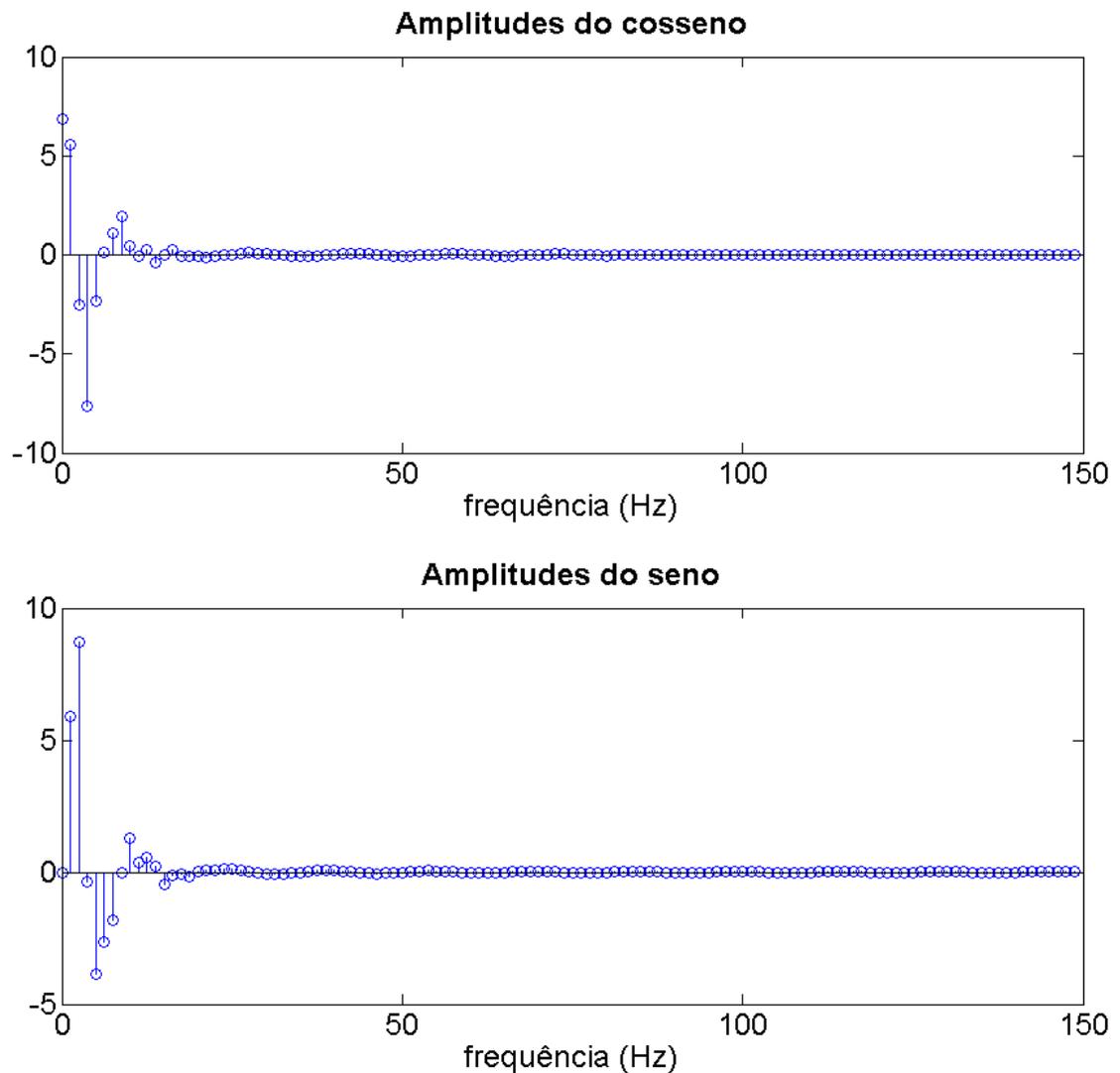


Figura 5.27: Coeficientes dos senos e cossenos na decomposição da curva de fluxo em frequências discretas de até 150Hz.

Usando estas frequências recuperamos a curva de fluxo apresentada na Figura 5.28, com os erros absolutos nela apresentados. Note que a curva foi bem aproximada, com erros máximos da ordem de 0,4% do fluxo máximo. Para eliminar oscilações da aproximação no começo e no final da curva de fluxo, estendemos a curva com valores constantes por mais 0,1 segundos em cada extremidade.

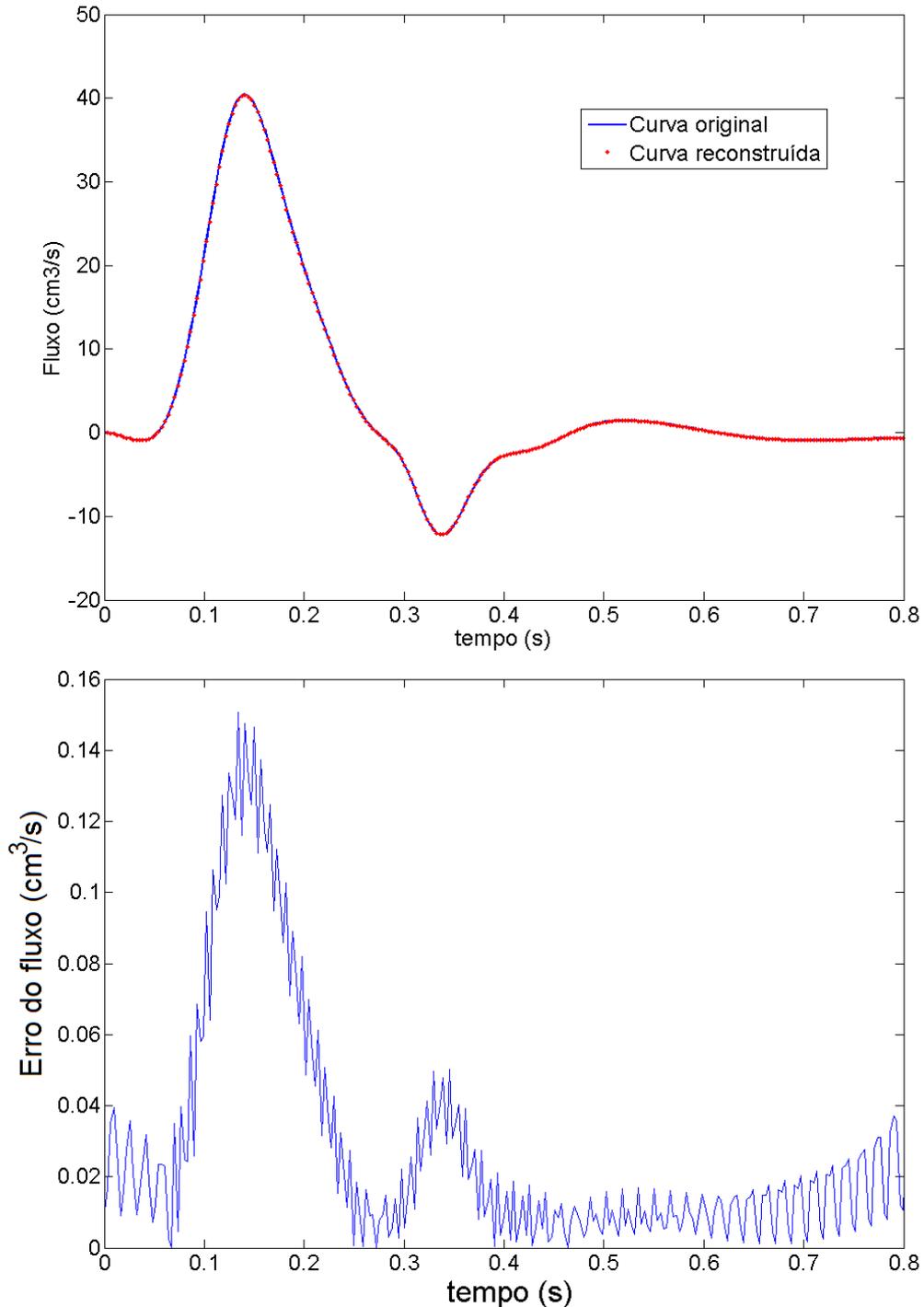


Figura 5.28: Curva de fluxo recuperada da decomposição frequências discretas de até 150Hz e o erro absoluto da aproximação.

Na Figura 5.29 comparamos o perfil de velocidade, sobre uma linha no centro do vaso, recuperado da composição de soluções de Womersley referentes às frequências discretas testadas ($Wo \in (0, 93)$) contra o perfil obtido do modelo 3D, em diferentes instantes de tempo. Mais precisamente, escolhemos o momento em que a pressão hidrostática tem maior variação temporal ($t = 0,115s$), os momentos em que o fluxo atinge os valores mínimo ($t = 0,335s$) e máximo ($t = 0,140s$) e os momentos em que a pressão hidrostática atinge seu valores mínimo ($t = 0,045s$) e máximo ($t = 0,205s$). Podemos observar a boa concordância dos resultados e também observamos que os perfis de velocidade estão mais próximos de perfis planos (na região do centro axial do tubo) do que parabólicos. Além disso, veremos a seguir que as curvas de fluxo estão mais próximas que adotando um perfil parabólico.

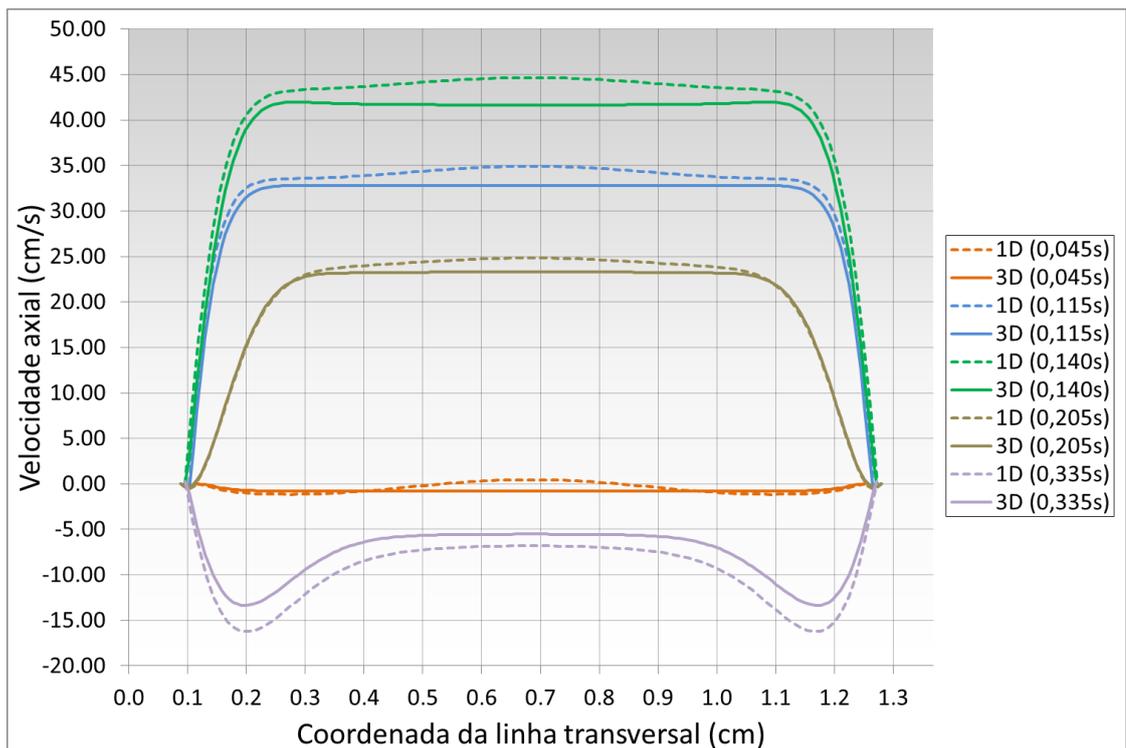


Figura 5.29: Comparação dos perfis de velocidade recuperado pela decomposição de frequências no modelo 1D e o perfil obtido com o modelo 3D.

Na Figura 5.30 mostramos as curvas de ζ e ζ^* (ζQ), calculadas usando o perfil composto recuperado da decomposição em frequências. Note que, como comentado anteriormente, o valor de ζ tende a infinito quando o fluxo se aproxima de zero.

Como isto acontece diversas vezes neste escoamento, optamos por usar a curva suave de ζ^* .

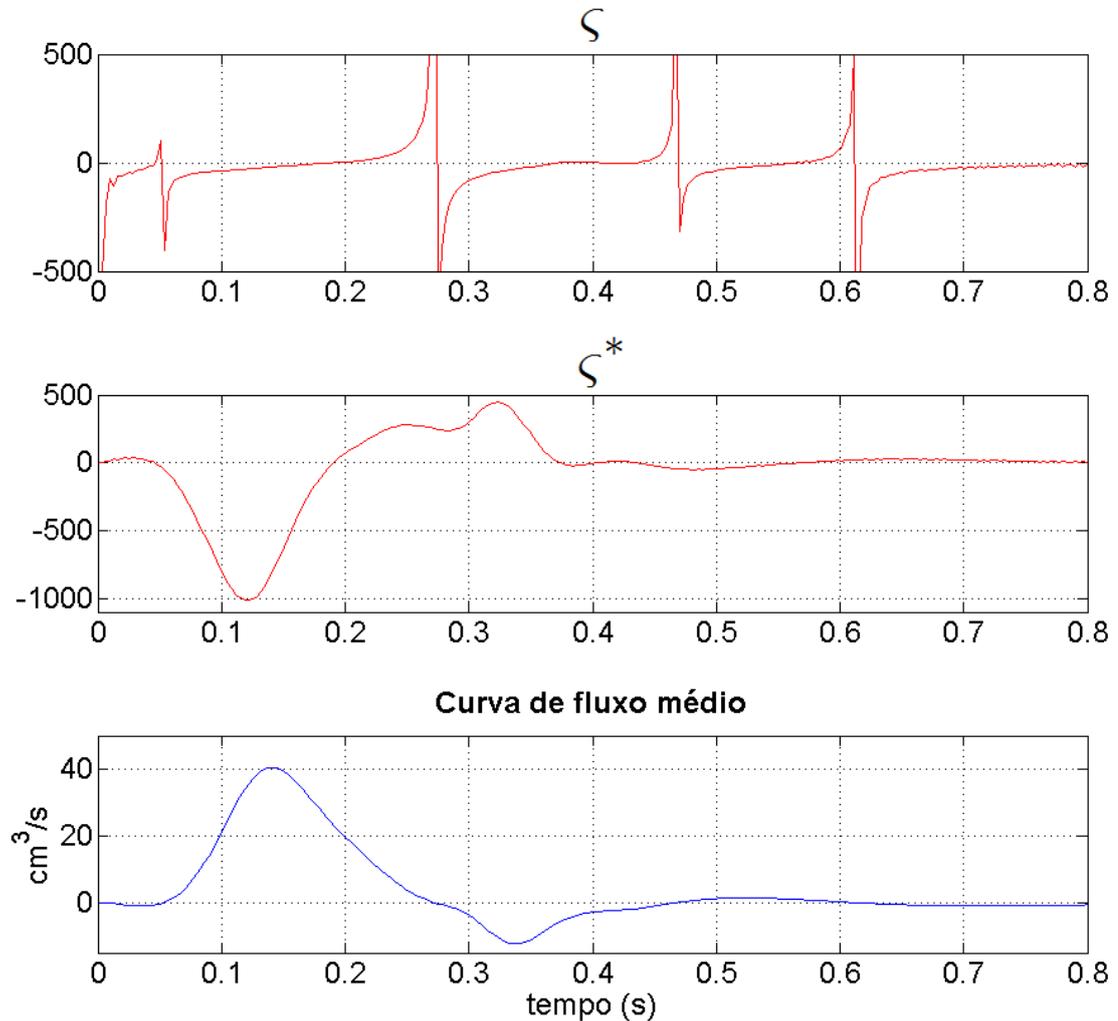


Figura 5.30: Valores dos termos ζ e ζ^* , associados ao perfil de velocidade do modelo 1D (ver equações (5.3) e (5.22)), durante um ciclo cardíaco na aorta abdominal.

Usando estes valores de ζ^* , resultantes do processo iterativo mencionado, obtivemos uma nova curva de fluxo da simulação unidimensional em melhor concordância com a obtida pelo modelo 3D, conforme exposto na Figura 5.31. Pois, o perfil de velocidade de ambos modelos está em maior concordância e a parede arterial possui a mesma lei constitutiva. Estas curvas possivelmente se tornem mais próximas ao estimar o valor de α também.

Com esta maior proximidade das curvas de fluxo obtidas pelos dois modelos podemos simular o problema acoplado 1D-3D de forma mais acurada (em relação à solução do problema tridimensional completo). Para tanto, vamos substituir a

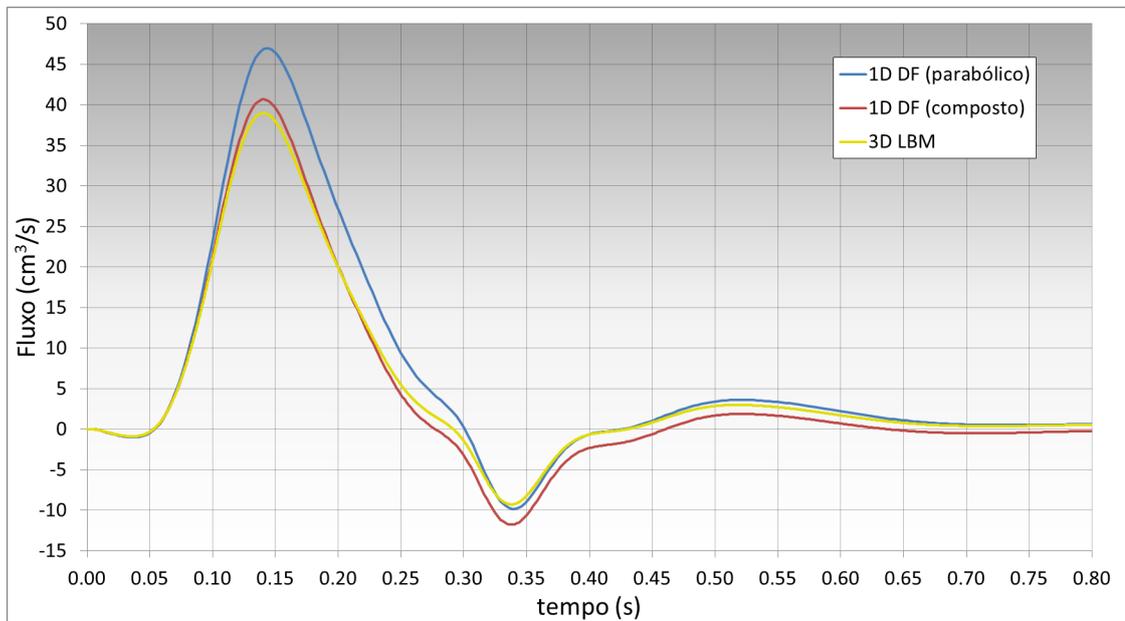


Figura 5.31: Comparação dos fluxos obtidos na modelagem 1D com perfil parabólico e perfil composto e na modelagem 3D do escoamento em um segmento da aorta abdominal.

metade proximal do segmento tridimensional por um segmento unidimensional, resultando em dois segmentos acoplados com relação de aspecto 1/1 cada. Sendo que, usaremos os valores de ζ^* apresentados na Figura 5.30 no modelo 1D.

Na Figura 5.32 mostramos as curvas de fluxo médio obtidas na modelagem 1D com perfil parabólico e com o perfil composto (detalhado acima), na modelagem 3D e na modelagem 1D-3D (com perfil composto no modelo unidimensional) do escoamento no segmento da aorta abdominal. Note que, pela boa concordância dos fluxos dos modelos 1D e 3D, a substituição de uma região tridimensional por um segmento unidimensional não afeta substancialmente a curva de fluxo. Na região amplificada mostramos, para o modelo acoplado 1D-3D, os fluxos na entrada, no meio (interface) e na saída do vaso. Destacando a distribuição aproximadamente linear da variação do fluxo ao longo do vaso.

Na Figura 5.33 mostramos a continuidade da área das seções transversais ao longo do vaso e do fluxo que as atravessa em 5 instantes do ciclo cardíaco. Mais precisamente, escolhemos o momento em que a pressão hidrostática tem maior variação temporal ($t = 0,115s$), os momentos em que o fluxo atinge os valores mínimo ($t = 0,335s$) e máximo ($t = 0,140s$) e os momentos em que a pressão

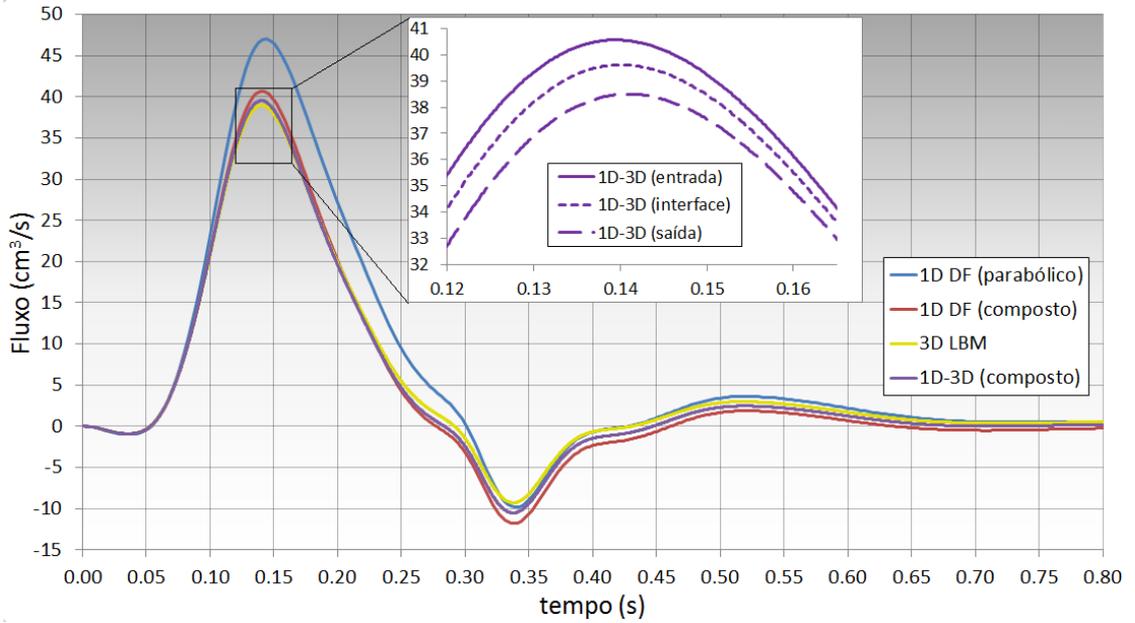


Figura 5.32: Comparação dos fluxos obtidos na modelagem 1D com perfil parabólico e perfil composto, na modelagem 3D e na modelagem 1D-3D (com perfil composto no modelo unidimensional) do escoamento no segmento da aorta abdominal.

hidrostática atinge seu valores mínimo ($t = 0,045s$) e máximo ($t = 0,205s$). Como esperado, notamos a continuidade das curvas de área e fluxo ao longo do canal, pois a parede arterial é modelada de forma equivalente em ambos modelos e os perfis assumidos no modelos estão bastante próximos dos perfis do modelo 3D (como vimos na Figura 5.29). Podemos observar pequenas oscilações da área nas extremidades do modelo 3D (metade direita das figuras), especialmente quando o fluxo é mais alto, mas estas não afetam significativamente a continuidade destas quantidades. As curvas de fluxo se mostram contínuas entre os dois modelos, somente quando o fluxo atinge o valor máximo podemos perceber um salto da ordem de 0,5% do fluxo.

Para resolver o problema acoplado 1D-3D, não foi necessário modificar o passo temporal da parte tridimensional (calculado para manter $\theta_r > 30$ e $Mach < 0,1$). Como vimos que no caso da seção anterior o custo introduzido pelo acoplamento com a parte unidimensional foi baixo usando $\varepsilon = 10^{-10}$ (na condição de convergência do esquema numérico entre os modelos 1D e 3D), optamos por usar um valor ainda menor neste escoamento ($\varepsilon = 10^{-14}$). Como pode ser visto na

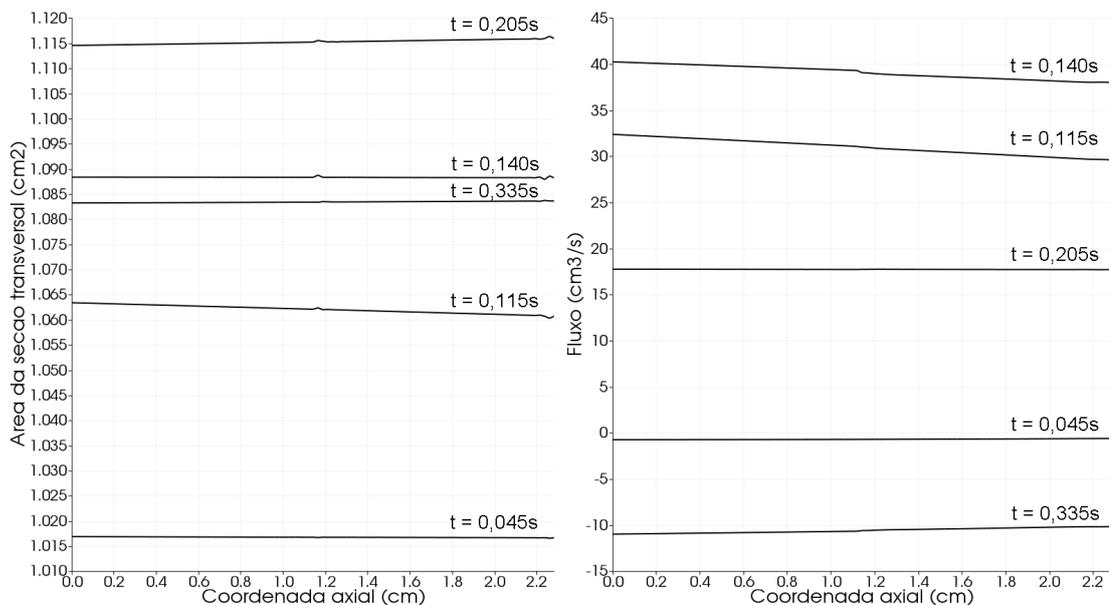


Figura 5.33: Curvas da área das seções transversais ao longo da aorta abdominal e do fluxo que as atravessa em 5 instantes do ciclo cardíaco.

Figura 5.34, o número de iterações entre modelos 1D e 3D foi alto (próximo de 50 iterações), mas este número pode ser reduzido ao usar valores de ε maiores. Além disso, o passo temporal da parte unidimensional usado foi 50 vezes menor que o da parte tridimensional, já que ao usar um passo temporal 10 vezes menor a simulação apresentou instabilidades numéricas. Porém, isto não afetou o desempenho do código, pois o custo computacional está concentrado na parte tridimensional. De fato, o tempo de computação do problema totalmente tridimensional para o problema acoplado diminuiu 49,71% (próximo do valor ideal de 50%), ou seja, 0,58% maior que o tempo ideal.

Diferentemente do problema anterior, ao usar $\Delta t_s / \Delta t_f = 4$, a simulação se manteve estável após acoplarmos os modelos 1D e 3D. Apesar das curvas de fluxo apresentarem oscilações de baixa amplitude a alta frequência ao usar $\Delta t_s / \Delta t_f = 4$, modificando as mesmas em menos de 0,4% (se comparado com o uso de passos temporais iguais), esta alternativa ainda se mostra interessante por reduzir o tempo de simulação em 27%.

Destes resultados podemos concluir que o modelo acoplado dimensionalmente heterogêneo proposto é capaz de modelar o escoamento sanguíneo em artérias de grande calibre, como a aorta. Mesmo em casos com alto valor de Reynolds (da

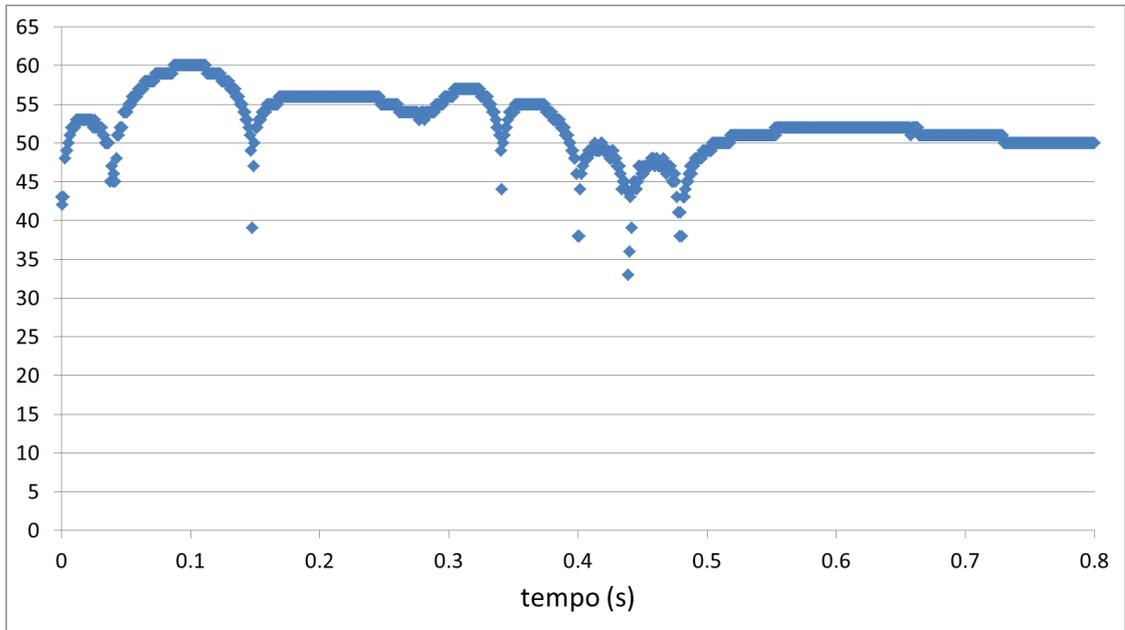


Figura 5.34: Número de iterações entre os modelos 1D e 3D na modelagem do escoamento sanguíneo na aorta abdominal.

ordem de 2000) e com grandes dilatações do raio dos vasos (da ordem de 10%).

Contribuições do Capítulo

Neste capítulo apresentamos a modelagem do escoamento em vasos deformáveis de forma unidimensional, através de um método explícito de diferenças finitas, e o seu acoplamento com o modelo tridimensional de *lattice* Boltzmann em problemas hemodinâmicos. As principais contribuições do capítulo foram:

- a proposta de uma alternativa para a modelagem do perfil de velocidade no modelo unidimensional quando o fluxo apresenta inversão de sentido (Seção 5.2);
- a proposta de esquemas numéricos para o acoplamento entre os modelos 1D e 3D em vasos complacentes (Seções 5.5);
- a análise por meio de experimentos numéricos de diferentes esquemas numéricos para o acoplamento entre os modelos 1D e 3D em problemas hemodinâmicos (Seções 5.4 e 5.7);
- a estimativa de perfis de velocidade através da composição de soluções de Womersley em problemas hemodinâmicos (Seção 5.7);
- a modelagem do escoamento sanguíneo em vasos de grande e médio calibre com interação fluido-estrutura através de modelos acoplados 1D-3D usando o LBM (Seção 5.7).

Capítulo 6

Conclusão

O capítulo de conclusão está dividido em três seções. Começamos com a discussão, na Seção 6.1, onde fazemos uma retomada dos principais resultados e suas implicações no uso dos modelos discutidos. Para então ressaltar, na Seção 6.2, as principais contribuições do presente trabalho, diante do que já se encontra na literatura. Finalizando com uma listagem de possíveis extensões das linhas de pesquisa estudadas na Seção 6.3.

6.1 Discussão

Dentro da grande gama de métodos numéricos voltados para a modelagem do escoamento de fluidos incompressíveis, o método de *lattice* Boltzmann (LBM) se destaca por unir a capacidade de representação de fenômenos complexos e a simplicidade presente no algoritmo de um método baseado em uma dinâmica mesoscópica simples. De forma geral e através da experiência obtida ao longo deste estudo, podemos destacar como aspecto positivo do LBM a característica de localidade presente em todos os passos do método, que leva a uma paralelização do algoritmo muito eficiente e fácil de ser implementada (como vimos na Seção 3.6). Com o desenvolvimento atual de máquinas com alto poder de processamento em paralelo, esta vantagem é muito significativa quando se pretende atravessar as barreiras criadas pelo alto custo computacional envolvido nas aplicações vistas atualmente no âmbito científico e tecnológico.

Através da realização das diversas simulações via LBM apresentadas neste trabalho, conseguimos verificar a capacidade que o método possui para representar situações físicas com diversas características, sempre no marco da modelagem de escoamentos de fluidos incompressíveis. Assim sendo, foram simulados escoamentos complexos, envolvendo número de Reynolds da ordem de 2000 e número de Womersley da ordem de 20, ao mesmo tempo que foram analisados casos com relações de aspecto geométricas (proporções entre as medidas espaciais do problema) que variam desde 1/1 até cerca de 20/1. Simulamos também o escoamento sanguíneo em um segmento da artéria vertebral, com geometria extraída da segmentação de uma imagem médica e condições de contorno extraídas de um modelo unidimensional da rede arterial global. O método mostrou-se capaz de fornecer soluções aproximadas acuradas para todos estes problemas (onde fizemos comparações, dependendo do problema, contra soluções analíticas, soluções numéricas obtidas por outros métodos e resultados de experimentos *in vitro*). Em particular, foi possível incorporar com precisão diferentes tipos de condições de contorno, bem como minimizar efeitos de compressibilidade indesejados, estes últimos em função da escolha de uma distribuição de equilíbrio adequada, assim como também da correta calibração dos parâmetros do LBM. Com relação a este último ponto, testamos e fornecemos técnicas que possibilitam calibrar corretamente os parâmetros do método de forma que a simulação seja estável e congruente com as condições físicas do problema.

Com relação à paralelização da implementação do LBM, realizamos um estudo bastante detalhado da simulação de um problema tridimensional com solução analítica, onde comparamos o desempenho e a acurácia desta implementação com uma implementação do método de elementos finitos (Seção 3.6). Ambos métodos geraram soluções com erros de ordens semelhantes em relação à solução analítica. Sendo que o FEM se mostrou mais acurado em malhas de mesmo refinamento, porém o LBM realizou as simulações em tempo menor. Portanto, quando comparamos os erros de cada solução com o

tempo necessário para realizá-las, ambas implementações mostraram eficiência semelhante. Ainda, realizamos testes onde a implementação em MPI do LBM mostrou ótima escalabilidade em clusters de até 32768 núcleos de processamento, chegando à marca de desempenho de 15000 MLUPS.

Na Seção 3.5, onde fizemos uma análise de estabilidade associada à distribuição de equilíbrio do LBM, foi constatado que para o escoamento testado a distribuição mais adotada na literatura não se mostrou a mais estável. Com isto concluímos que é possível melhorar a estabilidade do método, mantendo sua acurácia e desempenho computacional, através de modificações simples da distribuição de equilíbrio.

Na modelagem das interações entre fluido e estrutura (Capítulo 4), analisamos e implementamos modelos explícitos e implícitos de acoplamento do método de fronteira imersa com o LBM. Realizamos validações com casos de intensa interação entre o fluido e casos em que representamos estruturas rígidas. Também modelamos a parede de vasos arteriais, com um modelo elástico, em condições fisiológicas de escoamento do sangue e dilatação do vaso. Neste último caso, propomos uma forma de decomposição da pressão, visando manter o método acoplado estável, e fizemos uma análise detalhada da oscilação de ambas componentes nas frequências características encontradas nos principais vasos do SCVH.

Propomos e analisamos o uso de passos temporais distintos para o fluido e para a estrutura no problema com acoplamento explícito (Seção 4.5). Esta abordagem se mostrou acurada e estável nos testes realizados de modelagem da parede arterial em escoamentos sob condições fisiológicas, quando adotamos um passo 2 ou 4 vezes maior para a estrutura. Sendo que, com isso, conseguimos ganhos de desempenho que chegaram a 60%, dependendo do refinamento da malha do fluido.

No Capítulo 5 começamos estudando o problema de escoamentos em vasos complacentes modelados de forma unidimensional, através um método de

diferenças finitas. A implementação deste método foi validada com problemas clássicos do escoamento de fluidos incompressíveis, onde adaptamos o perfil velocidade para aumentar a acurácia da solução. Nos casos que o fluxo muda de sentido adaptamos o método para que se mantivesse estável e não apresentasse oscilações. Ainda na modelagem unidimensional, adaptamos da literatura uma forma de estimar os perfis de velocidades de escoamentos transientes a partir de soluções do escoamento de Womersley, em função das frequências que o caracterizam. Tal estimativa permitiu uma boa aproximação entre as soluções dos modelos 1D e 3D na modelagem do escoamento sanguíneo em um segmento da aorta abdominal (Seção 5.7.2).

Propomos, na Seção 5.5, o acoplamento entre os modelos 1D de diferenças finitas e 3D de *lattice* Boltzmann através de transmissões do fluxo e da pressão nas interfaces, com diferentes esquemas numéricos de acoplamento (implícitos e explícitos). Tais esquemas numéricos foram analisado nos problemas de validação, onde verificamos a grande influência que o acoplamento tem na estabilidade do problema acoplado. Mais ainda, devido à característica de localidade do acoplamento e ao modelo proposto para o acoplamento, o fato de acoplar um segmento unidimensional introduz pouca perda de desempenho da simulação tridimensional (mesmo em casos de acoplamento implícito com alto número de iterações, ver Seção 5.7.2).

Por fim, na Seção 5.7, os métodos de *lattice* Boltzmann (fluido em 3D), de fronteira imersa (estrutura em 3D) e de diferenças finitas (fluido e estrutura em 1D) acoplados foram usados para simular o escoamento sanguíneo em segmentos arteriais de grande e médio calibre. Os resultados mostraram um acoplamento consistente entre os modelo 1D e 3D, apresentando a continuidade e suavidade esperada do fluxo e da área do vaso na interface entre os modelos. Para que tais simulações se mantivessem estáveis, foi necessário usar passos temporais no modelo 1D de 10 a 50 vezes menores que no modelo 3D e manter uma condição forte para o acoplamento implícito entre os modelos, mas destacamos que isto adicionou custos

computacionais ínfimos nos casos testados. Ainda, a sub-relaxação foi de utilidade para acelerar a convergência do método.

6.2 Principais contribuições

Ao final de cada capítulo destacamos as principais contribuições introduzidas em cada tema. De forma geral, podemos destacar como principais contribuições do trabalho as seguintes:

- a proposta de uma distribuição de equilíbrio mais geral voltada para escoamentos incompressíveis (equação (2.28)) na Seção 2.4 e a análise de estabilidade linear e o desenvolvimento de técnicas para se obter distribuições de equilíbrio que tornem o LBM mais estável (Seção 3.5);
- a análise e indicação dos parâmetros numéricos adequados para a correta modelagem de escoamentos incompressíveis em aplicações e geometrias diversas;
- a modelagem e estudo de casos específicos do escoamento sanguíneo em vasos arteriais com paredes rígidas, expondo as problemáticas e desafios encontrados (Seção 3.4);
- o estudo da escalabilidade da implementação paralela do LBM em dois clusters com características distintas e as orientações para o aumento de eficiência (Seções 3.6.1 e 3.6.2), incluindo a comparação de desempenho e acurácia entre as implementações do LBM e do FEM, destacando os aspectos positivos e negativos de cada modelo (Seção 3.6.3);
- a análise dos parâmetros numéricos introduzidos pela fronteira imersa e pelo acoplamento com o LBM, através de experimentos numéricos de forma a entender o impacto no modelo físico e no desempenho computacional em estruturas tubulares (Seções 4.4, 4.5 e 4.6);

- a proposta e análise do uso de passo temporais distintos para o fluido e para a estrutura, visando redução de custo computacional (Seção 4.5);
- a proposta e teste de uma metodologia para a decomposição do efeito da pressão arterial em componentes hidrostática e proveniente do gradiente de pressão, visando manter a estabilidade e acurácia do método LB-IB perante grandes variações da pressão hidrostática, como ocorre no sistema cardiovascular (Seção 4.6);
- a análise por meio de experimentos numéricos de diferentes esquemas numéricos para o acoplamento entre modelos 1D (diferenças finitas) e 3D (*lattice* Boltzmann) em problemas hemodinâmicos (Seções 5.4 e 5.7);
- a estimativa de perfis de velocidade através da composição de soluções de Womersley na modelagem de problemas hemodinâmicos por modelos dimensionalmente heterogêneos, com uso do LBM (Seção 5.7).

6.3 Trabalhos futuros

Como sequência deste trabalho, destacamos algumas linhas de pesquisa que podem ser seguidas a partir dos resultados obtidos e dos pontos deixados em aberto ao longo do trabalho:

- extensão do estudo de estabilidade feito na Seção 3.5 para outros problemas bidimensionais e também tridimensionais, de forma que se tenha um panorama mais amplo de como a distribuição de equilíbrio afeta a estabilidade do LBM e qual seria a escolha adequada em função do problema a ser modelado;
- extensão do modelo de fronteira imersa para malhas não estruturadas, possibilitando a modelagem de geometrias complexas (vasos arteriais) e a validação da modelagem de decomposição da pressão (proposta na Seção 4.6) em casos mais gerais;

- ampliação das análises feitas do acoplamento entre os modelos 1D e 3D na modelagem do escoamento sanguíneo (Seção 5.7) para redes arteriais completas, possibilitando a análise da influência de uma escala global com a escala local do escoamento.

Referências Bibliográficas

- T Abe. Derivation of the Lattice Boltzmann Method by Means of the Discrete Ordinate Method for the Boltzmann Equation. **Journal of Computational Physics**, 131(1):241–246, 1997. ISSN 00219991. URL <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1996.5595>. 3, 16, 18
- A M Artoli, A Hoekstra, e P Sloot. Optimizing lattice Boltzmann simulations for unsteady flows. **Computers & Fluids**, 35(2):227–240, 2006a. ISSN 00457930. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045793005000320>. 49
- A M Artoli, A G Hoekstra, e P M A Sloot. Mesoscopic simulations of systolic flow in the human abdominal aorta. **Journal of biomechanics**, 39(5):873–84, 2006b. ISSN 0021-9290. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/16488226>. 4
- a M Artoli, a Sequeira, a S Silva-Herdade, e C Saldanha. Leukocytes rolling and recruitment by endothelial cells: hemorheological experiments and numerical simulations. **Journal of biomechanics**, 40(15):3493–502, 2007. ISSN 0021-9290. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/17651743>. 25
- R Benzi, S Succi, e M Vergassola. Theory and application of the lattice Boltzmann equation. **Phys. Rep.**, 222(3):147, 1992. 4, 17
- P Bhatnagar, E Gross, e M Krook. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. **Physical Review**, 94(3):511–525, 1954. ISSN 0031-899X. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.94.511>. xix, 17, 18

- P J Blanco, R A Feijóo, e S Urquiza. A unified variational approach for coupling 3D-1D models and its blood flow applications. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 196(41-44):4391–4410, 2007. ISSN 00457825. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045782507002010>. 7, 73, 141, 156, 186
- P J Blanco, S A Urquiza, e R A Feijóo. Assessing the influence of heart rate in local hemodynamics through coupled 3D-1D-0D models. **International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering**, 26(7):890–903, 2010. ISSN 2040-7947. URL <http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cnm.1389/abstract>. 7, 156
- M'hamed Bouzidi, Mouaouia Firdaouss, e Pierre Lallemand. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. **Physics of Fluids**, 13(11):3452, 2001. ISSN 10706631. URL <http://link.aip.org/link/?PHFLE6/13/3452/1.30>
- J E Broadwell. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method. **J. Fluid Mech.**, 19:401–414, 1964. 15
- N Cao, Shiyi Chen, Shi Jin, e Daniel Martínez. Physical symmetry and lattice symmetry in the lattice Boltzmann method. **Physical Review E**, 55(1):R21–R24, 1997. ISSN 1063-651X. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.55.R21>. 19
- Arnab Chaudhuri, Abdellah Hadjadj, e Ashwin Chinnayya. On the use of immersed boundary methods for shock/obstacle interactions. **Journal of Computational Physics**, 230(5):1731–1748, 2011. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999110006248>. 125
- H Chen, S Chen, e W H Matthaeus. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. **Phys. Rev. A.**, 45:5339–5342, 1992. 17, 21

- S Chen, H Chen, D Martinez, e W H Matthaeus. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. **Phys Rev. Lett.**, 67:3776–3779, 1991. 17
- S Chen e G D Doolen. Lattice Boltzmann method for fluid flows. **Annual Review of Fluid Mechanics**, 30(1):329–364, 1998. 17
- Huihong Cheng, Yanchao Qiao, Chang Liu, Yongbing Li, Bojing Zhu, Yaolin Shi, Dongsheng Sun, Kai Zhang, e Weiren Lin. Extended hybrid pressure and velocity boundary conditions for D3Q27 lattice Boltzmann model. **Applied Mathematical Modelling**, 36(5):2031–2055, 2012. ISSN 0307904X. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2011.08.015>. 29
- Y Cheng e J Li. Introducing unsteady non-uniform source terms into the lattice Boltzmann model. **Journal for Numerical Methods in Fluids**, (June 2007):629–641, 2007. URL <http://www3.interscience.wiley.com/journal/114280500/abstract>. 6, 114, 117, 118, 119, 125, 131
- Y Cheng e H Zhang. Immersed boundary method and lattice Boltzmann method coupled FSI simulation of mitral leaflet flow. **Computers & Fluids**, 39(5):871–881, 2010. ISSN 00457930. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.01.003>. 5, 6, 113, 122, 123, 124
- YI Cho e KR Kensey. Effects of the non-Newtonian viscosity of blood on hemodynamics of diseased arterial flows. **Advances in Bioengineering, BED**, 28:241–262, 1989. URL <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:Effects+of+the+non-Newtonian+viscosity+of+blood+on+hemodynamics+of+diseased+arterial+flows#0>. 69
- R Cornubert, D D’Humières, e D Levermore. A Knudsen layer theory for lattice gases. **Physica D**, 47:241–259, 1991. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/016727899190295K>. 30

- AÜ Coskun, C Chen, e PH Stone. Computational fluid dynamics tools can be used to predict the progression of coronary artery disease. **Physica A: Statistical**, 362:182–190, 2006. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S037843710500943X>. 2, 75
- D D’Humières, P Lallemand, e U Frisch. Lattice gas models for 3D hydrodynamics. **Europhys. Lett.**, 2:291–297, 1986. 16
- Robert Dillon, Lisa Fauci, Aaron Fogelson, e Donald Gaver III. Modeling Biofilm Processes Using the Immersed Boundary Method. **Journal of Computational Physics**, 129(1):57–73, 1996. ISSN 00219991. URL <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1996.0233>. 6
- M.M. Dupin, I. Halliday, C.M. Care, e L.L. Munn. Lattice Boltzmann modelling of blood cell dynamics. **International Journal of Computational Fluid Dynamics**, 22(7):481–492, 2008. ISSN 1061-8562. URL <http://dx.doi.org/10.1080/10618560802238242>. 3, 4
- A Dupuis, P Chatelain, e P Koumoutsakos. An immersed boundary-lattice-Boltzmann method for the simulation of the flow past an impulsively started cylinder. **Journal of Computational Physics**, 227(9):4486–4498, 2008. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999108000247>. 119
- C Ross Ethier e D A Steinman. Exact fully 3d navier-stokes solutions for benchmarking. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, 19(March):369–375, 1994. 97
- H-P Fang, R-Z Wan, e Z-F Lin. Lattice Boltzmann model with nearly constant density. **Physical Review E**, 66(3):1–4, 2002a. ISSN 1063-651X. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.66.036314>. 57
- Haiping Fang, Zuwei Wang, Zhifang Lin, e Muren Liu. Lattice Boltzmann method for simulating the viscous flow in large distensible blood vessels. **Physical**

- Review E**, 65(5), 2002b. ISSN 1063-651X. URL <http://pre.aps.org/abstract/PRE/v65/i5/e051925>. 5
- Z Feng. The immersed boundary-lattice Boltzmann method for solving fluid-particles interaction problems. **Journal of Computational Physics**, 195(2):602–628, 2004. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999103005758>. 114, 115, 119
- L Formaggia. On the coupling of 3D and 1D Navier-Stokes equations for flow problems in compliant vessels. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 191(6-7):561–582, 2001. ISSN 00457825. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045782501003024>. 7, 156
- L Formaggia, J.F. Gerbeau, F Nobile, e A Quarteroni. Numerical treatment of defective boundary conditions for the navier-stokes equations. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, 40(1):376–401, 2003. URL <http://www.jstor.org/stable/4100958>. 7, 156
- U Frisch, B Hasslacher, e Y Pomeau. Lattice gas cellular automata for the Navier-Stokes equations. **Phys. Rev. Lett.**, 56:1505, 1986. 15, 22, 23
- Hector M Garcia-Garcia, Marco A Costa, e Patrick W Serruys. Imaging of coronary atherosclerosis: intravascular ultrasound. **European heart journal**, 31(20):2456–69, 2010. ISSN 1522-9645. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/20823109>. 2
- U. Ghia, KN Ghia, e CT Shin. High-Re solutions for incompressible flow using the Navier-Stokes equations and a multigrid method. **Journal of Computational Physics**, 48(3):387–411, 1982. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0021999182900584>. 55, 57
- G D Giannoglou, J V Soulis, T M Farmakis, D M Farmakis, e G E Louridas. Haemodynamic factors and the important role of local low static pressure in

- coronary wall thickening. **International Journal of Cardiology**, 86:27–40, 2002. 2, 75
- D R Golbert, P J Blanco, A Clausse, e R a Feijóo. Tuning a lattice-Boltzmann model for applications in computational hemodynamics. **Medical engineering & physics**, 34(3):339–349, 2012. ISSN 1873-4030. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21880536>. 69
- D. Goldstein, R. Handler, e L. Sirovich. Modeling a No-Slip Flow Boundary with an External Force Field. **Journal of Computational Physics**, 105(2):354–366, 1993. ISSN 00219991. URL <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.1993.1081>. 6, 113
- D. Goldstein, R. Handler, e L. Sirovich. Direct numerical simulation of turbulent flow over a modeled riblet covered surface. **Journal of Fluid Mechanics**, 302:333–376, 1995. ISSN 1469-7645. URL http://journals.cambridge.org/abstract_S0022112095004125. 6, 113
- Z Guo, C Zheng, e B Shi. An extrapolation method for boundary conditions in lattice Boltzmann method. **Physics of Fluids**, 14(6):2007–2010, 2002. ISSN 10706631. URL <http://link.aip.org/link/PHFLE6/v14/i6/p2007/s1&Agg=doi>. 30, 33
- J Hardy, O de Pazzis, e Y Pomeau. Molecular dynamics of a classical lattice gas: transport properties and time correlation functions. **Phys. Rev. A**, 13: 1949–1961, 1976. 15
- X He, G Duckwiler, e D J Valentino. Lattice Boltzmann simulation of cerebral artery hemodynamics. **Computers & Fluids**, 38(4):789–796, 2009a. ISSN 00457930. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045793008001540>. 25, 69
- X He e L S Luo. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. **Phys. Rev. E.**, 55:6333–6336, 1997a. 16

- X He e L-S Luo. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. **Journal of Statistical Physics**, 88(3-4):927–944, 1997b. URL <http://www.springerlink.com/index/M38J916685246522.pdf>. 4, 21, 27, 38, 39, 49
- Xing He, Gary Duckwiler, e Daniel J. Valentino. Lattice Boltzmann simulation of cerebral artery hemodynamics. **Computers & Fluids**, 38(4):789–796, 2009b. ISSN 00457930. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045793008001540>. 3, 4, 18
- F J Higuera e J Jiménez. Boltzmann approach to lattice gas simulations. **Europhys. Lett.**, 9:663–668, 1989. 16
- F J Higuera, S Succi, e R Benzi. Lattice gas dynamics with enhanced collisions. **Europhys. Lett.**, 9:345–349, 1989. 16
- M Hirabayashi, M Ohta, K Barath, D Rufenacht, e B Chopard. Numerical analysis of the flow pattern in stented aneurysms and its relation to velocity reduction and stent efficiency. **Mathematics and Computers in Simulation**, 72(2-6):128–133, 2006. ISSN 03784754. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378475406001352>. 4, 18, 23, 69
- A Hoekstra, J. van't Hoff, A M Artoli, e P M A Slood. Unsteady flow in a 2D elastic tube with the LBGK method. **Future Generation Computer Systems**, 20(6):917–924, 2004. ISSN 0167-739X. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167739X03002632>. 5
- Y. Hoi, H. Meng, S.H. Woodward, B.R. Bendok, R.A. Hanel, L.R. Guterman, e L.N. Hopkins. Effects of arterial geometry on aneurysm growth: three-dimensional computational fluid dynamics study. **Journal of neurosurgery**, 101(4):676–681, 2004. URL <http://thejns.org/doi/pdf/10.3171/jns.2004.101.4.0676>. 80
- P E Hughes e T V How. Flow structures at the proximal side-to-end anastomosis. Influence of geometry and flow division. **Journal of**

- biomechanical engineering**, 117(May):224, 1995. URL <http://link.aip.org/link/?JBENDY/117/224/1>. 70, 71, 72
- T.J.R. Hughes e J. Lubliner. On the one-dimensional theory of blood flow in the larger vessels. **Mathematical Biosciences**, 18(1-2):161–170, 1973. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0025556473900278>. 158
- T Hyakutake, T Matsumoto, e S Yanase. Lattice Boltzmann simulation of blood cell behavior at microvascular bifurcations. **Mathematics and Computers in Simulation**, 72(2-6):134–140, 2006. ISSN 03784754. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378475406001388>. 4
- L Kadanoff. On two levels. **Physics Today**, 39:7–9, 1986. 15
- Brian Keating, George Vahala, Jeffrey Yepez, Min Soe, e Linda Vahala. Entropic lattice Boltzmann representations required to recover Navier-Stokes flows. **Physical Review E**, 75(3):1–11, 2007. ISSN 1539-3755. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.75.036712>. 25
- A.W Khir, A Zambanini, e K.H Parker. Local and regional wave speed in the aorta: effects of arterial occlusion. **Medical Engineering & Physics**, 26(1):23–29, 2004. ISSN 13504533. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1350453303001413>. 132
- Jungwoo Kim, Dongjoo Kim, e Haecheon Choi. An Immersed-Boundary Finite-Volume Method for Simulations of Flow in Complex Geometries. **Journal of Computational Physics**, 171(1):132–150, 2001. ISSN 00219991. URL <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2001.6778>. 6, 113
- M. Kim, E.I. Levy, H. Meng, e L.N. Hopkins. Quantification of hemodynamic changes induced by virtual placement of multiple stents across a wide-necked basilar trunk aneurysm. **Neurosurgery**, 61(6):1305–1313, 2007. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2756037/>. 80

- M.P. Kirkpatrick, S.W. Armfield, e J.H. Kent. A representation of curved boundaries for the solution of the Navier-Stokes equations on a staggered three-dimensional Cartesian grid. **Journal of Computational Physics**, 184(1):1–36, 2003. ISSN 00219991. URL [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991\(02\)00013-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991(02)00013-X). 5, 113
- J. M. V. a Koelman. A Simple Lattice Boltzmann Scheme for Navier-Stokes Fluid Flow. **Europhysics Letters (EPL)**, 15(6):603–607, 1991. ISSN 0295-5075. URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/15/i=6/a=007?key=crossref.d1682e59f13b7c834e6052cef5e39471>. 18
- M Krafczyk, M Cerrolaza, M Schulz, e E Rank. Analysis of 3D transient blood flow passing through an artificial aortic valve by Lattice-Boltzmann methods. **Journal of biomechanics**, 31(5):453–62, 1998. ISSN 0021-9290. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/9727343>. 4
- RH Kufahl e ME Clark. A circle of Willis Simulation Using Distensible Vessels and Pulsatile Flow. **Journal of biomechanical engineering**, 107:112–122, 1985. URL <http://link.aip.org/link/?JBENDY/107/112/1>. 8, 157, 159, 168
- AJC Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation. **Journal of Fluid Mechanics**, 271:285–309, 1994. URL <http://journals.cambridge.org/production/action/cjoGetFulltext?fulltextid=352764>. 30
- D.V. Le, B.C. Khoo, e K.M. Lim. An implicit-forcing immersed boundary method for simulating viscous flows in irregular domains. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 197(25-28):2119–2130, 2008. ISSN 00457825. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045782507003313>. 125
- Jack D. Lemmon e Ajit P. Yoganathan. Computational Modeling of Left Heart Diastolic Function: Examination of Ventricular Dysfunction. **Journal of**

- Biomechanical Engineering**, 122(4):297, 2000a. ISSN 01480731. URL <http://asmed1.org/getabs/servlet/GetabsServlet?prog=normal&id=JBENDY000122000004000297000001&idtype=cvips&gifs=yes&ref=no>. 6
- Jack D. Lemmon e Ajit P. Yoganathan. Three-Dimensional Computational Model of Left Heart Diastolic Function With Fluid-Structure Interaction. **Journal of Biomechanical Engineering**, 122(2):109, 2000b. ISSN 01480731. URL <http://asmed1.org/getabs/servlet/GetabsServlet?prog=normal&id=JBENDY000122000002000109000001&idtype=cvips&gifs=yes&ref=no>. 6
- A.L.F. Lima E Silva, A. Silveira-Neto, e J.J.R. Damasceno. Numerical simulation of two-dimensional flows over a circular cylinder using the immersed boundary method. **Journal of Computational Physics**, 189(2):351–370, 2003. ISSN 00219991. URL <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=989587.989588>. 6, 113, 125
- Yanhong Liu. A lattice Boltzmann model for blood flows. **Applied Mathematical Modelling**, 36(7):2890–2899, 2012. ISSN 0307904X. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0307904X11006354>. 23
- K Mattila, J Hyvaluoma, T Rossi, M Aspнас, e J Westerholm. An efficient swap algorithm for the lattice Boltzmann method. **Computer Physics Communications**, 176(3):200–210, 2007. ISSN 00104655. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.cpc.2006.09.005>. 233
- David M. McQueen e Charles S. Peskin. A three-dimensional computer model of the human heart for studying cardiac fluid dynamics. **ACM SIGGRAPH Computer Graphics**, 34(1):56, 2000. ISSN 00978930. URL <http://dl.acm.org/citation.cfm?id=563788.604453>. 6
- M. Meyer, a. Devesa, S. Hickel, X.Y. Hu, e N.a. Adams. A conservative immersed interface method for Large-Eddy Simulation of incompressible flows. **Journal**

- of **Computational Physics**, 229(18):6300–6317, 2010. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999110002275>. 125
- Umberto Morbiducci, Raffaele Ponzini, Mauro Grigioni, e Alberto Redaelli. Helical flow as fluid dynamic signature for atherogenesis risk in aortocoronary bypass. A numeric study. **Journal of biomechanics**, 40(3):519–34, 2007. ISSN 0021-9290. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/16626721>. 2, 75
- A. Najafi-Yazdi e L. Mongeau. An absorbing boundary condition for the lattice Boltzmann method based on the perfectly matched layer. **Computers & Fluids**, 68(null):203–218, 2012. ISSN 00457930. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.07.017>. 29
- X Niu, C Shu, Y Chew, e Y Peng. A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows. **Physics Letters A**, 354(3):173–182, 2006. ISSN 03759601. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0375960106001472>. 114
- O Pelliccioni, M Cerrolaza, e M Herrera. Lattice Boltzmann dynamic simulation of a mechanical heart valve device. **Mathematics and Computers in Simulation**, 75(1-2):1–14, 2007. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378475406002187>. 3, 4, 18, 23
- Y Peng, C Shu, Y Chew, X Niu, e X Lu. Application of multi-block approach in the immersed boundary-lattice Boltzmann method for viscous fluid flows. **Journal of Computational Physics**, 218(2):460–478, 2006. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999106000933>. 114
- Charles S Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. **Journal of Computational Physics**, 25(3):220–252, 1977. ISSN 00219991. URL [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(77\)90100-0](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(77)90100-0). 6, 113

- P C Philippi, L A Hegele, L O E dos Santos, e R Surmas. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. **Physical Review E**, 73(5):1–12, 2006. ISSN 1539-3755. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.056702>. 5, 16
- Y H Qian. **Lattice gas and lattice kinetic theory applied to the Navier-Stokes equations**. Tese de Doutorado, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1990. 17
- Y H Qian, D D’Humières, e P Lallemand. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. **Europhysics Letters**, 17(6):479–84, 1992. 17, 21
- Y H Qian, J Lebowitz, e S Orszag. Special issue on lattice Gas. **J. Stat. Phys.**, 81, 1995a. 4, 17
- Y H Qian, S Succi, e S Orszag. Recent advances in lattice Boltzmann computing. **Ann. Rev. Comp. Phys.**, 3:195, 1995b. 4, 17
- YH Qian e SA Orszag. Lattice BGK models for the Navier-Stokes equation: nonlinear deviation in compressible regimes. **EPL (Europhysics Letters)**, 21(3):255–259, 1993. URL <http://iopscience.iop.org/0295-5075/21/3/001>. 18, 27
- Philippe Reymond, Fabrice Merenda, Fabienne Perren, Daniel Rüfenacht, e Nikos Stergiopoulos. Validation of a one-dimensional model of the systemic arterial tree. **American journal of physiology. Heart and circulatory physiology**, 297(1):H208–22, 2009. ISSN 1522-1539. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/19429832>. 164
- D H Rothman. **Lattice-Gas Cellular Automata: Simple Models of Complex Hydrodynamics**. Cambridge University Press, 2004. ISBN 052155201X. 3
- David Russell e Z. Jane Wang. A cartesian grid method for modeling multiple moving objects in 2D incompressible viscous flow. **Journal of Computational**

- Physics**, 191(1):177–205, 2003. ISSN 00219991. URL [http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00310-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00310-3). 5, 113
- A. Schelin, Gy. Károlyi, A. de Moura, N. Booth, e C. Grebogi. Chaotic advection in blood flow. **Physical Review E**, 80(1):016213, 2009. ISSN 1539-3755. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.80.016213>. 3, 4
- X W Shan e X Y He. Discretization of the velocity space in the solution of the Boltzmann equation. **PHYSICAL REVIEW LETTERS**, 80(1):65–68, 1998. ISSN 0031-9007. 5, 16
- Xiaowen Shan. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models. **Physical Review E**, 73(4):6–9, 2006. ISSN 1539-3755. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.73.047701>. 5, 16
- C Shu, N Liu, e Y Chew. A novel immersed boundary velocity correction-lattice Boltzmann method and its application to simulate flow past a circular cylinder. **Journal of Computational Physics**, 226(2):1607–1622, 2007. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999107002513>. 5, 6, 114, 119
- J Sterling e S Chen. Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods. **Journal of Computational Physics**, 123(1):196–206, 1996. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999196900169>. 86
- S Succi. Lattice Boltzmann Equation: failure or success. **Physica A**, 240:221–228, 1997. 17
- S Urquiza, P J Blanco, M Venere, e R A Feijóo. Multidimensional modelling for the carotid artery blood flow. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 195(33-36):4002–4017, 2006. ISSN 00457825. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0045782505003440>. 7, 73, 97, 156

- R. Verberg e A. Ladd. Lattice-Boltzmann Model with Sub-Grid-Scale Boundary Conditions. **Physical Review Letters**, 84(10):2148–2151, 2000. ISSN 0031-9007. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.2148>. 30
- Joris C.G. Verschaeve e Bernhard Müller. A curved no-slip boundary condition for the lattice Boltzmann method. **Journal of Computational Physics**, 229(19):6781–6803, 2010. ISSN 00219991. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2010.05.022>. 29
- I Vignon-Clementel, C Figueroa, K Jansen, e C Taylor. Outflow boundary conditions for three-dimensional finite element modeling of blood flow and pressure in arteries. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, 195i:3776–3996, 2006. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782505002586>. 7, 156, 157
- Jing Wan, Brooke Steele, Sean A. Spicer, Sven Strohband, Gonzalo R. Feijó, Thomas J.R. Hughes, e Charles A. Taylor. A One-dimensional Finite Element Method for Simulation-based Medical Planning for Cardiovascular Disease. **Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering**, 5(3):195–206, 2002. ISSN 1025-5842. URL <http://dx.doi.org/10.1080/10255840290010670>. 158
- HW Weizsacker e JG Pinto. Isotropy and anisotropy of the arterial wall. **Journal of biomechanics**, 21(6), 1988. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0021929088902400>. 6, 114
- J R Womersley. Method for the calculation of velocity, rate of flow and viscous drag in arteries when the pressure gradient is known. **J. Physiol.**, 127:553–563, 1955. 66, 164
- J. Wu e C. Shu. Implicit velocity correction-based immersed boundary-lattice Boltzmann method and its applications. **Journal of Computational Physics**,

- 228(6):1963–1979, 2009. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999108006116>. 5, 113
- Wang Xian e Aoki Takayuki. Multi-GPU performance of incompressible flow computation by lattice Boltzmann method on GPU cluster. **Parallel Computing**, 37(9):521–535, 2011. ISSN 01678191. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0167819111000214>. 96
- K Xiu-Ying, J Yu-Pin, L Da-He, e J Yong-Juan. Three-dimensional lattice Boltzmann method for simulating blood flow in aortic arch. **Chinese Physics B**, 17(3):1041–1049, 2008. ISSN 1674-1056. URL <http://stacks.iop.org/1674-1056/17/i=3/a=049?key=crossref.75ec865996830dffc9c7ceff0fe91e52>. 25
- J.-Y. Yang, S.-C. Yang, Y.-N. Chen, e C.-A. Hsu. Implicit weighted ENO schemes for the three-dimensional incompressible Navier-Stokes equations. **J. Comput. Phys.**, 146(1):464–487, 1998. ISSN 0021-9991. 64
- Zhaoxia Yang. Pressure condition for lattice Boltzmann methods on domains with curved boundaries. **Computers & Mathematics with Applications**, 59(7):2168–2177, 2010. ISSN 08981221. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0898122109006518>. 29, 33
- J.M. Yeomans. Mesoscale simulations: Lattice Boltzmann and particle algorithms. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, 369(1):159–184, 2006. ISSN 03784371. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0378437106004067>. 21, 27, 28, 83, 90
- Xuwen Yin e Junfeng Zhang. An Improved Bounce-Back Scheme for Complex Boundary Conditions in Lattice Boltzmann Method. **Journal of Computational Physics**, (February), 2012. ISSN 00219991. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999112000939>. 29

- D Yu, R Mei, L-S Luo, e W Shyy. Viscous flow computations with the method of lattice Boltzmann equation. **Progress in Aerospace Sciences**, 39(5):329–367, 2003. ISSN 03760421. URL <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0376042103000034>. 30
- J Zhang, P C Johnson, e A S Popel. An immersed boundary lattice Boltzmann approach to simulate deformable liquid capsules and its application to microscopic blood flows. **Physical biology**, 4(4):285–95, 2007. ISSN 1478-3975. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/18185006>. 6
- J Zhang, P C Johnson, e A S Popel. Red blood cell aggregation and dissociation in shear flows simulated by lattice Boltzmann method. **Journal of biomechanics**, 41(1):47–55, 2008. ISSN 0021-9290. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/17888442>. 6, 114
- C. H. Zhou, C. Shu, e Y. Z. Wu. Extension of domain-free discretization method to simulate compressible flows over fixed and moving bodies. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, 53(2):175–199, 2007. ISSN 02712091. URL <http://doi.wiley.com/10.1002/flid.1254>. 5, 113
- C.H. Zhou e C. Shu. Extension of local domain-free discretization method to simulate 3D flows with complex moving boundaries. **Computers & Fluids**, 64(null):98–107, 2012. ISSN 00457930. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.05.012>. 5, 113
- Luoding Zhu, Guowei He, Shizhao Wang, Laura Miller, Xing Zhang, Qian You, e Shiaofen Fang. An immersed boundary method based on the lattice Boltzmann approach in three dimensions, with application. **Computers & Mathematics with Applications**, 61(12):3506–3518, 2011. ISSN 08981221. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.camwa.2010.03.022>. 114
- Luoding Zhu e Charles S. Peskin. Simulation of a Flapping Flexible Filament in a Flowing Soap Film by the Immersed Boundary Method. **Journal of**

Computational Physics, 179(2):452–468, 2002. ISSN 00219991. URL <http://dx.doi.org/10.1006/jcph.2002.7066>. 6

Q Zou e X He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. **Physics of Fluids**, 9(6):1591–98, 1997. ISSN 10706631. URL <http://link.aip.org/link/PHFLE6/v9/i6/p1591/s1&Agg=doi>. 30, 33, 34, 71

Apêndice A

Pseudo-códigos e otimizações dos algoritmos

Neste capítulo apresentamos os pseudo-códigos das implementações do LBM (Seção A.1) e do método acoplado LB-IB (Seção A.2), além das principais otimizações feitas em cada código para aumentar o desempenho das implementações. Apesar de não ser o foco principal deste trabalho, realizamos otimizações do algoritmo que viabilizaram muitas das simulações apresentadas neste trabalho. As mesmas foram feitas visando-se obter o melhor aproveitamento dos recursos computacionais que dispusemos.

Não apresentamos aqui o pseudo-código e as otimizações da implementação do método acoplado LB-DF (3D-1D) porque este acoplamento não introduz custos computacionais significativos, como vimos nas Seções 5.6 e 5.7. Também porque já expusemos de forma detalhada como este acoplamento pode ser implementado e otimizado na Seção 5.5.2. Além disso, detalhamos também os esquemas numéricos de acoplamento (Seção 5.5.1) e seus efeitos na redução do custo computacional do acoplamento 1D-3D (Seções 5.6 e 5.7).

A.1 Implementação do LBM

De forma sucinta será exposto a seguir o pseudo-código básico de uma implementação do LBM, no qual destacamos os principais passos do método, conforme exposto no fluxograma da Figura 2.1.

A.1.1 Pseudo-código

Nesta implementação classificaremos as células do *lattice* em três grupos: células internas (com distribuições denominadas **fi**), células de fronteira representando condições de contorno de velocidade (com distribuições denominadas **fv**) e células de fronteira representando condições de contorno de pressão (com distribuições denominadas **fp**). Consideraremos que estas três variáveis guardam informações das distribuições de partículas nos instantes de tempo **t1** e **t2**, sendo $t2 = t1 + \Delta t$. Logo, estas variáveis (**fi**, **fv** e **fp**) possuem três índices: o primeiro indica o instante de tempo (**t1** ou **t2**), o segundo indica qual a célula em que a distribuição se encontra e o terceiro indica a direção na qual esta se desloca. Por exemplo, **fi(t1,5,7)** indica a distribuição de partículas que se desloca na direção \vec{e}_7 (definida de acordo com o *lattice*) a partir da célula interna de número 5 (definida de acordo com a numeração adotada) no instante de tempo **t1**.

Abaixo apresentamos o pseudo-código de uma implementação do LBM, no qual omitiu-se os dois últimos índices das variáveis **fi**, **fv** e **fp**, ou seja, leia-se **fi(a)**, **fv(a)** e **fp(a)** como **fi(a,1:Ni,0:L)**, **fv(a,1:Nv,0:L)** e **fp(a,1:Np,0:L)**, respectivamente. Onde, **L** é o número de direções do *lattice* e **Ni**, **Nv** e **Np** indicam o número de células internas, de fronteira com condição de contorno de velocidade e de fronteira com condição de contorno de pressão, respectivamente. No pseudo-código, as sentenças iniciadas por “!” devem ser consideradas como comentários.

Pseudo-código LBM:

```
!Leitura da malha e das condições de contorno
ler_lattice()
!Leitura das condições iniciais (podendo ser campos de velocidade e de
!pressão ou uma distribuição de partículas)
ler_condicoes_iniciais(fi(t1),fv(t1),fp(t1))
!Inicia-se o laço temporal
faça
```

```

fi(t1) = colisao_i(fi(t1))
fv(t1) = condicao_de_contorno_v(fv(t1),fi(t1))
fp(t1) = condicao_de_contorno_p(fp(t1))
(fi(t2),fv(t2),fp(t2)) = propagacao(fi(t1),fv(t1),fp(t1))
se (condicao_de_parada(fi(t1),fi(t2),fp(t1),fp(t2),fv(t1),fv(t2)))
    entao sair
!Atualização das distribuições no instante de tempo t1
(fi(t1),fv(t1),fp(t1)) = (fi(t2),fv(t2),fp(t2))
fim faça

```

Repare que o pseudo-código é pequeno devido à simplicidade de descrição dos passos de uma implementação via LBM. A condição de parada acima (representada pela rotina `condicao_de_parada()`) pode ser baseada, por exemplo, na variação do campo de velocidade ou de pressão, conforme alguma das normas (3.2)–(3.7).

O uso de rotinas para a leitura da malha, das condições de contorno e das condições iniciais permite a configuração de uma série de problemas a partir de arquivos de entrada, sem a necessidade de alterar a implementação. Além de permitir a retomada de simulações interrompidas.

As rotinas de colisão (`colisao_i()`) e propagação (`propagacao()`) das distribuições nas células internas representam uma divisão da equação de *lattice* Boltzmann em duas etapas, conforme exposto nas equações (2.9) e (2.10). Nestas equações, a distribuição auxiliar $\tilde{f}_i(\vec{x}, t)$ pode ser mapeada no algoritmo sobre a distribuição $f_i(\vec{x}, t)$ para economia de memória. Enquanto, as rotinas de imposição de condições de contorno (`condicao_de_contorno_v()` e `condicao_de_contorno_p()`) são descritas de acordo com o modelo de representação escolhido, conforme explicado nas Seção 2.5.

A.1.2 Otimizações

Buscamos realizar uma série de otimizações neste trecho da implementação por se tratar do núcleo das simulações tridimensionais.

Primeiramente, utilizamos uma estrutura de dados com a qual pudéssemos minimizar o uso de memória e de tempo de processamento em uma simulação. Isto foi possível através da introdução de listas de células alocadas dinamicamente e de ponteiros que indicassem suas células vizinhas. Desta forma, pudemos alocar somente as células contidas no domínio do problema, independentemente da forma do mesmo, otimizando o consumo de memória. E, através das listas de células, conseguimos percorrer somente as células de interesse em cada rotina (células internas, células de fronteira, etc), otimizando o tempo de processamento.

No pseudo-código descrito acima tivemos que alocar todas as distribuições de partículas em dois instantes de tempo (t_1 e t_2) para realizar a rotina de propagação. Usando uma abordagem de troca (*swap*) de dados entre posições da memória (conforme proposto por Mattila et al. (2007)), pudemos reduzir a alocação das distribuições de partículas para somente o instante de tempo atual. Portanto, reduzimos pela metade o principal consumo de memória, permitindo a implementação de problemas com maior quantidade de células do LBM. Com esta otimização também estamos removendo a etapa de atualização das distribuições no instante de tempo t_1 , pois temos somente um instante de tempo armazenado na memória. Porém, teremos que armazenar as quantidades, do instante de tempo anterior, usadas na rotina de `condicao_de_parada()` antes de realizar a propagação, pois as mesmas serão sobrescritas. Se estivermos analisando, por exemplo, o campo de velocidade na condição de parada, teremos que armazenar somente 2 ou 3 (2D ou 3D) valores por célula de fluido, o que é muito melhor do que armazenar 9 ou 19 (2D ou 3D) valores de distribuições de equilíbrio (necessários ao armazenar dois instantes de tempo). Porém, quando a condição de parada está relacionada com um intervalo de periodicidade da solução (comum na modelagem do SCVH), temos que armazenar as quantidades, do início do ciclo atual, usadas na rotina de `condicao_de_parada()` mesmo que usemos a abordagem de propagação sem *swap*.

Como terceiro passo de otimização, resolvemos aproveitar a vantagem

intrínseca do LBM de localidade para realizar a paralelização do algoritmo. Esta foi feita visando-se aproveitar os atuais supercomputadores formados por grandes clusters de placas com múltiplos núcleos de processamento e alta velocidade de comunicação (*infiniband*). Sendo assim, as principais rotinas do algoritmo foram paralelizadas com o uso das APIs OpenMP (memória compartilhada) e MPI (memória distribuída). Onde, exploramos a paralelização híbrida (em dois níveis) de uma implementação do LBM, a qual permite um melhor aproveitamento dos recursos de clusters com processadores de mais de um núcleo (na Seção 3.6.1). Ainda, analisamos seu desempenho e escalabilidade em dois clusters (chegando a mais de 32000 núcleos de processamento) na Seção 3.6.2. Por fim, comparamos seu desempenho e acurácia com uma implementação do método de elementos finitos (FEM) na Seção 3.6.3, modelando um caso teste transiente com solução analítica.

A.2 Implementação do método acoplado LB-IB

Quando acoplamos o método de *lattice* Boltzmann ao método de fronteira imersa, estamos modificando a etapa de colisão do LBM, ao incluir um termo da força exercida pela estrutura (ver equação (4.8)). Além disso, se o acoplamento for implícito, estamos introduzindo um *loop* iterativo fluido-estrutura, conforme exposto no fluxograma da Figura 4.2. Sendo que, no caso do acoplamento explícito este *loop* não existe e a inclusão de força ocorre da forma exposta na equação (4.7). Vamos expor a seguir o pseudo-código do método acoplado LB-IB com acoplamento implícito, por ser mais completo.

A.2.1 Pseudo-código

Além da notação introduzida na seção anterior, vamos denotar a posição dos nós da estrutura imersa por X , a velocidade por U e a força exercida por F , onde são guardadas as respectivas informações nos instantes de tempo $\mathbf{t1}$ e $\mathbf{t2}$. Cada variável destas possui três índices: o primeiro indica o instante de tempo ($\mathbf{t1}$ ou $\mathbf{t2}$), o segundo indica a qual nó da estrutura se refere e o terceiro qual a

componente da variável vetorial. Introduzimos também a força exercida em cada célula de fluido com a notação g e as variáveis auxiliares $fi2$, $fv2$ e $fp2$. Abaixo apresentamos o pseudo-código de uma implementação básica do método acoplado LB-IB, no qual, como na seção anterior, manteremos somente o índice relativo ao tempo.

Pseudo-código:

```

!Leitura das malhas do fluido e da estrutura e das condições de contorno
ler_lattice_estrutura()
!Leitura das condições iniciais (podendo ser campos de velocidade e de
!pressão ou uma distribuição de partículas, além da força, para o fluido
!e posição inicial e força dos nós para a estrutura)
ler_condicoes_iniciais(fi(t1:t2),fv(t1),fp(t1),g(t1),X(t1),U(t1:t2),F(t1))
!Inicia-se o laço temporal
faça
    !Acoplamento implícito LB-IB
    faça
        U(t2) = mapeia_velocidade_nos(fi(t2))
        X(t2) = movimenta_nos(U(t2),X(t1))
        F(t2) = calcula_forca_nos_nos(X(t2))
        g(t2) = mapeia_forca_para_fluido(F(t2))
        fi2(t1) = colisao_com_forca_i(fi(t1),fi(t2),g(t1),g(t2))
        fv2(t1) = condicao_de_contorno_v(fv(t1))
        fp2(t1) = condicao_de_contorno_p(fp(t1))
        (fi(t2),fv(t2),fp(t2)) = propagacao(fi2(t1),fv2(t1),fp2(t1))
        se (condicao_de_parada2(F(t1),F(t2)) entao sair
        F(t1) = F(t2)
    fim faça
    !Condição de parada
    se (condicao_de_parada(fi(t1),fi(t2),fp(t1),fp(t2),fv(t1),fv(t2)))
        entao sair
    !Atualização das distribuições no instante de tempo t1

```

```
(fi(t1),fv(t1),fp(t1),X(t1)) = (fi(t2),fv(t2),fp(t2),X(t2))
```

```
fim faça
```

Onde as rotinas `mapeia_velocidade_nos()`, `movimenta_nos()`, `calcula_forca_nos_nos()`, `mapeia_forca_para_fluido()` e `colisao_com_forca_i()` são as rotinas (B), (C), (D), (E) e (F) apresentadas no fluxograma da Figura 4.2. A rotina `condicao_de_parada2()` representa a implementação da condição de convergência (4.10), do *loop* iterativo entre fluido e estrutura.

A variável $F(t1)$ é usada como auxiliar no cálculo da condição de parada, guardando a força da iteração anterior.

A.2.2 Otimizações

O acoplamento entre o fluido e a estrutura introduz um grande custo computacional se não for realizado de forma otimizada. Isto ocorre porque, na transmissão de informações entre o fluido e a estrutura (rotinas `mapeia_velocidade_nos()` e `mapeia_forca_para_fluido()`), temos que encontrar quais células de fluido estão associadas a cada nó da estrutura (segundo o suporte compacto da função δ_h (4.4)) e, após isto, temos que gravar e ler informações em diversas posições da memória.

A primeira otimização que fizemos foi na identificação das células de fluido que cada nó da estrutura deve acessar para ler ou gravar informações. Como a dinâmica do fluido é representada em uma malha estruturada e regular, a posição de um nó da estrutura nos informa quais serão as 16 ou 64 (2D ou 3D) células de fluido que estão no suporte compacto da função δ_h . Ou seja, nas rotinas `mapeia_velocidade_nos()` e `mapeia_forca_para_fluido()` percorremos os nós da estrutura e, para cada nó, sabemos quais as células de fluido que serão acessada para leitura e gravação de dados, respectivamente. Portanto, não é necessário realizar nenhuma busca, como ocorre quando utilizamos métodos de fronteira imersa acoplados a métodos com malhas não estruturadas.

Ainda, propomos na Seção 4.5 o uso de passo temporais distintos para o fluido e para a estrutura (acoplamento explícito), onde a troca de informações entre os modelos ocorre com uma frequência menor.

Como vimos acima, no pseudo-código básico apresentado do acoplamento implícito, temos que guardar três vezes as distribuições de partículas em cada célula de fluido ($f_i(t_1)$, $f_i(t_2)$ e $f_{i2}(t_1)$). Veja que o método implícito exige que guardemos ao menos duas vezes estas distribuições ($f_i(t_1)$ e $f_i(t_2)$), porque temos que realizar o procedimento de colisão e propagação repetidamente até atingir a condição de convergência (4.10) em cada passo temporal. Porém, a distribuição $f_{i2}(t_1)$ tem um papel auxiliar e pode deixar de ser alocada na memória ao agregarmos as etapas de colisão e propagação em uma única rotina.

Na versão explícita do acoplamento podemos reduzir ainda mais a alocação de memória, pois, como visto na Seção A.1.2, podemos usar a técnica de *swap* para armazenar somente uma vez a distribuição de partículas. Na técnica de *swap* as distribuições do instante anterior são sobrescritas pelas do instante atual.

Por fim, no caso de acoplamento implícito, podemos evitar a atualização das distribuições no instante de tempo t_1 ao alternar quando t_1 e t_2 são considerados o passo atual ou passo anterior. Assim, evitamos fazer uma cópia de todas as informações a cada passo temporal.