

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

**Modelos de Lattice-Boltzmann Aplicados à Simulação  
Computacional do escoamento de Fluidos  
Incompressíveis**

Por  
**Daniel Reis Golbert**

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2009

**MODELOS DE LATTICE-BOLTZMANN APLICADOS À  
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO ESCOAMENTO DE  
FLUIDOS INCOMPRESSÍVEIS**

**Daniel Reis Golbert**

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

Aprovada por:

---

Prof. Pablo Javier Blanco, D.Sc.

(Presidente)

---

Prof. Raúl Antonino Feijóo, D.Sc.

---

Prof. Gilson Antônio Giraldi, D.Sc.

---

Prof. Alejandro Clause, Ph.D.

---

Prof. Paulo Cesar Philippi, Ph.D.

PETRÓPOLIS, RJ - BRASIL  
ABRIL DE 2009

Golbert, Daniel Reis

G538a Modelos de lattice-boltzmann aplicados à simulação computacional do escoamento de fluidos incompressíveis / Daniel Reis Golbert. Petropolis, RJ. : Laboratório Nacional de Computação Científica, 2009.

xiv, 119 p. : il.; 29 cm

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

Dissertação (M.Sc.) – Laboratório Nacional de Computação Científica, 2009.

1. Mecânica dos fluidos. 2. Lattice-Boltzmann. 3. Fluidos incompressíveis. 4. Escoamentos transientes. 5. Hemodinâmica computacional. I. Blanco, Pablo Javier. II. LNCC/MCT. III. Título.

CDD - 532

**e.pí.gra.fe**

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

(Albert Einstein)

**Dedicatória**

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 que de alguma forma me auxiliaram no decorrer do trabalho.

Aos membros da banca, em especial ao professor Gilson Giraldi por ter colaborado ao longo do trabalho.

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

Este trabalho foi realizado com apoio financeiro da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ).

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

**MODELOS DE LATTICE-BOLTZMANN APLICADOS À  
SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO ESCOAMENTO DE  
FLUIDOS INCOMPRESSÍVEIS**

Daniel Reis Golbert

Abril , 2009

**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 mediante o método de Lattice-Boltzmann (LBM). Nesta classe de métodos as equações baseadas na cinética mesoscópica nos permitem modelar o comportamento macro-contínuo da dinâmica de fluidos. Desta forma, realiza-se um estudo teórico do LBM incluindo a análise de diferentes distribuições de equilíbrio, modelos de *lattice*, suas relações com a equação de Boltzmann assim como sua aproximação assintótica às equações de Navier-Stokes. Por outro lado, estudam-se os aspectos relacionados à imposição de condições de contorno identificando procedimentos adequados para os problemas aqui tratados. Posteriormente, realiza-se um estudo detalhado de caráter numérico sobre o desempenho do LBM na simulação computacional de escoamentos de fluidos, envolvendo problemas estacionários e transientes, para casos em 2D e 3D. A partir do conhecimento das características do modelo, desenvolvem-se técnicas para efetuar a calibração dos parâmetros do LBM visando à obtenção de resultados coerentes e confiáveis de acordo às condições físicas do problema. Estas técnicas são empregadas com ênfase em problemas 3D dependentes do tempo, e cujas características são similares às encontradas na modelagem do escoamento sanguíneo em artérias.

Abstract of Dissertation presented to LNCC/MCT as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Sciences (M.Sc.)

## LATTICE-BOLTZMANN MODELS FOR THE COMPUTATIONAL SIMULATION OF INCOMPRESSIBLE FLUID FLOWS

Daniel Reis Golbert

April, 2009

**Advisor:** Pablo Javier Blanco, D.Sc.

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

The goal of this work is to study de modeling of incompressible fluid flows through the Lattice-Boltzmann method (LBM). In this class of methods the equations based on mesoscopic kinetics allow us to model the macro-continuum behavior of the fluid dynamics. Therefore, a theoretical study of the LBM is performed including the analyses of different equilibrium distributions, *lattice* models, its relationships with the Boltzmann equation as well as its asymptotic approximation to the Navier-Stokes equations. On the other hand, aspects related to the imposition of boundary conditions are also studied, identifying adequate procedures to the problems here presented. Posteriorly, a detailed study of numerical nature about the performance of the LBM in the computational simulation of fluid flows is developed, involving stationary and transient problems, for cases in 2D and 3D. Once we have insight on the main characteristics of the model, techniques for the tuning of LBM's parameters are introduced with the purpose of attaining consistent and reliable results, according to the physical conditions of the problems under consideration. These techniques are employed with emphasis in 3D time dependent problems, whose characteristics are similar to those found in the blood flow modeling in arteries.

# Sumário

<b>1</b>	Introdução	1
1.1	<i>Lattice-Gas</i> Autômato Celular . . . . .	3
1.2	Equação de Boltzmann . . . . .	5
1.3	Método de Lattice-Boltzmann . . . . .	6
1.4	Motivação e Objetivo . . . . .	9
<b>2</b>	Teoria Geral do Método de Lattice-Boltzmann	11
2.1	Derivação a partir do <i>Lattice-Gas</i> Autômato Celular . . . . .	11
2.1.1	Introdução ao Método de LGCA . . . . .	12
2.1.2	Modelos de LGCA . . . . .	13
2.1.3	Da microescala para a mesoescala . . . . .	17
2.2	Derivação a partir da equação de Boltzmann . . . . .	18
2.2.1	Equação de Boltzmann . . . . .	18
2.2.2	Derivação da equação de Lattice-Boltzmann . . . . .	22
2.3	Método de Lattice Boltzmann . . . . .	25
2.3.1	Introdução ao Método . . . . .	25
2.3.2	Aproximação BGK . . . . .	26
2.3.3	Distribuição de equilíbrio incompressível . . . . .	30
2.4	Análise assintótica . . . . .	32
<b>3</b>	Aspectos Práticos do Método de Lattice-Boltzmann	40
3.1	Modelos discretos de Lattice-Boltzmann em 2D . . . . .	40

3.1.1	Lattices . . . . .	41
3.1.2	Condições de contorno de velocidade . . . . .	45
3.1.3	Condições de contorno de pressão . . . . .	52
3.2	Modelos discretos de Lattice-Boltzmann em 3D . . . . .	55
3.2.1	Lattices . . . . .	55
3.2.2	Condições de contorno de velocidade . . . . .	60
3.2.3	Condições de contorno de pressão . . . . .	61
3.3	Aspectos específicos da implementação numérica . . . . .	64
3.4	Informações complementares . . . . .	69
3.4.1	Pseudo-código . . . . .	69
3.4.2	Otimizações do algoritmo . . . . .	74
<b>4</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>76</b>
4.1	Simulações em 2D . . . . .	76
4.1.1	Escoamento de Poiseuille . . . . .	77
4.1.2	Cavidade quadrada . . . . .	80
4.1.3	Escoamento de Womersley . . . . .	83
4.2	Simulações em 3D . . . . .	89
4.2.1	Cavidade cúbica . . . . .	90
4.2.2	Escoamento de Womersley . . . . .	95
4.2.3	Escoamento transiente em um canal cilíndrico curvo . . . . .	104
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>112</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>115</b>

# Lista de Figuras

## Figura

2.1	Modelo de <i>lattice</i> $D2Q4$ . . . . .	14
2.2	Modelo de <i>lattice</i> $D2Q6$ . . . . .	15
2.3	Colisões de 2 e 3 partículas no <i>lattice</i> $D2Q6$ . . . . .	16
2.4	Modelo de <i>lattice</i> $D2Q9$ e seus pesos. . . . .	29
3.1	Modelo de <i>lattice</i> $D2Q7$ , com 6 velocidades não nulas. . . . .	42
3.2	Modelo de <i>lattice</i> $D2Q9$ (8 velocidades não nulas) e seus pesos. . . . .	44
3.3	Condição de contorno de velocidade do tipo periódica. . . . .	46
3.4	Condição de contorno de velocidade do tipo <i>bounce back</i> . . . . .	47
3.5	Condição de contorno de velocidade do tipo colisão na célula. . . . .	49
3.6	Condição de contorno de velocidade do tipo interpolação sobre uma linha curva. . . . .	51
3.7	Condição de contorno de pressão do tipo colisão na célula. . . . .	54
3.8	Modelo de <i>lattice</i> de $D3Q15$ , com 14 velocidades não nulas. . . . .	56
3.9	Modelo de <i>lattice</i> de $D3Q19$ , com 18 velocidades não nulas. . . . .	57
3.10	Modelo de <i>lattice</i> de $D3Q27$ , com 26 velocidades não nulas. . . . .	59
3.11	Tempo de execução de 1000 passos em uma simulação do problema da cavidade cúbica (ver Subseção 4.2.1) sobre um <i>lattice</i> tridimensional de tamanho $50 \times 50 \times 50$ . . . . .	75
4.1	Ilustração do escoamento de Poiseuille. . . . .	77
4.2	Comparações dos resultados da simulação do escoamento de Poiseuille com Reynolds 30 e <i>lattice</i> $256 \times 128$ com a solução exata. . . . .	79

4.3	Ilustração do problema da cavidade quadrada. . . . .	80
4.4	Resultados das simulações na cavidade quadrada. . . . .	82
4.5	Ilustração do escoamento de Womersley em 2D. . . . .	84
4.6	Magnitude da velocidade em 4 instantes para Womersley 3,5. . . . .	85
4.7	Componente $u_x$ ao longo de uma linha vertical para Womersley 3,5. . . . .	86
4.8	Magnitude da velocidade em 4 instantes para Womersley 9. . . . .	86
4.9	Componente $u_x$ ao longo de uma linha vertical para Womersley 9. . . . .	87
4.10	Magnitude da velocidade em 4 instantes para Womersley 15. . . . .	87
4.11	Componente $u_x$ ao longo de uma linha vertical para Womersley 15. . . . .	88
4.12	Figura ilustrativa do escoamento na cavidade cúbica. . . . .	90
4.13	Componentes $u_x$ e $u_y$ ao longo de linhas nas direções $\vec{y}$ e $\vec{x}$ . . . . .	92
4.14	Linhas de correntes e iso-superfícies da magnitude da velocidade. . . . .	94
4.15	Figura ilustrativa do escoamento de Womersley em 3D. . . . .	95
4.16	Velocidade em canais com relação de aspecto igual a: (a) $1 \times 1$ , (b) $2 \times 1$ , (c) $4 \times 1$ , (d) $8 \times 1$ e (e) $16 \times 1$ , para Womersley 3,5. . . . .	100
4.17	Linhas de corrente e iso-superfícies para Womersley 3,5. . . . .	101
4.18	Componente $u_x$ sobre uma linha transversal para Womersley 3,5. . . . .	101
4.19	Linhas de corrente e iso-superfícies para Womersley 7. . . . .	102
4.20	Componente $u_x$ sobre uma linha transversal para Womersley 7. . . . .	102
4.21	Linhas de corrente e velocidade axial para Womersley 20. . . . .	103
4.22	Componente $u_x$ sobre uma linha transversal para Womersley 20. . . . .	103
4.23	Ilustração da geometria do canal. . . . .	104
4.24	Perfis de velocidade ao longo do canal em $t/T = 0,5$ . . . . .	106
4.25	Perfis de velocidade sobre um corte longitudinal em $t/T = 0,5$ . . . . .	107
4.26	Linhas de corrente na região curva do canal em $t/T = 0,5$ . . . . .	107
4.27	Estrutura dos vórtices secundários sobre cortes transversais em $t/T = 0,5$ . . . . .	108
4.28	Perfis de velocidade sobre um corte longitudinal em dois instantes de tempo dentro do período. . . . .	111

# Lista de Tabelas

## Tabela

3.1	Sumário das informações necessárias para a implementação dos modelos de <i>lattice</i> tridimensionais apresentados. . . . .	60
3.2	Técnicas para a calibração da simulação através da mudança de parâmetros e seus custos computacionais. . . . .	68
4.1	Erros relativos na simulação do escoamento de Poiseuille. . . . .	80
4.2	Posição dos centros dos vórtices. . . . .	83
4.3	Técnicas de calibração da simulação para o escoamento de Womersley. . . . .	97
4.4	Erros relativos e de compressibilidade para Womersley 3,5. . . . .	97
4.5	Erros de compressibilidade para diferentes comprimentos de canal. . . . .	99
4.6	Proporção entre o período e o tempo de propagação das partículas sobre o <i>lattice</i> , denominada $T_r = T/(L/c_s)$ . . . . .	99

# Lista de Siglas e Abreviaturas

- 2D: duas dimensões
- 3D: três dimensões
- $c_s$ : velocidade do som
- $\vec{e}_i$ : velocidade das distribuições de partículas no LBM
- $f_i$ : distribuição de partículas do LBM
- $f_i^{\text{eq}}$ : distribuição de equilíbrio do LBM
- $L$ : comprimento característico
- LBM: Método de Lattice-Boltzmann
- LGCA: *Lattice-Gas* Autômato Celular
- $M$ : número de Mach
- $P$ : pressão normalizada
- $Re$ : número de Reynolds
- $T$ : período de oscilação
- $\vec{u}$ : velocidade do fluido
- $\Delta t$ : espaçamento entre instantes no domínio temporal
- $\Delta x$ : espaçamento do *lattice* no domínio espacial
- $\kappa$ : número de Womersley
- $\nu$ : viscosidade cinemática
- $\mu$ : frequência de oscilação
- $\rho$ : massa específica
- $\tau$ : parâmetro de relaxamento do LBM
- $\omega_i$ : pesos da distribuição de equilíbrio

# Capítulo 1

## Introdução

Neste trabalho apresentaremos o método de Lattice-Boltzmann (LBM) objetivando a simulação do escoamento de fluidos incompressíveis. Estudaremos desde a sua base teórica até a aplicação do modelo na simulação numérica de escoamentos estacionários e transientes em 2D e 3D, visando sua futura aplicação na modelagem e simulação computacional do escoamento sanguíneo nas maiores artérias do corpo humano.

Ao longo dos últimos anos, o LBM tem-se tornado uma esquema numérico promissor para simular a complexa dinâmica de fluidos nas mais diversas aplicações. Desde a sua introdução nos anos 80 ele 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) 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. (2008 (in press))), em válvulas cardíacas mecânicas (Pelliccioni et al. (2007), Krafczyk et al. (1998)), em aneurismas (Hirabayashi et al. (2006)), na aorta abdominal (Artoli et al. (2006)), entre outros.

Diferentemente dos métodos 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 obedeam às 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 discretizada, 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 (NS). Assim, pela primeira vez foram obtidas as equações corretas de NS a partir de um método LGCA, o qual ficou conhecido como modelo FHP e faz 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 FHC (d’Humières et al. (1986)).

O LBM é um método originário historicamente do método LGCA e considera

uma dinâmica molecular de partículas fictícias na qual o espaço, o tempo e as velocidades são discretos, porém os módulos das velocidades assumem valores contínuos. Neste modelo, como estamos trabalhando a um nível mesoscópico, passamos a enxergar as distribuições destas micro-partículas. Por outro lado, de acordo com Chopard et al. (2002), pode-se 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 correto. Estas duas origens do LBM serão apresentadas nas Seções 1.1 e 1.2 a seguir, e suas relações com o método serão melhor detalhadas no Capítulo 2.

### 1.1 *Lattice-Gas* Autômato Celular

Em 1986, Uriel Frisch, Brosl Hasslacher e Yves Pomeau (Frisch et al. (1986)) anunciaram uma descoberta impressionante. Eles mostraram que o movimento molecular, ou atomístico, dentro dos fluidos – algo extraordinariamente complicado envolvendo graus de liberdade da ordem de  $10^{24}$  valores reais – não precisava ter um detalhamento nem sequer próximo do encontrado na dinâmica molecular para que pudesse reproduzir a dinâmica dos fluidos de uma forma realista. Eles mostraram que um fluido poderia ser representado através de partículas fictícias, todas com a mesma massa e movendo-se com a mesma velocidade em módulo. E mais do que isso, estas velocidades ficaram restritas a um conjunto finito, que, em duas dimensões, pode ser representado por apenas seis elementos.

As partículas deste fluido simples encontram-se em um *lattice* regular, como, por exemplo, o hexagonal utilizado no modelo FHP (Frisch et al. (1986)). As leis de movimento que estas partículas seguem são de simples descrição. Primeiro, o *lattice* é inicialmente preparado de tal maneira que não haja mais de uma partícula movendo-se na mesma direção em uma determinada célula. Depois, a cada passo de tempo, as partículas deslocam-se por uma unidade de *lattice* até a célula vizinha mais próxima, na direção dada por sua velocidade. Finalmente, estas partículas

colidem com as partículas que chegarem no mesmo passo de tempo a sua célula de destino. Algumas colisões fazem com que as velocidades das partículas sejam alteradas, de acordo com as velocidades das mesmas e com a regra de colisão imposta, de tal forma que não seja modificado o número de partículas nem o vetor soma de suas velocidades. Ou seja, a colisão preserva a massa e a quantidade de movimento.

No método LGCA utiliza-se um conjunto de variáveis booleanas  $n_i(\vec{x}, t)$ ,  $i = 1, \dots, \ell$ , onde  $\ell$  é o número de direções de movimento do *lattice*, para descrever a ocupação das partículas nas células, indicando se existe ( $n_i = 1$ ) ou não existe ( $n_i = 0$ ) uma partícula na posição  $\vec{x}$ , no instante de tempo  $t$  e deslocando-se na direção de sua velocidade  $\vec{e}_i$  (direções estas definidas de acordo com o *lattice*). Assim, a equação de movimento das partículas é definida como:

$$n_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + 1) = n_i(\vec{x}, t) + \Delta_i(\vec{n}(\vec{x}, t)), \quad i = 1, \dots, \ell. \quad (1.1)$$

onde,  $\Delta = (\Delta_1, \dots, \Delta_\ell)$  é denominado operador de colisão. Este operador relaciona mais de uma partícula, o que é denotado através do vetor  $\vec{n}(\vec{x}, t)$ .

Este modelo de *Lattice-Gas* difere dos seus predecessores pois preserva a quantidade de movimento explicitamente. De fato, a conservação da quantidade de movimento juntamente com a conservação da massa nos permitem escrever equações que descrevam as colisões das micro-partículas e, por consequência, sua dinâmica. O fato interessante deste modelo é que a tomada de médias destas equações simples sobre malhas menos refinadas nos levam, assintoticamente, às equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1.2)$$

e

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{u}, \quad (1.3)$$

onde,  $\vec{u}$ ,  $p$  e  $\rho$  representam a velocidade, a pressão e a massa específica do fluido

na macroescala, respectivamente, as quais podem ser calculadas através de médias do movimento das micro-partículas. Ressaltando que surgem termos adicionais na aproximação das equações (1.2) e (1.3), os quais se tornam nulos no limite. Além disso, as derivadas temporais são consideradas em escalas muito mais lentas que o passo de tempo empregado na análise, e os gradientes espaciais são tomados em uma escala muito maior que a unidade de *lattice*. A viscosidade cinemática (denominada  $\nu$ ) depende dos detalhes da regra de colisão.

Por ser um método que trabalha somente com valores discretos, o LGCA pode apresentar ruídos e outros efeitos indesejados na simulação de fluidos. Defeitos estes que o LBM se propõe a superar com a introdução de quantidades que podem assumir valores reais. Estudaremos este método com mais detalhes na Seção 2.1.

## 1.2 Equação de Boltzmann

Embora o LBM tenha sido historicamente derivado dos métodos de *Lattice-Gas*, dois grupos independentes (He e Luo (1997b) e Abe (1997)) mostraram que a equação de Lattice-Boltzmann, que descreve a dinâmica do LBM, pode ser obtida a partir da equação contínua de Boltzmann através de uma expansão que assume que o número de Mach é pequeno. Esta derivação pode ser acompanhada com maiores detalhes na Seção 2.2. Além disso, encontram-se na literatura derivações para casos que consideram escoamentos compressíveis e problemas térmicos (Shan e He (1998), Philippi et al. (2006) e Shan et al. (2006)), assuntos que não serão tratados neste trabalho. Nesta seção introdutória, apresentaremos a equação de Boltzmann e a equação de Lattice-Boltzmann para que o leitor tome familiaridade com as mesmas e com a notação nelas utilizada.

A equação de Boltzmann sem a presença de forças de corpo resulta em:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla g = Q(g, g), \quad (1.4)$$

onde,  $g = g(\vec{x}, \vec{v}, t)$  é a função de distribuição das partículas no espaço de fase contínuo  $(\vec{x}, \vec{v})$ ,  $\vec{x}$  é a posição espacial,  $\vec{v}$  representa a velocidade das micro-

partículas e  $Q(g, g)$  é um termo integral de colisão. Este último termo é não linear e torna a equação implícita, porém ele será linearizado e tornado explícito quando introduzirmos a aproximação denominada BGK (Bhatnagar et al. (1954)) na Seção 2.2.

A equação de Lattice-Boltzmann é descrita por:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(\vec{f}(\vec{x}, t)), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (1.5)$$

onde,  $f_i$  é a função de distribuição das partículas (valores reais) e  $\Omega_i(\vec{f}(\vec{x}, t))$  é denominado termo de colisão (o qual relaciona mais de uma distribuição, o que é denotado simplesmente por  $\vec{f}(\vec{x}, t)$ ), ambos na direção da velocidade  $\vec{e}_i$ ,  $\Delta x$  é o espaçamento do *lattice*,  $\Delta t$  é o passo no tempo e  $\ell$  é o número de direções de movimento do *lattice*.

Podemos verificar semelhanças entre as duas equações acima, do lado direito da igualdade temos um operador de colisão que é dependente das funções de distribuição, e no lado esquerdo da igualdade da equação de Lattice-Boltzmann encontramos termos resultantes da aproximação das derivadas espacial e temporal por diferenças finitas consideradas em forma Lagrangiana.

A dedução da equação de Lattice-Boltzmann a partir da equação de Boltzmann pode ser acompanhada com detalhes na Seção 2.2.

### 1.3 Método de Lattice-Boltzmann

O método de Lattice-Boltzmann (LBM) é um método numérico baseado em equações cinéticas formuladas em uma escala mesoscópica que simula a dinâmica de fluidos em uma escala macroscópica (Chen e Doolen (1998)). Logo, ele está localizado na interface entre os mundos microscópico (molecular) e macroscópico (contínuo), tentando capturar o melhor dos dois. A dinâmica deste método é governada pela equação de Lattice-Boltzmann (1.5), a qual descreve o movimento da distribuição de micro-partículas. Nesta equação podemos ver que o LBM é um método Lagrangiano e que nele substituímos as variáveis booleanas de ocupação

de partículas  $n_i$ , presentes na equação (1.1) do LGCA, pelas funções reais de distribuição de partículas  $f_i = \langle n_i \rangle$ , onde  $\langle \cdot \rangle$  denota uma média por amostra, negligenciando o movimento de partículas individuais. Este procedimento elimina o ruído estatístico presente no LGCA, pois assumimos que estas médias são tomadas de tal forma que os valores de  $f_i$  variam suavemente tanto no espaço quanto no tempo. No LBM as variáveis primitivas são as distribuições de partículas, que são consideradas variáveis mesoscópicas. Devido ao fato da forma cinética continuar a mesma do LGCA, as vantagens da localidade são mantidas, levando à fácil paralelização do código.

Uma importante simplificação do LBM foi feita por Higuera e Jiménez (1989) que linearizou o operador de colisão, 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 por vários autores (Qian (1990), 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 NS assintoticamente (Qian et al. (1992), Chen et al. (1992)), como será demonstrado na Seção 2.4. Ao desenvolver uma versão simplificada da equação cinética, evita-se ter que resolver equações cinéticas complexas como a equação de Boltzmann na sua forma mais completa e, além disso, não é necessário seguir cada partícula como em simulações de dinâmica molecular (Chen e Doolen (1998)).

A equação de Lattice-Boltzmann é uma cobertura hiperbólica mínima das equações de NS, onde mínima significa: “o mínimo de informações do espaço de velocidades” exigido para recuperarmos as simetrias de espaço-tempo contínuas corretas (invariância Galileana, translacional e rotacional) (Succi (1997)).

Na linguagem da dinâmica de fluidos computacional (CFD) poderíamos

classificar a equação de Lattice-Boltzmann como um esquema de diferenças finitas totalmente explícito, de segunda ordem no espaço e primeira ordem no tempo. E dentro dos esquemas desta classe vistos em CFD podemos destacar a equação de Lattice-Boltzmann por: ser conservativa pontualmente, ter liberdade de difusão-dispersão e possuir hiperbolicidade finita. Destacam-se ainda como pontos positivos: a paralelização direta do algoritmo, a fácil adaptação a geometrias grossamente irregulares (e.g., meios porosos), a fácil implementação e a descrição física clara. Como pontos negativos sobressaem-se os seguintes: necessidade de uma malha uniforme 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 máquinas com processamento em paralelo, o uso de um código com características intrínsecas de paralelismo é algo bastante vantajoso.

Na comparação do LBM com os outros métodos numéricos utilizados na simulação de escoamentos de fluidos, ainda é possível fazer as seguintes observações (Chen e Doolen (1998)):

1) O operador de convecção (ou processo de propagação) do LBM no espaço de fase (ou espaço de dimensão finita das velocidades) é linear. Esta característica é proveniente da teoria cinética e contrasta com os termos de convecção não lineares em outras abordagens que usam representação macroscópica. A convecção simples combinada com o processo de relaxamento (ou operador de colisão) permite a recuperação da advecção macroscópica não linear através de expansões multi-escala.

2) As equações de NS incompressíveis podem ser obtidas no limite quase incompressível pelo LBM. A pressão no LBM é calculada usando uma equação de estado. Em contraste, em uma simulação numérica direta das equações de NS incompressíveis, a pressão satisfaz uma equação de Poisson com termos dependentes da velocidade agindo como fontes. Resolver esta equação para a pressão muitas vezes produz dificuldades numéricas, requerendo tratamento

especial como, por exemplo, iteração ou relaxamento.

3) O LBM utiliza um conjunto mínimo de velocidades no espaço de fase. Na teoria cinética tradicional com distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann, o espaço de fase é um espaço funcional completo (de dimensão infinita). O processo de tomar média envolve informação de todo o espaço de fase da velocidade. Devido ao fato do LBM utilizar usualmente um ou dois módulos de velocidade e poucas direções de movimento, a transformação que relaciona a função de distribuição mesoscópica e as quantidades macroscópicas é bastante simplificada e consiste em cálculos aritméticos simples.

#### **1.4 Motivação e Objetivo**

A principal motivação deste trabalho é estudar o método de Lattice-Boltzmann, com todas suas vantagens destacadas na seção anterior, a fim de empregá-lo na modelagem e simulação computacional de escoamentos internos de fluidos incompressíveis. O objetivo geral a partir do estudo realizado neste trabalho é o emprego destas técnicas em aplicações advindas da hemodinâmica computacional, visando a modelagem do escoamento sanguíneo em distritos arteriais do corpo humano. 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, é feita a exposição de exemplos numéricos para a análise de escoamentos estacionários e transientes que demonstram o desempenho do método e suas potencialidades.

Para cumprir tais objetivos, este trabalho foi dividido da seguinte forma. No Capítulo 2 encontramos o desenvolvimento teórico do LBM, incluindo um estudo de seu antecessor, o modelo LGCA, a derivação da equação de Lattice-Boltzmann a partir da equação contínua de Boltzmann, além de um detalhamento do procedimento que nos permite aproximar as equações de NS incompressíveis. No Capítulo 3, em primeira instância, é feita uma revisão na literatura sobre técnicas de representação das condições de contorno e sobre diferentes estruturas de *lattice* em 2D e 3D. Posteriormente, realiza-se uma análise detalhada sobre o processo de calibração dos parâmetros numéricos do modelo para que a simulação represente adequadamente as condições de um dado problema. E, finalmente, no Capítulo 4 apresentamos uma série de resultados numéricos obtidos a partir da simulação de escoamentos incompressíveis, com ênfase em problemas dependentes do tempo e de características similares, em relação aos parâmetros físicos e geométricos que definem o problema, às encontradas na modelagem do escoamento sanguíneo em artérias. Com isto, procura-se verificar as implementações computacionais feitas, assim como, analisar a acurácia na representação dos fenômenos como função dos erros inerentes do modelo.

# Capítulo 2

## Teoria Geral do Método de Lattice-Boltzmann

O método de Lattice Boltzmann (LBM) é baseado na dinâmica de micro-partículas que, por operar em uma escala mesoscópica, considera as distribuições das micro-partículas (usando valores contínuos). Isto contrasta-se com seu antecessor, o modelo de *Lattice-Gas* Autômato Celular (LGCA), que trabalha diretamente com as micro-partículas (usando valores discretos).

Este capítulo contém os aspectos mais importantes da base teórica na qual está fundamentado o LBM. Começaremos apresentando o seu antecessor, o modelo totalmente discreto denominado LGCA, e suas relações com o LBM. Em seguida, apresentaremos a equação de Boltzmann e trilharemos o caminho que nos leva à equação de Lattice-Boltzmann a partir desta. Na sequência exploraremos o método de Lattice-Boltzmann de forma detalhada, destacando a distribuição de equilíbrio incompressível selecionada para os estudos desenvolvidos neste trabalho. E, na parte final do capítulo, analisaremos como é possível realizar uma aproximação das equações de Navier-Stokes via uma expansão assintótica aplicada à equação de Lattice-Boltzmann.

### 2.1 Derivação a partir do *Lattice-Gas* Autômato Celular

O método de *Lattice-Gas* Autômato Celular (LGCA) é baseado no deslocamento e colisão de micro-partículas com algumas direções de movimento

definidas por um *lattice* (ou malha) subjacente. Nesta seção vamos introduzir as equações que definem as conservações de massa e quantidade de movimento, assim como a equação que descreve o movimento das partículas discretas. Também falaremos sobre como construir um *lattice* sem direções preferenciais de movimento (em função de relações de simetria a serem satisfeitas) e citaremos alguns dos modelos de *lattice* mais utilizados. Ao final da seção faremos uma breve associação deste método com o método de Lattice-Boltzmann.

### 2.1.1 Introdução ao Método de LGCA

A dinâmica das micro-partículas no modelo de LGCA ocorre sobre um *lattice* regular de forma totalmente discreta. Ou seja, o tempo, o espaço e as partículas são discretos e caracterizados pelo *lattice* antes mencionado. Assim sendo, o domínio de análise é um conjunto de células adjacentes entre as quais acontecerá o deslocamento das micro-partículas. Esta dinâmica é descrita pela equação de movimento:

$$n_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + 1) = n_i(\vec{x}, t) + \Delta_i[\vec{n}(\vec{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell \quad (2.1)$$

onde,  $t$  é um valor inteiro, as quantidades  $n_i(\vec{x}, t)$  são variáveis Booleanas que indicam a presença ( $n_i = 1$ ) ou ausência ( $n_i = 0$ ) de partículas movendo-se da célula na posição  $\vec{x}$  para a célula vizinha  $\vec{x} + \vec{e}_i$  no passo de tempo indicado por  $t$ . A função  $\Delta_i$ , denominada operador de colisão, descreve as mudanças em  $n_i$  provocadas pela colisão, e assume os valores  $\pm 1$  e  $0$ .

Impõe-se ao operador de colisão as condições de conservação de massa (momento de ordem 0):

$$\sum_i \Delta_i(\vec{n}) = 0 \quad (2.2)$$

e conservação de quantidade de movimento (momento de ordem 1):

$$\sum_i \vec{e}_i \Delta_i(\vec{n}) = 0. \quad (2.3)$$

Somando a equação de movimento (2.1) em  $i$  e usando a equação de conservação de massa (2.2) imposta para  $\Delta_i(\vec{n})$  obtemos a equação de balanço da massa:

$$\sum_i n_i(\vec{x} + \vec{c}_i, t + 1) = \sum_i n_i(\vec{x}, t) \quad (2.4)$$

e somando a equação de movimento (2.1) multiplicada por  $\vec{e}_i$  em  $i$  e usando a equação de conservação de quantidade de movimento (2.3) imposta para  $\Delta_i(\vec{n})$  obtemos a equação de balanço da quantidade de movimento para cada célula na micro-escala:

$$\sum_i \vec{e}_i n_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + 1) = \sum_i \vec{e}_i n_i(\vec{x}, t). \quad (2.5)$$

Desta forma, temos a garantia de conservação de massa e de quantidade de movimento pontualmente (por célula) em todo *lattice*.

### 2.1.2 Modelos de LGCA

Como foi mencionado na introdução, o LGCA, apesar de sua simplicidade, tem a capacidade de representar as equações de Navier-Stokes (NS) (Chopard et al. (2002)). Um dos requisitos para que isto seja possível é a não existência de direções preferenciais de movimento das partículas. Este requisito é atingido se o modelo de *lattice* escolhido respeitar as seguintes simetrias (Frisch et al. (1986)):

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\ell} \vec{e}_i &= 0 \\ \sum_{i=1}^{\ell} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= a\mathbf{I}^{(2)} \\ \sum_{i=1}^{\ell} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= 0 \\ \sum_{i=1}^{\ell} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= b\mathbf{\Lambda}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde,  $a$  e  $b$  são constantes dependentes do *lattice*,  $\otimes$  denota o produto tensorial,  $\mathbf{I}^{(2)}$  é tensor identidade de segunda ordem e definimos o tensor de quarta de ordem

$$[\mathbf{\Lambda}]_{\alpha\beta\gamma\zeta} = (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\zeta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta}\delta_{\beta\gamma}), \quad (2.7)$$

onde,  $\delta$  é o delta de Kronecker. Estas simetrias são necessárias para a preservação de tensores de até quarta ordem na derivação das equações de NS, como pode ser visto em Chopard et al. (2002).

Um dos primeiros modelos de LGCA propostos, denominado HPP em homenagem ao trabalho de Hardy et al. (1976), foi criado anteriormente à descoberta destas simetrias. Portanto, este modelo baseado em um *lattice* quadrado, com quatro possibilidades de movimento (ver Figura 2.1), não pode recuperar corretamente as equações de NS.

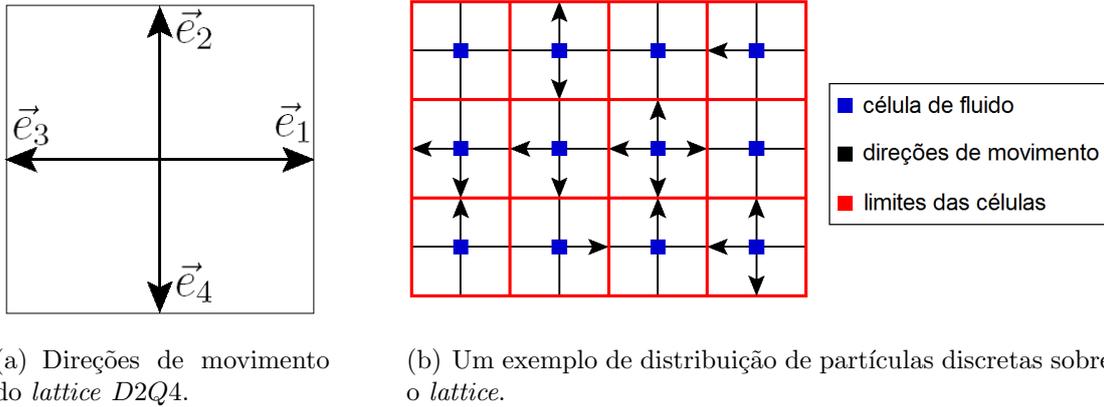


Figura 2.1: Modelo de *lattice* D2Q4.

Somente dez anos depois foram descobertas estas simetrias e, com elas, foi proposto o modelo FHP (Frisch et al. (1986)) que respeita as mesmas. Este, portanto, foi o primeiro modelo de LGCA a recuperar corretamente as equações de NS, além de ser também o modelo mais simples possível em duas dimensões que as recupera.

Este modelo baseia-se em um modelo de *lattice* hexagonal (ver Figura 2.2),

com direções de movimento descritas por:

$$\vec{e}_i = \left( \cos \left[ \frac{\pi}{3}(i-1) \right], \sin \left[ \frac{\pi}{3}(i-1) \right] \right), \quad i = 1, \dots, 6. \quad (2.8)$$

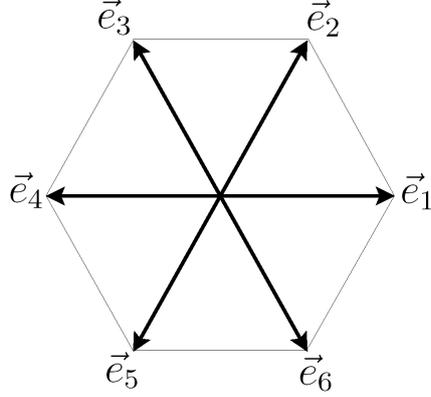


Figura 2.2: Modelo de *lattice*  $D2Q6$ .

O operador de colisão do modelo FHP considera colisões de 2 e de 3 partículas, as quais são descritas algebricamente através das variáveis Booleanas  $n_i$ , que indicam a presença ( $n_i = 1$ ) ou ausência ( $n_i = 0$ ) de partículas se deslocando na direção  $\vec{e}_i$ . Desta maneira, para que haja conservação de massa e de quantidade de movimento (ver Eqs. (2.2) e (2.3)) as colisões de três partículas possíveis são descritas por:

$$\Delta_i^{(3)} = n_{i+1}n_{i+3}n_{i+5}\bar{n}_i\bar{n}_{i+2}\bar{n}_{i+4} - n_in_{i+2}n_{i+4}\bar{n}_{i+1}\bar{n}_{i+3}\bar{n}_{i+5}, \quad i = 1, \dots, 6 \quad (2.9)$$

e as colisões de 2 partículas são descritas por:

$$\begin{aligned} \Delta_i^{(2)} = & an_{i+1}n_{i+4}\bar{n}_i\bar{n}_{i+2}\bar{n}_{i+3}\bar{n}_{i+5} + \bar{a}n_{i+2}n_{i+5}\bar{n}_i\bar{n}_{i+1}\bar{n}_{i+3}\bar{n}_{i+4} \\ & - n_in_{i+3}\bar{n}_{i+1}\bar{n}_{i+2}\bar{n}_{i+4}\bar{n}_{i+5}, \quad i = 1, \dots, 6, \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde, definimos a notação  $\bar{n}_i = 1 - n_i$  e a variável Booleana  $a(x, t)$  determina se a colisão ocorrerá no sentido horário ( $a = 1$ ) ou anti-horário ( $a = 0$ ) (ver Rothman

e Zaleski (2004)). Além disso, consideramos que o subíndice de  $i$  varia de 1 a 6 de forma cíclica. Para maior clareza apresentamos estas colisões na forma gráfica através da Figura 2.3, onde as linhas cheias indicam a presença de partículas nas direções indicadas. Para um modelo como o FHP que considera ambas as colisões, podemos definir o operador de colisão como:

$$\Delta_i^{(2,3)} = \Delta_i^{(2)} + \Delta_i^{(3)}. \quad (2.11)$$

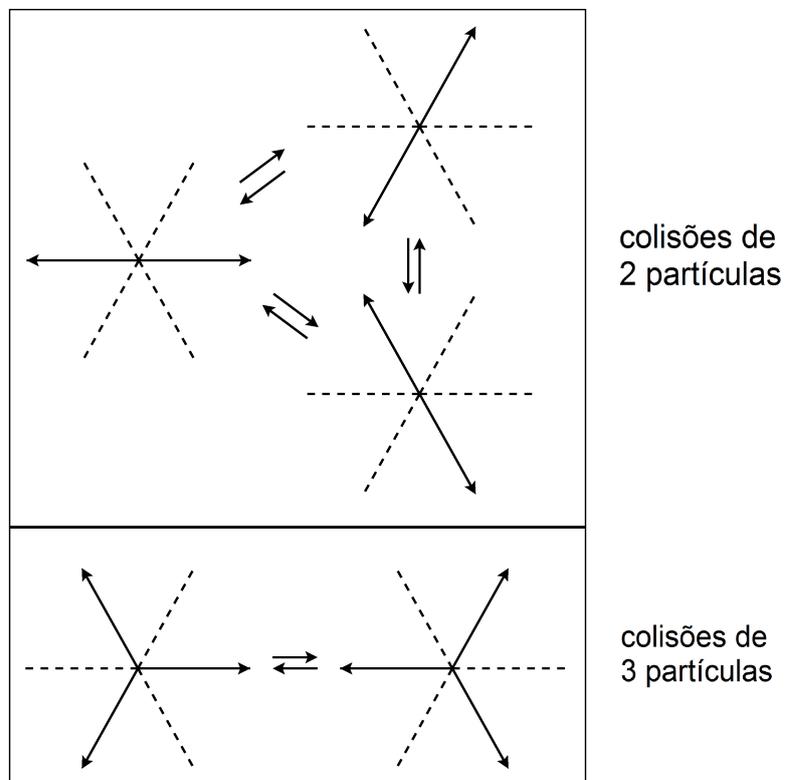


Figura 2.3: Colisões de 2 e 3 partículas no *lattice* D2Q6.

Podem-se ampliar as possibilidades de colisões incluindo-se a colisão de 4 partículas ou colisões com partículas paradas (ver Rothman e Zaleski (2004)).

### 2.1.3 Da microescala para a mesoescala

Para migrarmos da microescala, onde consideramos valores discretos (micro-partículas), para a mesoescala, onde se insere o método de Lattice-Boltzmann, com valores reais (distribuições de partículas) devemos olhar para a dinâmica das micro-partículas em uma escala na qual não vejamos mais seus movimentos individuais. Para ser mais preciso, na mesoescala trabalharemos com médias tomadas sobre regiões do *lattice*, de forma que estas médias tomadas variem suavemente tanto no espaço quanto no tempo. Assim, definimos  $N_i = \langle n_i \rangle$  como valores médios calculados por amostra (*ensemble*) da distribuição de micro-partículas descrita pelas variáveis Booleanas  $n_i$ .

Se aplicarmos este cálculo das médias sobre a equação de movimento do LGCA (Eq. (2.1)) chegaremos à equação:

$$N_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) = N_i(\vec{x}, t) + \langle \Delta_i(\vec{n}) \rangle, \quad (2.12)$$

onde,  $\Delta x$  representa o novo espaçamento e  $\Delta t$  o novo passo no tempo considerados na mesoescala. Como podemos ver, o termo de colisão tornou-se mais complexo, pois é necessário tomar a média de uma série de produtos, como os apresentados nas equações (2.9) e (2.10). Porém, ao considerarmos que o movimento das partículas não é correlacionado antes da etapa de colisão (princípio do caos molecular), podemos simplificar o termo de colisão ao substituir este cálculo de média das colisões por um operador de colisão que seja aplicado diretamente ao cálculo de média da distribuição de micro-partículas. Assim, podemos reescrever a contrapartida da equação (2.1) na mesoescala como:

$$N_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) - N_i(\vec{x}, t) = \Delta_i(\vec{N}). \quad (2.13)$$

Logo, chegamos a uma equação similar à equação de Lattice-Boltzmann na

mesoescala, definida como:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(\vec{f}), \quad (2.14)$$

onde,  $f_i$  são denominadas as distribuições de partículas (assumindo valores reais) e  $\Omega_i$  é denominado o operador de colisão.

Na Seção 2.2 derivaremos a equação de Lattice-Boltzmann com a aproximação denominada BGK a partir da própria equação de Boltzmann, onde simplificaremos o operador de colisão através de uma linearização do mesmo em torno de uma distribuição de equilíbrio. E na Seção 2.3 mostraremos como o LBM funciona independentemente de detalhes das interações das micro-partículas subjacentes às distribuições consideradas.

## 2.2 Derivação a partir da equação de Boltzmann

Na primeira parte desta seção introduziremos a equação de Boltzmann contínua e suas principais características. Para, em seguida, realizarmos a derivação que nos leva à equação de Lattice-Boltzmann. Esta transição é feita através da apresentação de uma versão simplificada da equação de Boltzmann, denominada versão BGK, e de sua conseqüente discretização e aproximações realizadas nas ordens indicadas.

### 2.2.1 Equação de Boltzmann

A equação de Boltzmann baseia-se nas seguintes premissas:

- 1) Somente colisões de duas partículas são consideradas;
- 2) As velocidades de duas partículas não são correlacionadas antes da colisão (hipótese do caos molecular);
- 3) Forças externas não influenciam a dinâmica da colisão local.

A equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial para a

distribuição de partículas simples, denotada por  $g(\vec{x}, \vec{v}, t)$ , a qual é descrita por:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla g + \frac{\vec{K}}{m} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{v}} = Q(g, g), \quad (2.15)$$

onde,  $g = g(\vec{x}, \vec{v}, t)$  é a função de distribuição das partículas no espaço de fase contínuo  $(\vec{x}, \vec{v})$ ,  $\vec{x}$  indica a posição espacial,  $\vec{v}$  representa a velocidade das micro-partículas,  $m$  representa a massa,  $\vec{K}$  indica uma força de corpo (a qual será desprezada nesta discussão) e  $Q(g, g)$  é um termo integral de colisão sobre o domínio espaço-velocidade, descrito por:

$$Q(g, g) = \int \int \sigma(\Omega) |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| [g(\vec{v}_1')g(\vec{v}_2') - g(\vec{v}_1)g(\vec{v}_2)] d\Omega d\vec{v}_2 \quad (2.16)$$

onde,  $\sigma(\Omega)$  é a seção transversal do espalhamento diferencial para a colisão de duas partículas, a qual descreve a probabilidade da mudança das velocidades  $\vec{v}_1$  e  $\vec{v}_2$  para as velocidades  $\vec{v}_1'$  e  $\vec{v}_2'$ , respectivamente, e  $\Omega$  denota a orientação relativa dos vetores  $(\vec{v}_2' - \vec{v}_1')$  e  $(\vec{v}_2 - \vec{v}_1)$ .

Pode ser demonstrado (ver Cercignani (1988)) que a integral de colisão possui exatamente cinco invariantes colisionais elementares, denominados  $\psi_k(\vec{v})$  ( $k = 0, 1, 2, 3, 4$ ), ou seja:

$$\int Q(g, g) \psi_k(\vec{v}) d\vec{v} = 0, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (2.17)$$

Os invariantes colisionais elementares são da forma

$$\psi_0 = 1, \quad \psi_{1-3} = \vec{v} \quad \text{e} \quad \psi_4 = \vec{v} \cdot \vec{v}, \quad (2.18)$$

ou seja, são proporcionais à massa, à quantidade de movimento e à energia cinética, respectivamente. Portanto, um invariante colisional geral  $\psi(\vec{v})$  pode ser escrito como combinação linear dos elementares  $\psi_k(\vec{v})$ , da forma:

$$\psi(\vec{v}) = a + \vec{b} \cdot \vec{v} + c\vec{v} \cdot \vec{v}. \quad (2.19)$$

Além disso, também existem funções positivas  $g$  que anulam o termo de colisão integral (ver Cercignani (1988)), ou seja,

$$\int Q(g, g) d\vec{v} = 0. \quad (2.20)$$

Todas estas funções são da forma:

$$g(\vec{x}, \vec{v}, t) = \exp \left[ a + \vec{b} \cdot \vec{v} + c\vec{v} \cdot \vec{v} \right], \quad (2.21)$$

onde,  $c$  deve ser negativo (Wolf-Gladrow (2000)). A distribuição de Maxwell-Boltzmann:

$$g^M = g(\vec{x}, \vec{v}, t) = \frac{\rho}{(2\pi/3)^{D/2}} \exp \left[ -\frac{3}{2} (\vec{v} - \vec{u}) \cdot (\vec{v} - \vec{u}) \right] \quad (2.22)$$

é um caso especial dentre estas soluções, onde  $D$  é a dimensão do espaço,  $\rho$  e  $\vec{u}$  representam os valores macroscópicos da massa específica e da velocidade do fluido, respectivamente. Estas variáveis macroscópicas do fluido são calculadas através dos momentos da distribuição  $g$ , conforme:

$$\rho = \int g d\vec{v} \quad \text{e} \quad \rho\vec{u} = \int \vec{v}g d\vec{v}. \quad (2.23)$$

Antes de simplificarmos o termo integral de colisão, apresentemos o resultado mais importante relacionado à equação de Boltzmann vista acima, que é o denominado teorema-H de Boltzmann, de 1872.

### **Teorema 1** Teorema-H de Boltzmann

Dada a quantidade

$$H(t) = \int \int g(\vec{x}, \vec{v}, t) \ln[g(\vec{x}, \vec{v}, t)] d\vec{x} d\vec{v}, \quad (2.24)$$

onde  $g$  é qualquer função que satisfaça a equação de Boltzmann (2.15), a mesma

satisfaz a seguinte desigualdade:

$$\frac{dH}{dt} \leq 0 \quad (2.25)$$

e o sinal de igual se aplica caso  $g$  seja uma distribuição de Maxwell-Boltzmann (ver expressão (2.22)).

Este teorema demonstra a tendência da solução  $g$  para uma distribuição Maxwelliana. Sua demonstração não será feita neste trabalho, porém esta pode ser acompanhada no livro de Wolf-Gladrow (2000).

Uma das principais dificuldades que se enfrenta ao lidar com a equação de Boltzmann é a complicada natureza do operador de colisão integral. Por isso várias alternativas para sua substituição por operadores mais simples foram propostas. Segundo Cercignani (1990), a idéia por trás desta substituição é que a grande quantidade de detalhes da interação de dois corpos tem pouca chance de influenciar significativamente os valores de várias quantidades medidas experimentalmente.

Assim sendo, um operador de colisão mais simples (denominado  $J(g)$ ) que substitua o operador integral  $Q(g, g)$  deve respeitar as seguintes duas restrições:

1)  $J(g)$  deve preservar os invariantes colisionais  $\psi_k$  do operador  $Q(g, g)$ , ou seja,

$$\int \psi_k J(g) d\vec{v} = 0, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4; \quad (2.26)$$

2) o termo de colisão deve expressar a tendência para uma distribuição Maxwelliana (Teorema-H).

O exemplo mais famoso de um operador simplificado que satisfaz estas duas restrições é o modelo BGK (Bhatnagar et al. (1954)). Ele se baseia na idéia simples de que cada colisão modifica a distribuição  $g(\vec{x}, \vec{v}, t)$  em um valor proporcional à distância desta para uma distribuição Maxwelliana denominada  $g^M(\vec{x}, \vec{v}, t)$ , ou seja,

$$J(g) = \varpi [g^M(\vec{x}, \vec{v}, t) - g(\vec{x}, \vec{v}, t)], \quad (2.27)$$

onde, o coeficiente  $\varpi$  é chamado frequência de colisão. Desta forma, conseguimos satisfazer a segunda restrição (Teorema-H), pois o operador  $J(g)$

expressa claramente a tendência para uma distribuição Maxwelliana, denominada  $g^M(\vec{x}, \vec{v}, t)$ .

Para satisfazer a primeira restrição,  $J(g)$  deve preservar os invariantes colisionais, ou seja,

$$\int \psi_k J(g) d\vec{v} = \varpi \left[ \int \psi_k g^M(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{v} - \int \psi_k g(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{v} \right] = 0, \quad k = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (2.28)$$

Em outras palavras, se olharmos para as equações (2.18) e (2.23), veremos que a equação (2.28) é equivalente a dizer que a distribuição Maxwelliana  $g^M(\vec{x}, \vec{v}, t)$  deve fornecer exatamente a mesma massa específica e a mesma velocidade do fluido que a distribuição  $g(\vec{x}, \vec{v}, t)$ . Além disso, pode-se demonstrar que as temperaturas também são as mesmas, quando comparados os termos associados às energias cinéticas (Wolf-Gladrow (2000)). Como estes valores variam no tempo e no espaço,  $g^M(\vec{x}, \vec{v}, t)$  é considerada uma distribuição Maxwelliana local.

Substituindo o operador de colisão integral da equação de Boltzmann (2.15) por um operador de colisão da forma da equação (2.27), e desconsiderando a presença de forças de corpo, chegamos à seguinte forma da equação de Boltzmann com aproximação denominada BGK:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla g = \varpi (g^M - g), \quad (2.29)$$

onde,  $g^M$  é a função de distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann (2.22).

### 2.2.2 Derivação da equação de Lattice-Boltzmann

Assumindo que a velocidade do fluido é pequena em relação à velocidade do som (equivalente a dizer que o número de Mach  $M = |\vec{u}|/c_s$  é pequeno) na equação que descreve a distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann (2.22), podemos

aproximar a mesma até a ordem de  $\mathcal{O}(|\vec{u}|^2)$  da seguinte forma (Koelman (1991)):

$$g^{\text{eq}} = \frac{\rho}{(2\pi/3)^{D/2}} \exp \left[ -\frac{3}{2}(\vec{v} \cdot \vec{v}) \right] \left[ 1 + 3(\vec{v} \cdot \vec{u}) + \frac{9}{2}(\vec{v} \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2}(\vec{u} \cdot \vec{u}) \right]. \quad (2.30)$$

Este cálculo trata-se da substituição da distribuição de Maxwell-Boltzmann por uma aproximação polinomial e verifica-se que a ordem desta aproximação está diretamente relacionada com a dimensão do *lattice* (Philippi et al. (2006)).

O próximo passo consiste em discretizar o espaço de velocidade, passando de dimensão infinita a um espaço de dimensão finita cujos elementos serão denominados  $\vec{e}_i$ , para  $i = 1, \dots, \ell$ . O mesmo comentário é válido para as respectivas distribuições de partículas que se encaminham nas direções indicadas por  $\vec{e}_i$ , que serão denominadas  $g_i(\vec{x}, t) = g(\vec{x}, \vec{e}_i, t)$ . Através desta aproximação do espaço de velocidade, a evolução cinética da equação (2.29) somente requerirá a solução de um número finito de distribuições, isto é,  $g_i$ ,  $i = 1, \dots, \ell$ , sendo  $\ell$  a dimensão de tal espaço. Assim, as variáveis macroscópicas apresentadas na equação (2.23) podem ser aproximadas usando as velocidades discretas em uma quadratura (por exemplo, do tipo Gaussiana ou do tipo abscissas definidas) para expressar as integrais:

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} W_i g_i(\vec{x}, t) \quad \text{e} \quad \rho \vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} W_i \vec{e}_i g_i(\vec{x}, t). \quad (2.31)$$

Desta forma, definimos uma função de distribuição efetiva no espaço de velocidade discreto, como segue:

$$f_i(\vec{x}, t) = W_i g_i(\vec{x}, t), \quad (2.32)$$

a qual satisfaz as relações de conservação:

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} f_i(\vec{x}, t) \quad \text{e} \quad \rho \vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} \vec{e}_i f_i(\vec{x}, t) \quad (2.33)$$

Visto que  $\vec{e}_i$  e  $W_i$  são constantes, a função  $f_i$  satisfaz a mesma equação que

$g$  (ver Eqs. (2.29) e (2.31)):

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{e}_i \cdot \nabla f_i = \varpi (f_i^{\text{eq}} - f_i), \quad i = 1, \dots, \ell \quad (2.34)$$

com

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[ 1 + 3(\vec{e}_i \cdot \vec{u}) + \frac{9}{2}(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2}(\vec{u} \cdot \vec{u}) \right], \quad (2.35)$$

onde,

$$\omega_i = W_i (2\pi/3)^{D/2} \exp \left[ -\frac{3}{2}(\vec{e}_i \cdot \vec{e}_i) \right]. \quad (2.36)$$

Para obter os pesos  $\omega_i$ , He e Luo (1997b) usam uma fórmula de Hermite de terceira ordem para aproximar as integrais da equação (2.23). Diferentemente, Abe (1997) assume que  $\omega_i$  tem uma forma funcional truncada simples baseada em  $\vec{e}_i$ . Ambos encontraram os mesmos valores de  $\omega_i$ :

$$\omega_0 = \frac{4}{9}, \quad \omega_{1-4} = \frac{1}{9}, \quad \omega_{5-8} = \frac{1}{36}, \quad (2.37)$$

no caso particular do *lattice* quadrado de nove velocidades denominado *D2Q9* (ver Subseção 3.1.1 no capítulo seguinte).

O passo final para chegarmos na equação de Lattice-Boltzmann é a discretização espacial e temporal, isto é, variáveis  $\vec{x}$  e  $t$ , respectivamente. Para tanto, na equação (2.34) substituímos o termo com derivada temporal e o termo convectivo  $\vec{e}_i \cdot \nabla f_i$  por esquemas de diferenças finitas de primeira ordem e no termo de colisão deslocamos a variável espacial  $\vec{x}$  pela quantidade  $(-\vec{e}_i)$  (Cao et al. (1997)). Assim, obtemos a equação de diferenças finitas para  $f_i$ :

$$f_i(\vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \alpha [f_i(\vec{x}, t) - f_i(\vec{x} - \vec{e}_i \Delta x, t)] - \frac{\beta}{\tau} [f_i(\vec{x} - \vec{e}_i \Delta x, t) - f_i^{\text{eq}}(\vec{x} - \vec{e}_i \Delta x, t)], \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.38)$$

onde,  $\alpha = \Delta t |\vec{e}_i| / \Delta x$  e  $\beta = \Delta t \tau \varpi$ ,  $\Delta t$  e  $\Delta x$  são o passo no tempo e o espaçamento do *lattice*, respectivamente. Escolhendo  $\alpha = 1$  e  $\beta = 1$ , a equação (2.38) se torna

a equação de Lattice-Boltzmann com aproximação BGK:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.39)$$

onde,  $f_i^{\text{eq}}$  é descrita pela equação (2.35). Note-se que esta equação é explícita na variável temporal, e a discretização realizada corresponde-se com uma abordagem completamente Lagrangiana da derivada material que aparece no lado esquerdo da equação (2.34) (definida sobre todas as direções de movimento  $\vec{e}_i$ ).

## 2.3 Método de Lattice Boltzmann

Nesta seção apresentaremos o método de Lattice-Boltzmann, dando ênfase à versão denominada BGK. Iniciaremos com a idéia básica do método, bem como alguns dos seus pontos salientes positivos e pontos negativos. Em seguida, exploraremos aspectos da aproximação BGK, como a distribuição de equilíbrio e sua associação com a simetria do *lattice*. Para, na parte final, apresentarmos uma versão da distribuição de equilíbrio que visa aprimorar os resultados na simulação de escoamentos de fluidos incompressíveis através da redução dos erros de compressibilidade intrínsecos do LBM.

### 2.3.1 Introdução ao Método

O método de Lattice-Boltzmann (LBM) é um método numérico baseado em equações cinéticas formuladas em uma escala mesoscópica, como pôde ser visto na Seção 2.2, que simula a dinâmica de fluidos em uma escala macroscópica (Chen e Doolen (1998)). A dinâmica deste método é governada pela equação de Lattice-Boltzmann:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \Omega_i(\vec{f}(\vec{x}, t)), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.40)$$

onde,  $f_i$  é a função de distribuição das partículas (valores reais) e  $\Omega_i(\vec{f}(\vec{x}, t))$  é denominado termo de colisão, ambos na direção da velocidade  $\vec{e}_i$ , enquanto que

$\Delta x$  é o espaçamento do *lattice* (ou malha),  $\Delta t$  é o passo no tempo e  $\ell$  é o número de direções do *lattice*.

A equação de Lattice-Boltzmann descreve o movimento da distribuição de micro-partículas na mesoescala. Nesta equação podemos ver que o LBM é um método Lagrangiano e que nele deixamos de depender das variáveis Booleanas de ocupação de partículas  $n_i$ , presentes na equação (2.1) do método *Lattice-Gas* Autômato Celular (LGCA), e passamos a utilizar as funções reais de distribuição de partículas  $f_i = \langle n_i \rangle$ , onde  $\langle \cdot \rangle$  denota uma média por amostra. Este procedimento elimina o ruído estatístico presente no LGCA, pois assumimos que estas médias são tomadas de tal forma que os valores de  $f_i$  variam suavemente no espaço e no tempo.

Como dito anteriormente, o LBM é um esquema numérico explícito de segunda ordem no espaço e primeira ordem no tempo. O destaque especial é a localidade da equação de movimento (2.40), que leva a uma fácil e eficiente paralelização do algoritmo. Destacam-se ainda como pontos positivos: a fácil adaptação a geometrias grossamente irregulares (e.g., meios porosos), a fácil implementação e a descrição física clara. Como pontos negativos sobressaem os seguintes: necessidade de uma malha uniforme e o surgimento de instabilidades numéricas quando o parâmetro de relaxamento é menor que um limitante (dependente das características do problema) (Succi (1997)). Também comentamos que devido à atual tendência do uso de máquinas com processamento em paralelo, o uso de um código com características intrínsecas de paralelismo é algo bastante vantajoso.

O termo de colisão da equação de Lattice-Boltzmann (2.40) com a aproximação BGK será descrito na próxima seção.

### 2.3.2 Aproximação BGK

Uma versão bastante utilizada do operador de colisão é a aproximação BGK, apresentada anteriormente, a qual utiliza um termo de relaxamento em direção ao

equilíbrio local, conforme:

$$f_i(\vec{x} + \Delta x \vec{e}_i, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = \frac{1}{\tau} [f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) - f_i(\vec{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.41)$$

ou expondo de forma explícita a distribuição no tempo  $t + \Delta t$  temos:

$$f_i(\vec{x} + \Delta x \vec{e}_i, t + \Delta t) = \frac{1}{\tau} f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) + \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) f_i(\vec{x}, t), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.42)$$

onde,  $f_i(\vec{x}, t)$  representa a distribuição de micro-partículas que estão na posição  $\vec{x}$ , no tempo  $t$ , deslocando-se na direção indicada por sua velocidade  $\vec{e}_i$ ,  $\Delta x$  é o espaçamento do *lattice*,  $\Delta t$  é o passo no tempo e  $\ell$  é o número de direções do *lattice*. O parâmetro de relaxamento  $\tau$  está relacionado com os fenômenos difusivos no problema, neste caso com a viscosidade do fluido, conforme será demonstrado na Seção 2.4 (ver Eq. (2.82)). Esta forma da equação (2.41) foi sugerida independentemente por vários autores (Qian (1990), Chen et al. (1991)) e sua dedução formal foi reproduzida na Subseção 2.2.2. Neste modelo denominado *lattice* BGK (LBGK) a distribuição de equilíbrio local foi escolhida de forma que se possam recuperar as equações de NS assintoticamente, ou seja, com termos adicionais que se anulam no limite, como será demonstrado na Seção 2.4. A forma geral desta distribuição de equilíbrio é:

$$f_i^{\text{eq}} = a_i \rho + b_i \rho \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})}{v^2} + c_i \rho \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{v^4} + d_i \rho \frac{(\vec{u} \cdot \vec{u})}{v^2}, \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (2.43)$$

onde,  $v = \Delta x / \Delta t$  representa o módulo da velocidade das partículas, a qual depende das características da discretização empregada,  $\vec{u}$  é a velocidade macroscópica do fluido e as constantes  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$  e  $d_i$ ,  $i = 1, \dots, \ell$  serão determinadas mais adiante.

Para que possamos calcular estas constantes da distribuição de equilíbrio devemos recordar as simetrias que o *lattice* deve satisfazer, conforme exposto na equação (2.6) da Seção 2.1. Estas simetrias são necessárias para que recuperemos as equações corretas de Navier-Stokes, sem a presença de direções preferenciais na

dinâmica das distribuições de partículas. Porém, no LBM é possível admitirmos um número maior de modelos de *lattice* que no LGCA devido a possibilidade de introduzirmos pesos diferentes, denominados  $m_i$ , para cada direção de movimento  $\vec{e}_i$ . Logo, as simetrias que os modelos de *lattice* devem satisfazer com a introdução de pesos fica:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{\ell} m_i &= C_0, \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i &= 0 \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= C_2 v^2 \mathbf{I}^{(2)} \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= 0 \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= C_4 v^4 \mathbf{\Lambda},
\end{aligned} \tag{2.44}$$

onde,  $C_0$ ,  $C_2$  e  $C_4$  são constantes dependentes do *lattice* e os tensores  $\mathbf{I}^{(2)}$  e  $\mathbf{\Lambda}$  foram definidos na Subseção 2.1.2.

O cálculo das variáveis macroscópicas do fluido é feito através de uma aproximação da integral das variáveis mesoscópicas através de somatórios. Estimamos a massa específica (denominada  $\rho$ ) e a quantidade de movimento do fluido (denominado  $\rho \vec{u}$ ) através das equações:

$$\rho(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} f_i(\vec{x}, t) \quad \text{e} \quad \rho \vec{u}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{\ell} \vec{e}_i f_i(\vec{x}, t). \tag{2.45}$$

Assim, podemos calcular os valores das constantes incógnitas da equação (2.43), através das equações de conservação de massa e de quantidade de movimento (Eq. (2.45)) combinadas com as relações de simetria (dadas pela equação (2.44)), resultando em (Chopard et al. (2002)):

$$f_i^{\text{eq}} = m_i \rho \left[ \frac{1}{C_2} \frac{c_s^2}{v^2} + \frac{1}{C_2} \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})}{v^2} + \frac{1}{2C_4} \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{v^4} - \frac{1}{2C_2} \frac{(\vec{u} \cdot \vec{u})}{v^2} \right], \quad i = 1, \dots, \ell \tag{2.46}$$

e

$$f_0^{\text{eq}} = \rho \left[ 1 - \frac{C_0}{C_2} \frac{c_s^2}{v^2} + \left( \frac{C_0}{2C_2} - \frac{C_2}{2C_4} \right) \frac{(\vec{u} \cdot \vec{u})}{v^2} \right], \quad (2.47)$$

onde,  $c_s = \sqrt{1/3}(\Delta x/\Delta t)$  é a velocidade do som no *lattice*.

Para exemplificar o que acabamos de explicar, apresentaremos um modelo muito utilizado para simulações em 2D, denominado *D2Q9*, com 8 direções de movimento mais a possibilidade de manter a distribuição de partículas parada, correspondente à velocidade nula. Conforme explicado acima, o problema de isotropia associado aos *lattices* quadrados em 2D é resolvido impondo-se pesos diferentes ( $m_i$ ) às direções de movimento, conforme a figura:

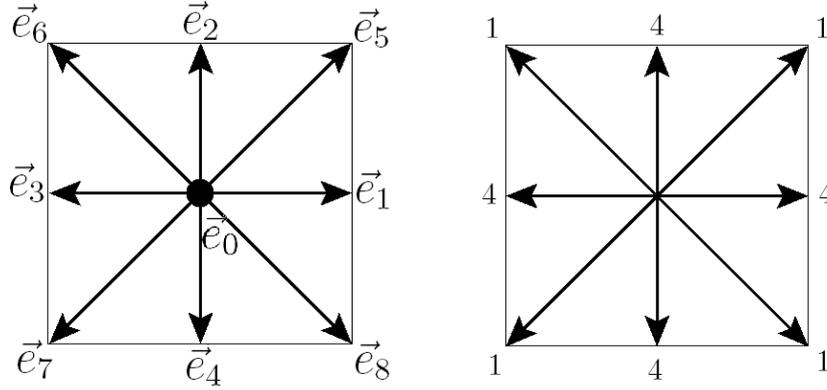


Figura 2.4: Modelo de *lattice* *D2Q9* e seus pesos.

A massa específica do fluido e o quantidade de movimento são definidos de acordo com as equações (2.45), ou seja:

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i \quad \rho \vec{u} = \sum_{i=1}^8 f_i \vec{e}_i. \quad (2.48)$$

Logo, suas constantes de simetria, que podem ser calculadas através das equações (2.44) e (2.45), são:

$$C_0 = 20, \quad C_2 = 12, \quad C_4 = 4. \quad (2.49)$$

Substituindo estas constantes nas equações da distribuição de

equilíbrio (2.46) e (2.47) temos:

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \rho \left[ 1 + 3 \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})}{v^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{v^4} - \frac{3}{2} \frac{(\vec{u} \cdot \vec{u})}{v^2} \right], \quad i = 0, \dots, 8 \quad (2.50)$$

onde.

$$\omega_0 = \frac{4}{9}, \quad \omega_{1-4} = \frac{1}{9}, \quad \omega_{5-8} = \frac{1}{36}. \quad (2.51)$$

Pode-se demonstrar que aplicando-se uma expansão assintótica multiescala de Chapman-Enskog na equação de Lattice-Boltzmann e assumindo que a velocidade do fluido é bastante menor que a velocidade do som, derivam-se as equações de Navier-Stokes incompressíveis (Chopard et al. (2002)). Isto será tratado em detalhe mais adiante adotando-se a distribuição de equilíbrio incompressível, apresentada a seguir. Vale a pena observar que no processo de recuperação das equações de NS podem surgir termos adicionais que se anulam no limite. Mostra-se em Philippi et al. (2006) que em 2D o menor modelo *lattice* capaz de recuperar as equações de NS de modo exato é o denominado *D2V17* (este modelo não será apresentado no presente trabalho), o qual faz uso de mais de um módulo de velocidade para uma mesma direção de movimento.

### 2.3.3 Distribuição de equilíbrio incompressível

Visando reduzir os erros de compressibilidade que surgem ao utilizarmos a distribuição de equilíbrio apresentada na seção anterior (Eqs. (2.46) e (2.47)), alguns autores propuseram versões modificadas da mesma. Uma destas versões, proposta por He e Luo (1997), é a que será adotada neste trabalho. Visto que queremos simular a dinâmica de fluidos incompressíveis, é uma vantagem interessante escolhermos uma distribuição de equilíbrio que reduza os erros de compressibilidade inerentes do LBM.

Em um fluido incompressível a massa específica é aproximadamente constante (denotada por  $\rho_0$ ) e a flutuação da mesma (denotada por  $\delta\rho$ ) deve ser da ordem  $\mathcal{O}(M^2)$  ( $M \rightarrow 0$ ), onde  $M = |\vec{u}|/c_s$  é o número de Mach.

Se substituirmos explicitamente  $\rho = \rho_0 + \delta\rho$  na função de equilíbrio e ignorarmos os termos proporcionais a  $\delta\rho(|\vec{u}|/c_s)$  e  $\delta\rho(|\vec{u}|/c_s)^2$  (que são da ordem de  $\mathcal{O}(M^3)$ ), chegamos à distribuição de equilíbrio:

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

onde,  $i = 1, \dots, \ell$  ou  $i = 0, \dots, \ell$  (se for permitido que as partículas fiquem paradas), e os pesos  $\omega_i$  são dependentes do modelo de *lattice* escolhido. De fato, as demais constantes presentes nesta equação também são dependentes do modelo de *lattice* escolhido, porém a apresentamos neste formato pois em todos modelos de *lattice* que serão estudados neste trabalho estas constantes se mantêm as mesmas.

Com o uso desta distribuição de equilíbrio podemos recuperar as equações de Navier-Stokes incompressíveis, conforme demonstrado a seguir na Seção 2.4, com ordens de aproximação em termos do número de Mach conforme indicado abaixo:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 + \mathcal{O}(M^2) \quad (2.53)$$

e

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \vec{u} + \mathcal{O}(M^3), \quad (2.54)$$

onde,  $P = c_s^2 \rho / \rho_0$  é a pressão normalizada e  $\nu$  é a viscosidade cinemática do fluido, descrita por:

$$\nu = \frac{(2\tau - 1)}{6} \frac{\Delta x^2}{\Delta t}. \quad (2.55)$$

Veja aqui como a viscosidade do fluido modelado depende tanto dos parâmetros que definem a discretização espaço-temporal como do parâmetro de relaxação que caracteriza o operador de colisão.

## 2.4 Análise assintótica

Nesta seção faremos o desenvolvimento formal da expansão assintótica que nos leva do modelo de Lattice-Boltzmann até as equações de Navier-Stokes:

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \vec{u}. \quad (2.57)$$

Seja então a equação de Lattice-Boltzmann:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\vec{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t)]. \quad (2.58)$$

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 (1997), que foi adotada neste trabalho:

$$f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) = \omega_i \left\{ \rho + \frac{\rho_0}{c_s^2} \left[ 3(\vec{e}_i \cdot \vec{u}) + \frac{9}{2} \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{c_s^2} - \frac{3}{2} (\vec{u} \cdot \vec{u}) \right] \right\}. \quad (2.59)$$

A análise será restringida, sem perda de generalidade, ao uso do modelo de *lattice* tridimensional  $D3Q19$  (ver Subseção 3.2.1), o qual discretiza as possibilidades de movimento das partículas em 18 direções mais a possibilidade de as partículas permanecerem paradas. Uma discussão mais detalhada sobre os diferentes modelos de *lattice* é realizada no Capítulo 3. Conseqüentemente, na distribuição de equilíbrio acima temos  $i$  variando de 0 a 18 e os pesos  $\omega_i$  assumem os valores (ver Subseção 3.2.1):

$$\omega_0 = \frac{1}{9}, \quad \omega_{1-6} = \frac{1}{18}, \quad \omega_{7-18} = \frac{1}{36}. \quad (2.60)$$

No trabalho de He e Luo (1997) 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:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i \Delta x, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} D_t^n f_i(\vec{x}, t) \quad (2.61)$$

$$f_i(\vec{x}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n f_i^{(n)}(\vec{x}, t) \quad (2.62)$$

$$\partial_t = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \partial_{t_n} \quad (2.63)$$

onde  $\varepsilon = \Delta t$ ,  $D_t = (\partial_t + \vec{e}_i \cdot \nabla)$  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 (2.63) é dividida em diferentes ordens (escalas) de  $\varepsilon$ . 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 (ver Eq. (2.58)), em ordens consecutivas do parâmetro  $\varepsilon$ , como:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^0) : \quad & \frac{\varepsilon^0}{0!} D_t^0 f_i^{(0)} - \varepsilon^0 f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} [\varepsilon^0 f_i^{(0)} - f_i^{\text{eq}}] \\ \therefore \quad & f_i^{(0)} - f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} [f_i^{(0)} - f_i^{\text{eq}}] \\ \therefore \quad & f_i^{(0)} = f_i^{\text{eq}} \end{aligned} \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^1) : \quad & f_i + \varepsilon D_t f_i - f_i = -\frac{1}{\tau} [f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} - f_i^{\text{eq}}] \\ \therefore \quad & D_{t_0} f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \end{aligned} \quad (2.65)$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}(\varepsilon^2) : \quad & f_i + \varepsilon D_t f_i + \frac{\varepsilon^2}{2!} D_t^2 f_i - f_i = -\frac{1}{\tau} [f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} - f_i^{\text{eq}}] \\
\therefore \quad & \varepsilon D_{t_0} (f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)}) + \varepsilon^2 \partial_t f_i^{(0)} + \frac{\varepsilon^2}{2} D_{t_0}^2 f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau} [\varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)}] \\
\therefore \quad & D_{t_0} f_i^{(1)} + \partial_t f_i^{(0)} + \frac{1}{2} D_{t_0} \left( -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right) = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)} \\
\therefore \quad & \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left( \frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) D_{t_0} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} f_i^{(2)}
\end{aligned} \tag{2.66}$$

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

A função de distribuição  $f_i$  é uma solução da equação de Lattice-Boltzmann, sujeita às restrições de conservação de massa e de quantidade de movimento (ver Eq. (2.45)) impostas da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\sum_i f_i^{(0)} &= \rho, \quad \sum_i \vec{e}_i f_i^{(0)} = \rho_0 \vec{u}, \\
\sum_i f_i^{(n)} &= 0 \quad \text{e} \quad \sum_i \vec{e}_i f_i^{(n)} = 0, \quad n > 0.
\end{aligned} \tag{2.67}$$

Definindo o tensor

$$\mathbf{E}^{(n)} = \sum_i \omega_i \underbrace{\vec{e}_i \otimes \dots \otimes \vec{e}_i}_{n \text{ vezes}}, \tag{2.68}$$

onde, os  $\omega_i$ ,  $i = 0, \dots, 18$ , estão definidos na equação (2.60), podemos encontrar as seguintes propriedades do *lattice*  $D3Q19$ ,

$$\left. \begin{aligned}
\sum_{i=1}^6 \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= 2v^2 \mathbf{I}^{(2)} \\
\sum_{i=7}^{18} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= 8v^2 \mathbf{I}^{(2)}
\end{aligned} \right\} \Rightarrow \mathbf{E}^{(2)} = \frac{1}{3} v^2 \mathbf{I}^{(2)}, \tag{2.69}$$

$$\left. \begin{aligned}
\sum_{i=1}^6 \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= 2v^2 \mathbf{I}^{(4)} \\
\sum_{i=7}^{18} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= 4v^2 (\mathbf{\Lambda} - \mathbf{I}^{(4)})
\end{aligned} \right\} \Rightarrow \mathbf{E}^{(4)} = \frac{1}{9} v^4 \mathbf{\Lambda} \tag{2.70}$$

e

$$\mathbf{E}^{(2n+1)} = 0 \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.71)$$

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 (2.7).

Com estas propriedades do tensor  $\mathbf{E}^{(n)}$  podemos completar as restrições expostas nas equações (2.67) para  $f_i^{(0)}$ , resultando em:

$$\begin{aligned} \sum_i f_i^{(0)} &= \rho, \\ \sum_i \vec{e}_i f_i^{(0)} &= \rho_0 \vec{u}, \\ \sum_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i f_i^{(0)} &= \frac{1}{3} v^2 \rho \mathbf{I}^{(2)} + \rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u} \\ \sum_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i f_i^{(0)} &= \frac{1}{3} v^2 \rho_0 [\mathbf{I}^{(2)} \otimes \vec{u} + (\mathbf{I}^{(2)} \otimes \vec{u})^{1/T} + \vec{u} \otimes \mathbf{I}^{(2)}], \end{aligned} \quad (2.72)$$

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 (2.65) nos levam às equações de Euler, conforme demonstrado a seguir. Temos para o momento de ordem 0 da equação (2.65):

$$\begin{aligned} \sum_i D_{t_0} f_i^{(0)} &= \sum_i \left[ -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right] \\ \therefore \sum_i \partial_{t_0} f_i^{(0)} + \sum_i (\vec{e}_i \cdot \nabla) f_i^{(0)} &= -\frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(1)} \\ \therefore \partial_{t_0} \sum_i f_i^{(0)} + \nabla \cdot \left( \sum_i \vec{e}_i f_i^{(0)} \right) &= 0 \\ \therefore \partial_{t_0} \rho + \nabla \cdot (\rho_0 \vec{u}) &= 0, \end{aligned} \quad (2.73)$$

e para o momento de ordem 1 da equação (2.65):

$$\begin{aligned}
\sum_i \vec{e}_i D_{t_0} f_i^{(0)} &= \sum_i \vec{e}_i \left[ -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \right] \\
\therefore \partial_{t_0} \sum_i \vec{e}_i f_i^{(0)} + \nabla \cdot \left( \sum_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i f_i^{(0)} \right) &= -\frac{1}{\tau} \sum_i \vec{e}_i f_i^{(1)} \quad (2.74) \\
\therefore \partial_{t_0} (\rho_0 \vec{u}) + \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{(0)} &= 0,
\end{aligned}$$

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

$$\mathbf{\Pi}^{(0)} = \sum_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i f_i^{(0)} = \frac{1}{3} v^2 \rho \mathbf{I}^{(2)} + \rho_0 \vec{u} \otimes \vec{u}. \quad (2.75)$$

Agora, se reescrevermos as equações de Euler ((2.73) e (2.74)) em função da pressão normalizada  $P = c_s^2 \rho / \rho_0$  e da velocidade do som  $c_s = v / \sqrt{3}$ , lembrando que  $\nabla \rho_0 = 0$ , chegaremos às seguintes equações:

$$\frac{1}{c_s^2} \partial_{t_0} P + \nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (2.76)$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{\rho_0}{\rho_0} \partial_{t_0} \vec{u} + \nabla \cdot \left( \frac{1}{3} v^2 \frac{\rho}{\rho_0} \mathbf{I} + \frac{\rho_0}{\rho_0} \vec{u} \otimes \vec{u} \right) &= 0 \quad (2.77) \\
\therefore \partial_{t_0} \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} &= -\nabla P - \vec{u} (\nabla \cdot \vec{u}).
\end{aligned}$$

Diferentemente de outros modelos LBM, onde o termo divergente é cancelado exatamente, aqui o termo divergente,  $\vec{u} (\nabla \cdot \vec{u})$ , permanece na equação de momento. De qualquer forma, através da Eq. (2.76), encontramos que o termo divergente da equação (2.77) 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 (2.66) nos levam às seguintes equações,

tomando o momento de ordem 0 da equação (2.66):

$$\begin{aligned}
& \sum_i \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left( \frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \sum_i D_{t_0} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i f_i^{(2)} \\
\therefore \quad & \partial_{t_1} \sum_i f_i^{(0)} + \left( \frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \left[ \partial_{t_0} \sum_i f_i^{(1)} + \nabla \cdot \left( \sum_i \vec{e}_i f_i^{(1)} \right) \right] = 0 \quad (2.78) \\
\therefore \quad & \partial_{t_1} \rho = 0,
\end{aligned}$$

e tomando o momento de ordem 1 da equação (2.66):

$$\begin{aligned}
& \sum_i \vec{e}_i \partial_{t_1} f_i^{(0)} + \left( \frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \sum_i \vec{e}_i D_{t_0} f_i^{(1)} = -\frac{1}{\tau} \sum_i \vec{e}_i f_i^{(2)} \\
\therefore \quad & \partial_{t_1} \sum_i \vec{e}_i f_i^{(0)} + \left( \frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \left[ \partial_{t_0} \sum_i \vec{e}_i f_i^{(1)} + \nabla \cdot \left( \sum_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i f_i^{(1)} \right) \right] = 0 \quad (2.79) \\
\therefore \quad & \partial_{t_1} \rho_0 \vec{u} + \left( \frac{2\tau - 1}{2\tau} \right) \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{(1)} = 0
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Pi}^{(1)} &= \sum_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i f_i^{(1)} = -\tau \sum_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i D_{t_0} f_i^{(0)} \\
&= -\tau \left\{ \partial_{t_0} \mathbf{\Pi}^{(0)} + \frac{1}{3} v^2 \rho_0 [\nabla \cdot \vec{u} \mathbf{I}^{(2)} + \nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T] \right\} \\
&= -\tau \left\{ \rho_0 \partial_{t_0} (\vec{u} \otimes \vec{u}) + c_s^2 \rho_0 [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T] \right\} \\
&= \tau \left\{ c_s^2 \left[ \vec{u} \otimes \nabla \rho + (\vec{u} \otimes \nabla \rho)^T \right] + \rho_0 [\vec{u} \otimes (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} + (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} \otimes \vec{u}] \right. \\
&\quad \left. - c_s^2 \rho_0 [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T] \right\}. \quad (2.80)
\end{aligned}$$

Na equação acima, os termos da ordem de  $\mathcal{O}(|\vec{u}|^3)$  devem ser rejeitados, para que sejamos consistentes com a expansão válida para baixas velocidades da  $f_i^{\text{eq}}$  até a ordem de  $\mathcal{O}(|\vec{u}|^2)$  (note que  $\mathcal{O}(|\vec{u}|) = \mathcal{O}(M)$ , por isso tomamos a liberdade de trocar estas notações quando for conveniente). Logo, os termos contendo  $\vec{u} \otimes \nabla \rho$  também devem ser rejeitados 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 (2.80), como:

$$\begin{aligned} \frac{(2\tau - 1)}{2\tau} \nabla \cdot \mathbf{\Pi}^{(1)} &= -\frac{\nu}{\Delta t} \rho_0 \nabla \cdot [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T] + \mathcal{O}(M^3) \\ &= -\frac{\nu}{\Delta t} \rho_0 [\nabla(\nabla \cdot \vec{u}) + \nabla \cdot (\nabla \vec{u})] + \mathcal{O}(M^3) \\ &= -\frac{\nu}{\Delta t} \rho_0 \nabla^2 \vec{u} + \mathcal{O}(M^3), \end{aligned} \quad (2.81)$$

onde, o termo  $\nabla(\nabla \cdot \vec{u})$  foi cortado por ser da ordem de  $\mathcal{O}(M^3)$  devido à equação (2.76), e a viscosidade cinemática fica representada por

$$\nu = \frac{(2\tau - 1) \Delta x^2}{6 \Delta t}. \quad (2.82)$$

Combinando os resultados de ordem 0 (Eqs. (2.76) e (2.77)) e os resultados de ordem 1 (Eqs. (2.78), (2.79) e (2.81)), fazendo uso da notação  $\partial_t = \partial_{t_0} + \varepsilon \partial_{t_1}$  e setando no limite o parâmetro  $\varepsilon = 1$ , chegamos às seguintes equações, nas ordens indicadas do número de Mach,

$$\frac{1}{c_s^2} \partial_t P + \nabla \cdot \vec{u} = 0 + \mathcal{O}(M^2), \quad (2.83)$$

$$\partial_t \vec{u} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \vec{u} + \mathcal{O}(M^3). \quad (2.84)$$

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 (2.56)) das equações de NS incompressíveis. Analisando a equação (2.83) em sua forma adimensional, vemos que:

$$\frac{1}{T} \partial_{t'} P' + \frac{c_s}{L} \nabla' \cdot \vec{u}' = 0 + \mathcal{O}(M^2), \quad (2.85)$$

onde,  $P' = P/c_s^2$ ,  $t' = t/T$ ,  $\nabla' = L\nabla$ ,  $\vec{u}' = \vec{u}/c_s$  e  $L$  e  $T$  são o comprimento e o tempo característicos do problema, respectivamente, conclui-se que para o termo

$\partial_t P'$  ser negligenciado a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$T \gg \frac{L}{c_s}. \quad (2.86)$$

O significado desta condição é bastante claro fisicamente. Temos que o tempo ( $T$ ) no qual o campo de fluxo 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 4.

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,

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 + \mathcal{O}(M^2) \quad (2.87)$$

e

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \vec{u} + \mathcal{O}(M^3). \quad (2.88)$$

Como conclusão, verificamos que a equação de Lattice-Boltzmann consegue aproximar assintoticamente as equações de NS incompressíveis, nas ordens indicadas acima, baseando-se na utilização da distribuição de equilíbrio incompressível (Eq. (2.59)) e na premissa do número de Mach ser pequeno, além da condição apresentada na equação (2.86) para escoamentos transientes.

# Capítulo 3

## Aspectos Práticos do Método de Lattice-Boltzmann

Neste capítulo apresentaremos alguns dos diferentes modelos de *lattice* mais empregados na prática, assim como, alguns procedimentos encontrados na literatura que visam impor condições de contorno de pressão e de velocidade, em 2D (na Seção 3.1) e 3D (na Seção 3.2). Exploraremos suas particularidades, vantagens e desvantagens, ressaltando também quais os modelos escolhidos para realizar as simulações deste trabalho, as quais serão apresentadas no Capítulo 4. Além disso, na Seção 3.3 serão estudadas diversas questões fundamentais para se realizar simulações de escoamentos incompressíveis mediante o LBM e na Seção 3.4 serão apresentadas informações referentes às implementações feitas no presente trabalho.

### 3.1 Modelos discretos de Lattice-Boltzmann em 2D

Nesta seção, apresentaremos primeiramente modelos de representação das direções de movimento das partículas (ou distribuições de partículas), através da escolha do *lattice*, e depois será feita uma revisão dos métodos encontrados na literatura para representação das condições de contorno de velocidade e pressão. Faremos uma discussão sucinta dos modelos apresentados e exploraremos com maior detalhe os modelos escolhidos para realizar as simulações deste trabalho.

### 3.1.1 Lattices

O *lattice*, ou malha, descreve as direções de movimento das distribuições de partículas no LBM. Na Subseção 2.2.1, vimos que a equação de Boltzmann com a aproximação BGK está constituída por um espaço de velocidades das distribuições de dimensão infinita (ver Eq. (2.29) no Cap. 2). Entretanto, para levar a cabo simulações via LBM é preciso encontrar uma discretização apropriada para este espaço. Isto foi feito na Subseção 2.2.2 do Cap. 2, cujo resultado foi um espaço de velocidades de dimensão finita cujos elementos denominam-se  $\vec{e}_i$ , onde  $i = 1, \dots, \ell$ , sendo  $\ell$  a dimensão deste espaço.

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 (ver Seção 2.4), ou seja, deve estar de acordo com as seguintes equações apresentadas na Subseção 2.3.2 (ver Frisch et al. (1986)):

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{\ell} m_i &= C_0, \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i &= 0 \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= C_2 v^2 \mathbf{I}^{(2)} \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= 0 \\
\sum_{i=1}^{\ell} m_i \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i \otimes \vec{e}_i &= C_4 v^4 \mathbf{\Lambda},
\end{aligned} \tag{3.1}$$

onde, os vetores  $\vec{e}_i$  representam as direções de movimento e são proporcionais à velocidade das partículas ( $v = \Delta x / \Delta t$ , sendo  $\Delta t$  o passo no tempo e  $\Delta x$  o espaçamento do *lattice*), 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, e os tensores  $\mathbf{I}^{(2)}$  e  $\mathbf{\Lambda}$  foram definidos na Subseção 2.1.2. Estas propriedades de simetria são preservadas em todos os *lattices* aqui apresentados.

Em geral, a notação empregada para denominar os *lattices* é a seguinte:  $DXQY$  indica um *lattice* no espaço  $X$ -dimensional com  $Y$  possibilidades de movimento, dentro das quais se encontra a possibilidade de velocidade nula, também conhecida como “partícula parada”.

**Lattice D2Q7.** Este modelo de *lattice* hexagonal possui seis direções de movimento simetricamente distribuídas (conforme a Figura 3.1), além da possibilidade de as partículas permanecerem paradas, com o qual se tem a sétima possibilidade. Este modelo é originário do modelo predecessor do LBM, o *Lattice-Gas* Autômato Celular (LGCA). Mais detalhadamente, definimos as direções de movimento:

$$\vec{e}_0 = (0, 0) \quad \text{e} \quad \vec{e}_i = \left( \cos \left[ \frac{\pi}{3}(i-1) \right], \sin \left[ \frac{\pi}{3}(i-1) \right] \right) v, \quad i = 1, \dots, 6. \quad (3.2)$$

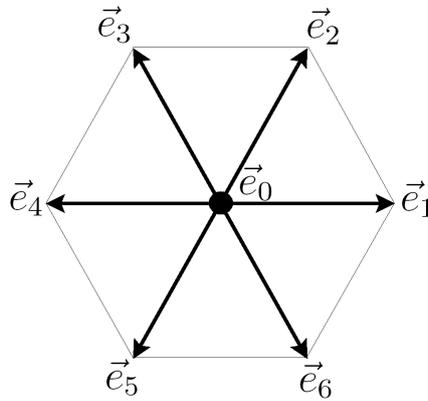


Figura 3.1: Modelo de *lattice* D2Q7, com 6 velocidades não nulas.

Este é o menor *lattice* que respeita as simetrias acima citadas (Eq. (3.1)) sem a introdução de pesos diferentes ( $m_i$ ) para cada direção de movimento e que aceita partículas paradas. Neste *lattice* uma célula é equidistante de suas seis vizinhas mais próximas, logo a velocidade das partículas,

denotada por  $v$ , é única. Para o modelo  $D2Q7$  as constantes de simetria, calculadas através da Eq. (3.1), assumindo  $m_{1-6} = 1$ , ficam

$$C_0 = 6, \quad C_2 = 3, \quad C_4 = \frac{3}{4}. \quad (3.3)$$

Logo, os pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio incompressível (Eq. (2.52)) são

$$\omega_0 = \frac{1}{3}, \quad \omega_{1-6} = \frac{1}{9}. \quad (3.4)$$

**Lattice D2Q9.** Outro modelo bastante utilizado nas implementações bidimensionais do LBM é o *lattice* quadrado  $D2Q9$ , com oito direções não nulas de movimento e a possibilidade de ter uma partícula parada. Neste modelo é necessária a utilização de pesos diferentes, que podem ser interpretados como “massas” das partículas, associados às direções (conforme a Figura 3.2) para que seja preservada a simetria exigida pela Eq. (3.1). Estas massas  $m_i$  são englobadas no cálculo das distribuições  $f_i$ , para que estas passem a fornecer medidas de massa (e não somente medidas de probabilidades), conforme foi visto na Seção 2.3. Logo, estas massas estão dadas por

$$m_{1-4} = 4, \quad m_{5-8} = 1 \quad (3.5)$$

e as direções de movimento são descritas por

$$\begin{aligned} \vec{e}_0 &= (0, 0), & \vec{e}_1 &= (1, 0)v, & \vec{e}_2 &= (0, 1)v, \\ \vec{e}_3 &= (-1, 0)v, & \vec{e}_4 &= (0, -1)v, & \vec{e}_5 &= (1, 1)v, \\ \vec{e}_6 &= (-1, 1)v, & \vec{e}_7 &= (-1, -1)v, & \vec{e}_8 &= (1, -1)v. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Em *lattices* quadrados, como este, temos que introduzir duas velocidades

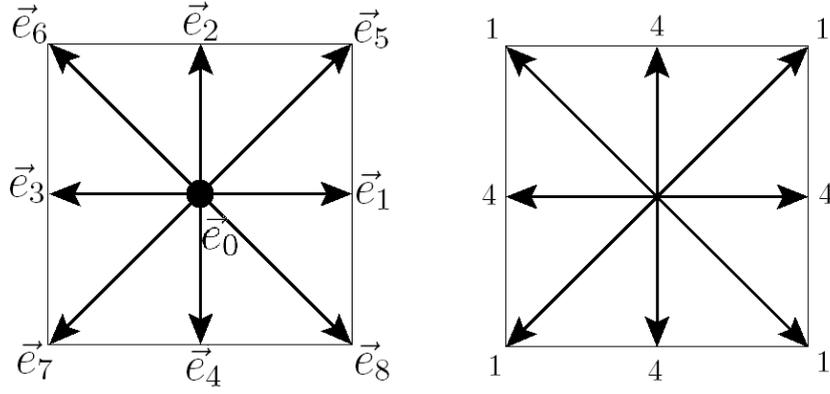


Figura 3.2: Modelo de *lattice*  $D2Q9$  (8 velocidades não nulas) e seus pesos.

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 ( $\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_4$ ) e as velocidades “rápidas” com módulo  $\sqrt{2}v$  nas direções diagonais ( $\vec{e}_5, \dots, \vec{e}_8$ ). 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

$$C_0 = 20, \quad C_2 = 12, \quad C_4 = 4. \quad (3.7)$$

Logo, os pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio incompressível (Eq. (2.52)) são

$$\omega_0 = \frac{4}{9}, \quad \omega_{1-4} = \frac{1}{9}, \quad \omega_{5-8} = \frac{1}{36}. \quad (3.8)$$

Para realizar as simulações presentes neste trabalho, escolhemos o modelo de *lattice* quadrado  $D2Q9$ , por possuir um número maior de graus de liberdade para o movimento, ou equivalentemente por ter um espaço de velocidades discreto mais rico, e por ser bastante aceito em trabalhos recentes na área de hemodinâmica computacional (Artoli et al. (2004), Hirabayashi et al. (2006) e Pelliccioni et al. (2007)).

Assim, a equação da distribuição de equilíbrio incompressível (2.52), para este modelo, fica descrita por:

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \left\{ \rho + \rho_0 \left[ 3 \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})}{v^2} + \frac{9}{2} \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{v^4} - \frac{3}{2} \frac{(\vec{u} \cdot \vec{u})}{v^2} \right] \right\}, \quad i = 0, \dots, 8, \quad (3.9)$$

onde,  $\vec{u}$  é a velocidade do fluido, os pesos  $\omega_i$  são descritos pela equação (3.8) e as direções  $\vec{e}_i$  pela equação (3.6). Lembrando que na distribuição de equilíbrio adotada, conforme explicado na Subseção 2.3.3, fazemos uso de duas massas específicas, a massa específica  $\rho$  típica do LBM e uma massa específica média  $\rho_0$  que vem a representar a massa específica do fluido incompressível, a qual é constante.

### 3.1.2 Condições de contorno de velocidade

A maneira de implementar as condições de contorno é um fator crucial nas simulações via LBM, pois estas poderão influenciar na ordem do erro da aproximação, ao realizar as simulações computacionais.

Podemos dividir as condições de contorno de velocidade encontradas na literatura, de maneira simplificada, nestes quatro grupos: (i) periódico, (ii) *bounce back*, (iii) colisão na célula e (iv) esquema de interpolação. Estes quatro grupos de condições de contorno e alguns exemplos dos mesmos serão apresentados a seguir.

**(i) Periódico** (Dupuis (2002)): este modelo de condição de contorno é de simples implementação, porém, em muitos casos, pouco realista, a não ser que as condições do problema sejam tais que haja uma periodicidade física no mesmo. Nele se conectam diretamente duas regiões de contorno, ou seja, todas as partículas que saírem de uma região chegam à outra nas direções correspondentes, conforme ilustra a Figura 3.3. Esta opção é a de mais fácil entendimento devido à correspondência direta que existe entre as direções de uma célula e as mesmas da célula localizada a uma distância igual à periodicidade do domínio. Ele é muitas vezes utilizado em simulações de escoamentos em canais.

**(ii) Bounce back** (Dupuis (2002), Rothman e Zaleski (2004), He e Luo

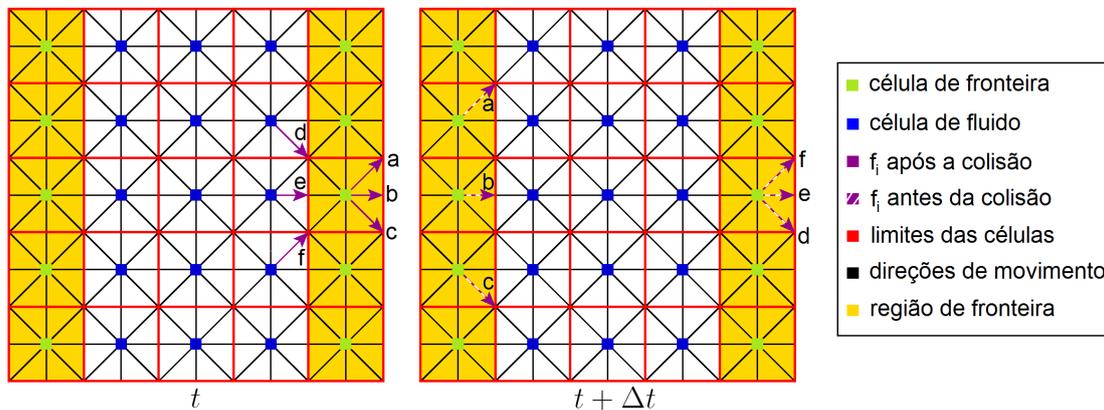
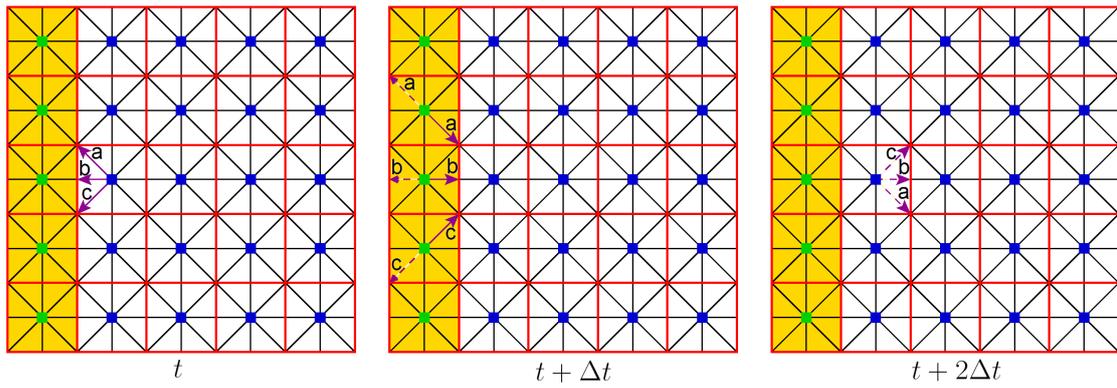


Figura 3.3: Condição de contorno de velocidade do tipo periódica.

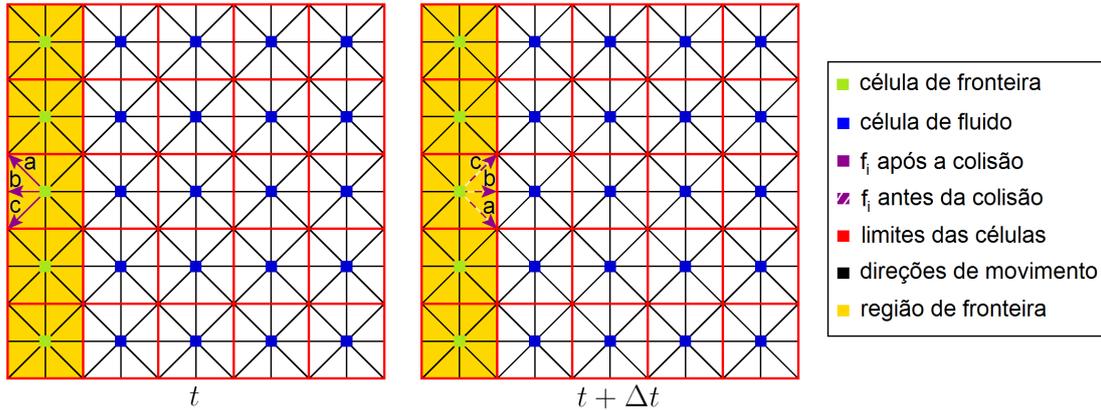
(1997)): estes são os modelos mais simples para implementação de condições de contorno do tipo parede não escorregadia (com velocidade nula em todas as direções). Basta saber que uma célula é de parede e a partículas que a atingirem devem retornar na mesma direção e com sentido contrário.

Sua implementação pode ser feita de duas formas, como *bounce back* de caminho completo ou *bounce back* de meio caminho (ver Dupuis (2002)). No primeiro caso, utilizam-se células representando os elementos de parede e, ao invés de ocorrer a colisão como nas demais células, a etapa de colisão nestas células é substituída pelo reflexo (mudança de sentido) das partículas que chegam a ela, conforme ilustra a Figura 3.4(a). No segundo caso, não é necessária a utilização células de parede, basta refletir as partículas que iriam se deslocar para estas células na etapa de propagação, conforme ilustra a Figura 3.4(b). Uma análise da localização exata onde é imposta a condição de contorno através do modelo *bounce back* de caminho completo pode ser encontrada na referência Rothman e Zaleski (2004).

Repare que estes modelos claramente preservam o número de partículas (massa) do sistema. Porém, o fato de introduzir velocidade nula nas paredes através da reflexão de partículas nem sempre é muito eficiente. Em alguns casos tem-se observado uma “velocidade de escorregamento” espúria, que depende da viscosidade, ao longo das paredes (He e Luo (1997)).



(a) *Bounce back* de caminho completo.



(b) *Bounce back* de meio caminho.

Figura 3.4: Condição de contorno de velocidade do tipo *bounce back*.

O *bounce back* de meio caminho parece ser melhor que o *bounce back* de caminho completo, chegando a obter segunda ordem, em termos do espaçamento do *lattice*, na acurácia da solução em alguns casos com geometrias específicas (Dupuis (2002)). Enquanto que o *bounce back* de caminho completo só possui primeira ordem na acurácia. Entretanto, a mencionada simplicidade faz com que o método não consiga representar adequadamente problemas de contornos curvos sem introduzir ruído na solução, o que pode ser determinante em certas situações com relação à estabilidade, sobretudo se o *lattice* não for suficientemente refinado.

(iii) **Colisão na célula** (Dupuis (2002), Inamuro et al. (1995), Zou e He (1997)): os modelos de colisão na célula servem para impor condições de contorno de velocidade (não necessariamente nula) exatamente nos centros das células de fronteira. A idéia básica destes modelos, geralmente de segunda ordem, é manter as

etapas de colisão e propagação normais para todas as células, porém introduzindo um cálculo adicional, antes da etapa de colisão, para avaliar a quantidade de partículas ( $f_i$ ) que se deslocam em algumas direções das células de fronteira (de acordo com a forma local da fronteira).

Após a etapa de propagação, as  $f_i$ 's provenientes do interior e da própria fronteira são conhecidas nas células de fronteira. O número de  $f_i$ 's conhecidas depende do *lattice* adotado e do formato local da fronteira (plano, quina convexa, quina côncava, etc.). As  $f_i$ 's desconhecidas e a massa específica da célula de fronteira são usualmente calculadas a partir da equação de conservação de massa:

$$\rho(x, y, t) = \sum_{i=0}^{\ell} f_i(x, y, t) \quad (3.10)$$

onde  $\ell$  representa o número de direções não nulas do *lattice*, das duas equações de conservação de quantidade de movimento (onde é imposta a velocidade da fronteira):

$$\rho_0 \vec{u}(x, y, t) = \sum_{i=1}^{\ell} f_i(x, y, t) \vec{e}_i \quad (3.11)$$

e, se ainda houverem incógnitas, de outras equações específicas do modelo de condição de contorno escolhido.

No trabalho Inamuro et al. (1995), propõe-se o cálculo das  $f_i$ 's desconhecidas através da própria distribuição de equilíbrio, que por sua vez depende da velocidade e da massa específica. Este modelo fornece precisão da máquina na simulação do escoamento de Poiseuille, porém, não garante a conservação de massa e pode levar a instabilidades numéricas (Dupuis (2002)).

Já no trabalho de Zou e He (1997) o cálculo das  $f_i$ 's desconhecidas é feito através da reflexão da parte denominada de não-equilíbrio, ou seja,

$$f_i^{\text{ne}} := f_i - f_i^{\text{eq}} = f_{i+\ell/2} - f_{i+\ell/2}^{\text{eq}}. \quad (3.12)$$

Ao realizar esta reflexão para algumas direções simetricamente distribuídas

(selecionadas de acordo com o *lattice* e a forma local da fronteira), completa-se o número de equações necessárias para o cálculo das  $f_i$ 's. Por exemplo no *lattice*  $D2Q9$ , para uma condição de contorno imposta sobre um plano que acompanhe uma das direções principais do *lattice*, reflete-se somente a direção ortogonal ao plano (completando quatro equações), pois são desconhecidos três valores de  $f_i$ 's na célula de fronteira, conforme ilustra a Figura 3.5, além da massa específica (completando quatro incógnitas).

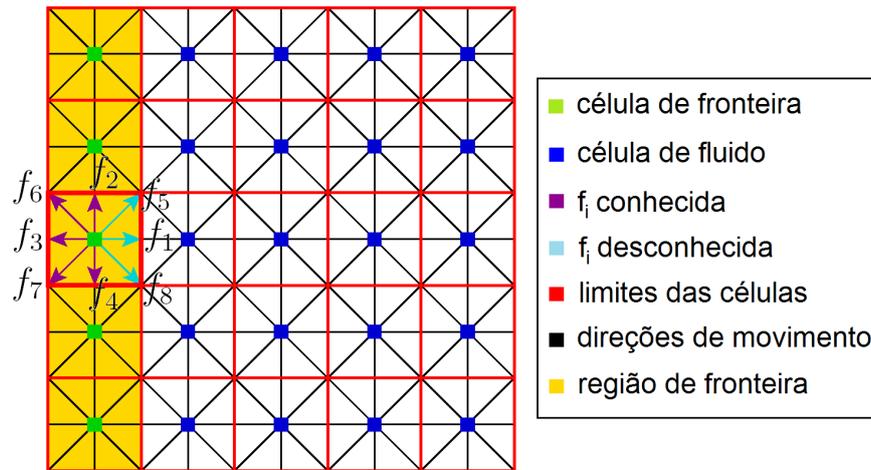


Figura 3.5: Condição de contorno de velocidade do tipo colisão na célula.

(iv) **Esquema de interpolação** (Guo et al. (2002), Chopard et al. (2002)): estes modelos trazem a vantagem de poder-se aplicar condições de contorno fora do centro das células do *lattice*, visando uma acurácia de segunda ordem se o esquema de interpolação for apropriado. Assim, podemos impor condições de contorno sobre linhas curvas de forma muito mais precisa que com os modelos anteriores, visto que tais curvas não precisam cruzar os centros das células mais próximas. Vale a pena salientar que a implementação deste tipo de modelo é mais complexa que a dos modelos anteriores, pois temos que identificar os pontos em que a linha de contorno tem intersecção com as conexões entre as células do *lattice*. No entanto, esta informação deve ser considerada mínima quando se quer representar adequadamente a posição de uma dada condição de contorno por meio de um *lattice* regular.

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 destes modelos consiste em estimar as  $f_i$ 's destas células de parede que apontem para células de fluido, a partir de uma interpolação linear ou quadrática entre o valor dado pela condição de contorno na intersecção e informações da(s) célula(s) do interior do domínio conectada(s). A seguir, isto ficará mais claro ao apresentarmos uma ilustração mais específica.

A forma que adotamos para implementar as condições de contorno de velocidade neste trabalho, proposta por Guo et al. (2002), é um esquema de interpolação. Optamos por este tipo de modelo porque iremos trabalhar com domínios curvos nas implementações, cujo objetivo final está direcionado a problemas de hemodinâmica computacional. Resultados numéricos mostram que este modelo é de segunda ordem na acurácia, em termos do espaçamento, sendo bem comportado em termos de estabilidade (Guo et al. (2002)). O modelo baseia-se na estimativa das  $f_i$ 's nas células de parede (de acordo com a definição dada acima), decompondo-as nas partes de equilíbrio ( $f_i^{\text{eq}}$ ) e de não-equilíbrio ( $f_i^{\text{ne}}$ ), a partir de interpolações de valores conhecidos. A parte de equilíbrio é aproximada através de uma estimativa da velocidade e da massa específica na célula de parede, calculadas através da interpolação das velocidades e massas específicas na fronteira e nas células próximas, e a parte de não-equilíbrio é estimada a partir da interpolação das distribuições de não-equilíbrio de células próximas.

Detalhando melhor o modelo, podemos observar na Figura 3.6 que a conexão entre a célula de parede (na posição  $\vec{x}^w$ ) e a célula interna (na posição  $\vec{x}_i^f$ ) cruza a fronteira física em  $\vec{x}_i^b$  e, observamos ainda, que  $\vec{x}_i^f = \vec{x}^w + \vec{e}_i \Delta x / |\vec{e}_i|$  (onde  $i$  corresponde à direção indicada). Os valores do índice  $i$  variam de célula para célula, por exemplo, no caso da Figura 3.6, para a célula localizada em  $\vec{x}^w$ , o índice  $i$  assume os valores  $i = 1, 2, 5, 8$  (considerando que adotamos o *lattice*  $D2Q9$  com a numeração indicada pela Eq (3.6)). Assim, o cálculo das estimativas das

distribuições  $f_i^{\text{eq}}$  e  $f_i^{\text{ne}}$  no ponto  $\vec{x}^w$  é feito de acordo com a proporção  $\Delta_i = \Delta x_i / \Delta x$  para evitar instabilidades numéricas, conforme:

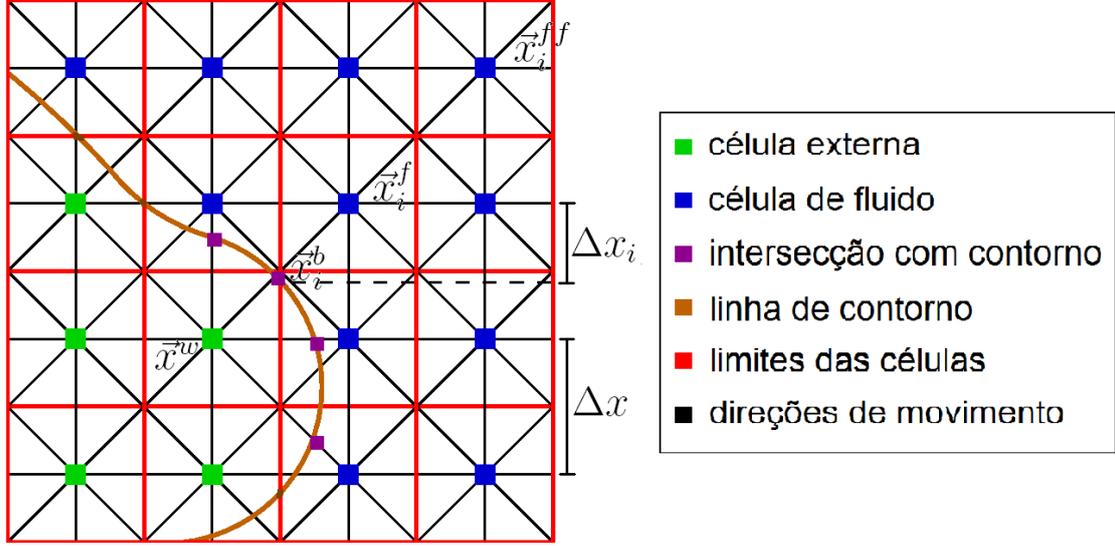


Figura 3.6: Condição de contorno de velocidade do tipo interpolação sobre uma linha curva.

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

$$\bar{u}_i(\vec{x}^w) = \frac{\vec{u}(\vec{x}_i^b) + (\Delta_i - 1)\vec{u}(\vec{x}_i^f)}{\Delta_i}, \quad (3.13)$$

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

$$\bar{f}_i^{\text{eq}}(\vec{x}^w) = \omega_i \left\{ \bar{\rho}_i(\vec{x}^w) + \frac{\rho_0}{c_s^2} \left\{ 3 [\vec{e}_i \cdot \bar{u}_i(\vec{x}^w)] + \frac{9}{2} \frac{[\vec{e}_i \cdot \bar{u}_i(\vec{x}^w)]^2}{c_s^2} - \frac{3}{2} [\bar{u}_i(\vec{x}^w) \cdot \bar{u}_i(\vec{x}^w)] \right\} \right\}, \quad (3.14)$$

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

$$\bar{f}_i^{\text{ne}}(\vec{x}^w) = f_i^{\text{ne}}(\vec{x}_i^f); \quad (3.15)$$

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

$$\bar{u}_i(\vec{x}^w) = \left[ \vec{u}(\vec{x}_i^b) + (\Delta_i - 1)\vec{u}(\vec{x}_i^f) \right] + \frac{(1 - \Delta_i)}{(1 + \Delta_i)} \left[ 2\vec{u}(\vec{x}_i^b) + (\Delta_i - 1)\vec{u}(\vec{x}_i^{ff}) \right], \quad (3.16)$$

onde  $\vec{u}(\vec{x}_i^{ff})$  é a velocidade da célula localizada a uma distância de dois *lattices* na direção indicada por  $i$  (ver Figura 3.6). Assim, a  $f_i^{\text{eq}}$  no ponto  $\vec{x}^w$  é aproximada através da Eq. (3.14) e estimamos  $f_i^{\text{ne}}$  no ponto  $\vec{x}^w$  como

$$\bar{f}_i^{\text{ne}}(\vec{x}^w) = \Delta_i f_i^{\text{ne}}(\vec{x}_i^f) + (1 - \Delta_i) f_i^{\text{ne}}(\vec{x}_i^{ff}). \quad (3.17)$$

Embora este modelo seja o mais adequado que temos encontrado disponível na literatura para representar as condições de contorno em regiões curvas, o mesmo pode apresentar instabilidades quando o valor de  $\Delta_i$  for pequeno (ver Guo et al. (2002)). Além disso, deve-se tomar o cuidado de empregar as fórmulas (3.16) e (3.17), indicadas para  $\Delta_i < 0,75$ , somente quando existirem duas células interiores na direção  $\vec{e}_i$ . O que não ocorre, por exemplo, em quinas convexas com condição de contorno de velocidade em ambas as paredes.

### 3.1.3 Condições de contorno de pressão

Apresentaremos aqui somente um modelo de condição de contorno de pressão, do tipo colisão na célula (visto anteriormente para o caso de velocidade), adequado aos problemas que trataremos. É importante lembrar que no modelo de Lattice-Boltzmann escolhido, com relaxamento simples e distribuição de equilíbrio descrita pela Eq. (2.52), a pressão (denominada  $p$ ) é linearmente relacionada com a massa específica (denominada  $\rho$ ), 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 massa específica diferentes, na mesma proporção, sobre tais contornos. Isto é, no caso trivial de um gradiente de pressão haverá um gradiente de massa específica subjacente.

No modelo do tipo colisão na célula, proposto por Zou e He (1997), é

necessário impor a pressão e uma das componentes da velocidade em cada célula de parede onde será aplicada a condição de contorno de pressão. Em muitos casos, em simulações realizadas em canais horizontais bidimensionais, é razoável impor velocidade nula na direção vertical nos extremos do canal. Logo, esta imposição de uma das componentes da velocidade é, muitas vezes, mais uma informação do problema. Este modelo baseia-se na utilização das equações de conservação de massa (Eq. (3.10)) e de quantidade de movimento (Eq. (3.11)), juntamente com a reflexão da parte de não-equilíbrio 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 da velocidade desconhecidas.

Escolhemos este modelo para representação das condições de contorno de pressão nas simulações realizadas neste trabalho porque, além de preservar a massa no contorno e de ser um modelo de segunda ordem, ele é um modelo apropriado para contornos retilíneos, ou planos em problemas tridimensionais. O que é suficiente, pois nos problemas que serão simulados aqui a pressão será sempre imposta sobre contornos com esta característica.

Para um melhor entendimento do modelo, 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*  $D2Q9$ , empregado neste trabalho, podemos verificar através da Figura 3.7 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 massa específica (denominada  $\rho$ ) 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 (3.10):

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho - (f_0 + f_2 + f_3 + f_4 + f_6 + f_7), \quad (3.18)$$

as equações de conservação da quantidade de movimento (3.11) na direção  $\vec{x}$ :

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho_0 \frac{u_x}{v} + (f_3 + f_6 + f_7) \quad (3.19)$$

e na direção  $\vec{y}$ :

$$f_5 - f_8 = -f_2 + f_4 - f_6 + f_7, \quad (3.20)$$

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

$$f_1 - f_1^{\text{eq}} = f_3 - f_3^{\text{eq}}. \quad (3.21)$$

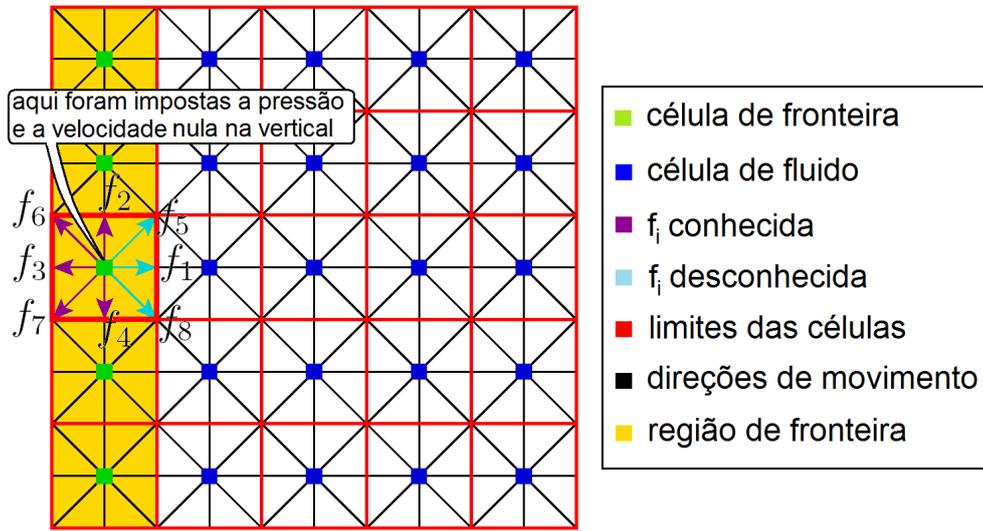


Figura 3.7: Condição de contorno de pressão do tipo colisão na célula.

A partir das equações (3.18)–(3.21) calculamos as incógnitas acima citadas como:

$$\begin{aligned} u_x &= \frac{\rho - [f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)]}{\rho_0} v, \\ f_1 &= f_3 + \frac{2}{3} \rho_0 \frac{u_x}{v}, \\ f_5 &= f_7 - \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{u_x}{v}, \\ f_8 &= f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{u_x}{v}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

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

## 3.2 Modelos discretos de Lattice-Boltzmann em 3D

Esta seção apresenta os principais modelos de *lattice* e diferentes maneiras de representarmos condições de contorno em problemas tridimensionais. Alguns dos modelos aqui apresentados são bastante semelhantes aos dos casos bidimensionais, porem existem diferenças significantes em alguns modelos, como veremos a seguir.

### 3.2.1 Lattices

Os *lattices*, ou malhas, em problemas tridimensionais adquirem uma complexidade maior, já que a dimensão do espaço discreto de velocidades aumenta consideravelmente. Isto é, as direções de movimento possíveis em 3D são significativamente maiores, assim como a possibilidade de se construir diferentes tipos de *lattices*.

Por outro lado, a simetria que é requerida dos *lattices*, para que seja possível representarmos as equações de Navier-Stokes, é forçada através das mesmas equações do caso 2D, isto é, as equações presentes em (3.1). As mesmas, garantem que não haja nenhuma direção preferencial de movimento das partículas, além de preservar a simetria de tensores de até quarta ordem, exigida ao aproximarmos as equações de Navier-Stokes pela expansão de Chapman-Enskog (ver Seção 2.4). Tais simetrias são encontradas nos três modelos de *lattice* aqui apresentados.

***Lattice D3Q15.*** O modelo de *lattice* cúbico denominado *D3Q15* possui 14 possibilidades de movimento não nulas e a possibilidade de partícula parada, conforme mostra a Fig. 3.8. Mais especificamente, as direções

de movimento que este *lattice* utiliza são

$$\begin{aligned}
\vec{e}_0 &= (0, 0, 0), & \vec{e}_1 &= (1, 0, 0)v, & \vec{e}_2 &= (0, 1, 0)v, \\
\vec{e}_3 &= (-1, 0, 0)v, & \vec{e}_4 &= (0, -1, 0)v, & \vec{e}_5 &= (0, 0, -1)v, \\
\vec{e}_6 &= (0, 0, 1)v, & \vec{e}_7 &= (1, 1, -1)v, & \vec{e}_8 &= (-1, 1, -1)v, \\
\vec{e}_9 &= (-1, -1, -1)v, & \vec{e}_{10} &= (1, -1, -1)v, & \vec{e}_{11} &= (1, 1, 1)v, \\
\vec{e}_{12} &= (-1, 1, 1)v, & \vec{e}_{13} &= (-1, -1, 1)v, & \vec{e}_{14} &= (1, -1, 1)v.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

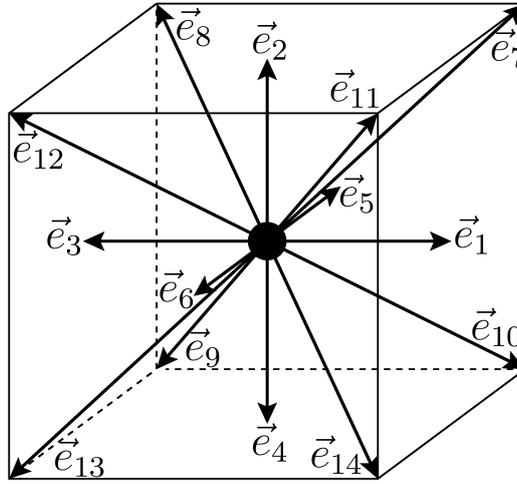


Figura 3.8: Modelo de *lattice* de  $D3Q15$ , com 14 velocidades não nulas.

Este é um modelo bastante encontrado na literatura e o menos custoso dentre os *lattices* cúbicos. Para este *lattice* as constantes de simetria, calculadas através da Eq. (3.1) resultam

$$C_0 = 7, \quad C_2 = 3, \quad C_4 = 1. \tag{3.24}$$

Assim, os pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio (Eq. (2.52)) são

$$\omega_0 = \frac{2}{9}, \quad \omega_{1-6} = \frac{1}{9}, \quad \omega_{7-14} = \frac{1}{72}. \tag{3.25}$$

Aqui as partículas assumem duas velocidades  $v$  e  $\sqrt{3}v$  associadas às

direções  $\vec{e}_{1-6}$  e  $\vec{e}_{7-14}$ , respectivamente, devido à diferença das distâncias encontradas entre as células, cuja relação é justamente  $\sqrt{3}$ .

**Lattice D3Q19.** Outro modelo de *lattice* cúbico denominado D3Q19 utiliza as direções diagonais complementares do modelo D3Q15. Este modelo possui 18 possibilidades de movimento não-nulas, conforme ilustrado na Fig. 3.9 e duas velocidades características  $v$  e  $\sqrt{2}v$  associadas às direções  $\vec{e}_{1-6}$  e  $\vec{e}_{7-18}$ , respectivamente. Mais especificamente, as direções de movimento permitidas por este *lattice* são

$$\begin{aligned}
\vec{e}_0 &= (0, 0, 0), & \vec{e}_1 &= (1, 0, 0)v, & \vec{e}_2 &= (0, 1, 0)v, \\
\vec{e}_3 &= (-1, 0, 0)v, & \vec{e}_4 &= (0, -1, 0)v, & \vec{e}_5 &= (0, 0, -1)v, \\
\vec{e}_6 &= (0, 0, 1)v, & \vec{e}_7 &= (1, 1, 0)v, & \vec{e}_8 &= (-1, 1, 0)v, \\
\vec{e}_9 &= (-1, -1, 0)v, & \vec{e}_{10} &= (1, -1, 0)v, & \vec{e}_{11} &= (1, 0, -1)v, \\
\vec{e}_{12} &= (0, 1, -1)v, & \vec{e}_{13} &= (-1, 0, -1)v, & \vec{e}_{14} &= (0, -1, -1)v, \\
\vec{e}_{15} &= (1, 0, 1)v, & \vec{e}_{16} &= (0, 1, 1)v, & \vec{e}_{17} &= (-1, 0, 1)v, \\
\vec{e}_{18} &= (0, -1, 1)v.
\end{aligned} \tag{3.26}$$

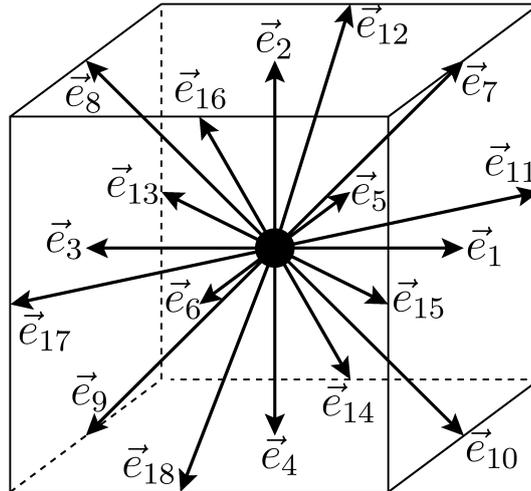


Figura 3.9: Modelo de *lattice* de D3Q19, com 18 velocidades não nulas.

As constantes de simetria deste *lattice*, tais que sejam satisfeitas as Eqs. 3.1,

são

$$C_0 = 24, \quad C_2 = 12, \quad C_4 = 4 \quad (3.27)$$

e os pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio (Eq. (2.52))

são

$$\omega_0 = \frac{1}{9}, \quad \omega_{1-6} = \frac{1}{18}, \quad \omega_{7-18} = \frac{1}{36}. \quad (3.28)$$

**Lattice D3Q27.** Finalmente, unindo as direções presentes nos *lattices* D3Q15 (Eq. (3.23)) e D3Q19 (Eq. (3.26)) chegamos ao modelo de *lattice* de 26 velocidades não nulas D3Q27, representado na Fig. 3.10. Aqui há três velocidades características, que são  $v$ ,  $\sqrt{2}v$  e  $\sqrt{3}v$  associadas às correspondentes direções, da mesma forma que nos modelos anteriores. Além disso, as direções de movimento são enumeradas como:

$$\begin{aligned} \vec{e}_0 &= (0, 0, 0), & \vec{e}_1 &= (1, 0, 0)v, & \vec{e}_2 &= (0, 1, 0)v, \\ \vec{e}_3 &= (-1, 0, 0)v, & \vec{e}_4 &= (0, -1, 0)v, & \vec{e}_5 &= (0, 0, -1)v, \\ \vec{e}_6 &= (0, 0, 1)v, & \vec{e}_7 &= (1, 1, 0)v, & \vec{e}_8 &= (-1, 1, 0)v, \\ \vec{e}_9 &= (-1, -1, 0)v, & \vec{e}_{10} &= (1, -1, 0)v, & \vec{e}_{11} &= (1, 0, -1)v, \\ \vec{e}_{12} &= (0, 1, -1)v, & \vec{e}_{13} &= (-1, 0, -1)v, & \vec{e}_{14} &= (0, -1, -1)v, \\ \vec{e}_{15} &= (1, 0, 1)v, & \vec{e}_{16} &= (0, 1, 1)v, & \vec{e}_{17} &= (-1, 0, 1)v, \\ \vec{e}_{18} &= (0, -1, 1)v, & \vec{e}_{19} &= (1, 1, -1)v, & \vec{e}_{20} &= (-1, 1, -1)v, \\ \vec{e}_{21} &= (-1, -1, -1)v, & \vec{e}_{22} &= (1, -1, -1)v, & \vec{e}_{23} &= (1, 1, 1)v, \\ \vec{e}_{24} &= (-1, 1, 1)v, & \vec{e}_{25} &= (-1, -1, 1)v, & \vec{e}_{26} &= (1, -1, 1)v. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Suas constantes de simetria, tais que as Eqs. 3.1 sejam válidas, são

$$C_0 = 19, \quad C_2 = 9, \quad C_4 = 3 \quad (3.30)$$

e os pesos utilizados no cálculo da distribuição de equilíbrio (Eq. (2.52))

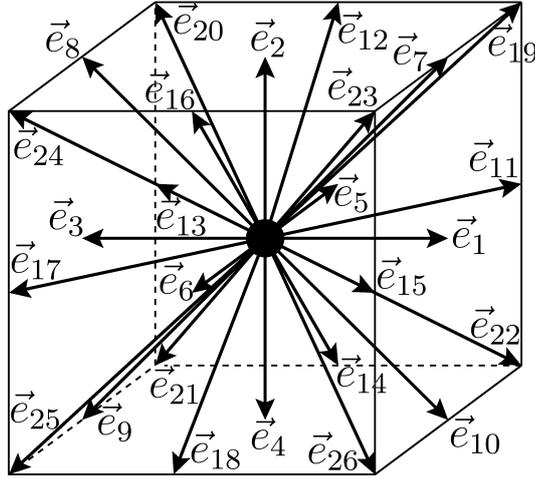


Figura 3.10: Modelo de *lattice* de  $D3Q27$ , com 26 velocidades não nulas.

são

$$\omega_0 = \frac{8}{27}, \quad \omega_{1-6} = \frac{2}{27}, \quad \omega_{7-18} = \frac{1}{54}, \quad \omega_{19-26} = \frac{1}{216}. \quad (3.31)$$

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. (2006), Artoli et al. (2007) e He et al. (2008 (in press))). Segundo Keating et al. (2007), ao comparar os resultados obtidos em simulações numéricas a partir dos três *lattices* aqui apresentados, foram encontrados indicativos de diferenças pequenas entre os resultados, especialmente para números de Reynolds altos. 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 acima.

A equação de equilíbrio incompressível (Eq. (2.52)) para o *lattice* escolhido  $D3Q19$  fica descrita por:

$$f_i^{\text{eq}} = \omega_i \left\{ \rho + \rho_0 \left[ 3 \frac{(\vec{e}_i \cdot \vec{u})}{v^2} + \frac{9 (\vec{e}_i \cdot \vec{u})^2}{2 v^4} - \frac{3 (\vec{u} \cdot \vec{u})}{2 v^2} \right] \right\}, \quad i = 0, \dots, 18, \quad (3.32)$$

onde, os pesos  $\omega_i$  são dados pela Eq. (3.28) e as direções de movimento  $\vec{e}_i$  pela Eq. (3.26).

Para apresentar uma exposição mais clara e sucinta dos principais tópicos desta subseção, em forma de resumo, montamos a Tabela 3.1 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 (Eq. (2.52)) dos *lattices* apresentados.

velocid. (Nº)	$\vec{e}_i$ 's	<i>D3Q15</i>	<i>D3Q19</i>	<i>D3Q27</i>
parada (1)	(0,0,0)	$\omega_0 = 2/9$	$\omega_0 = 1/9$	$\omega_0 = 8/27$
$v$ (6)	$(\pm 1, 0, 0)v, \dots$	$\omega_{1-6} = 1/9$	$\omega_{1-6} = 1/18$	$\omega_{1-6} = 2/27$
$\sqrt{2}v$ (12)	$(\pm 1, \pm 1, 0)v, \dots$	–	$\omega_{7-18} = 1/36$	$\omega_{7-18} = 1/54$
$\sqrt{3}v$ (8)	$(\pm 1, \pm 1, \pm 1)v$	$\omega_{7-15} = 1/72$	–	$\omega_{19-27} = 1/216$

Tabela 3.1: Sumário das informações necessárias para a implementação dos modelos de *lattice* tridimensionais apresentados.

### 3.2.2 Condições de contorno de velocidade

Com respeito às condições de contorno do tipo velocidade, as mesmas técnicas que foram explicadas para o caso 2D (periódico, *bounce back*, colisão na célula e esquema de interpolação) podem ser estendidas para problemas em 3D. Assim sendo, nesta seção nos limitaremos a apresentar o caso usado no presente trabalho, que é o método de interpolação.

Como ocorre no modelo 2D, o esquema de interpolação possibilita manipular as equações de forma a representar exatamente o local correspondente à condição de contorno, o que representa um ganho considerável quando se lida com superfícies curvas. Logo, este é um esquema de segunda ordem, como no caso 2D.

Da mesma forma que no caso 2D, definimos as células de parede como aquelas que possuem ao menos uma de suas conexões com outras células cruzada pela superfície que representa o contorno. Assim sendo, a idéia básica consiste em estimar as  $f_i$ 's destas células de parede a partir de uma interpolação linear ou quadrática entre o valor dado pela condição de contorno na intersecção e

informações da(s) célula(s) do interior do domínio conectada(s). A implementação não acarreta maiores complicações conceituais do que as vistas no caso 2D. Dado que uma figura esquemática do problema no caso 3D pode se tornar confusa, sugere-se ao leitor recorrer à Seção 3.1.2. A extensão para 3D é imediata, podendo-se calcular os valores de interesse através das equações (3.13)–(3.17). Vale a pena frisar que agora as frações de distâncias denominadas  $\Delta_i$  devem ser calculadas no espaço tridimensional.

A implementação deste tipo de modelo é mais complexa que a dos demais modelos citados, pois temos que identificar os pontos em que a superfície de contorno tem intersecção com as conexões do *lattice*. No caso 3D esta metodologia torna-se consideravelmente mais complexa do que os métodos tipo bounce back, motivo pelo qual a maior parte da literatura especializada tem-se voltado para estas metodologias mais simples em detrimento de uma perda de acurácia na representação dos fenômenos próximos dos contornos.

### 3.2.3 Condições de contorno de pressão

Nesta subseção, apresentaremos o modelo de condição de contorno de pressão do tipo colisão na célula escolhido para ser implementado nas simulações correspondentes a problemas em três dimensões. Neste caso, vale o mesmo comentário feito na Seção 3.1.3, sobre a variação presente na massa específica quando se deseja impor, por exemplo, diferentes valores de pressão sobre diferentes contornos.

O modelo de condição de contorno de pressão escolhido foi proposto por Zou e He (1997). Este modelo exige a imposição da pressão e, neste caso 3D, de duas das componentes da velocidade nas células de contorno respectivas. Em particular, em algumas simulações de escoamentos realizadas em um canal com eixo longitudinal na direção  $\vec{x}$  é razoável impor velocidade nula nas direções  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$  nos extremos do canal (velocidade nula nos planos transversais). Neste modelo, estimam-se as  $f_i$ 's e a componente da velocidade desconhecidas através da equação de conservação de

massa (1 equação):

$$\rho(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{\ell} f_i(x, y, z, t), \quad (3.33)$$

onde  $\ell$  representa o número de direções não nulas do *lattice*, além das equações de conservação de quantidade de movimento (3 equações), onde é imposta a velocidade da fronteira:

$$\rho_0 \vec{u}(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^{\ell} f_i(x, y, z, t) \vec{e}_i, \quad (3.34)$$

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).

Os motivos que nos levaram a escolher este modelo são os mesmos que no caso 2D, isto é, o modelo é de segunda ordem, preserva a massa no contorno e é adequado para contornos planos.

Aos efeitos de ilustrar a metodologia, tomemos como exemplo a imposição de uma pressão fixa ( $p$ ) e de velocidade nula nas direções  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$  (denominadas  $u_y$  e  $u_z$ ) na extremidade esquerda e plana de um canal horizontal (com eixo longitudinal na direção  $\vec{x}$ ). Usando o *lattice*  $D3Q19$ , 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 massa específica (denominada  $\rho = p/c_s^2$ ) 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  $\vec{x}$  (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 passos:

a) usamos a equação da conservação de massa (3.33):

$$\begin{aligned} f_1 + f_7 + f_{10} + f_{11} + f_{15} = \rho - (f_0 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_8 + f_9 + f_{12} \\ + f_{13} + f_{14} + f_{16} + f_{17} + f_{18}) \end{aligned} \quad (3.35)$$

e a equação da conservação da quantidade de movimento (3.34), na direção  $\vec{x}$ :

$$f_1 + f_7 + f_{10} + f_{11} + f_{15} = \rho_0 \frac{u_x}{v} + (f_3 + f_8 + f_9 + f_{13} + f_{17}) \quad (3.36)$$

para calcular  $u_x$ , ficando

$$u_x = \frac{v}{\rho_0} \{ \rho - [f_0 + f_2 + f_4 + f_5 + f_6 + f_{12} + f_{14} + f_{16} + f_{18} + 2(f_3 + f_8 + f_9 + f_{13} + f_{17})] \}; \quad (3.37)$$

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

$$f_1 = f_3 + (f_1^{\text{ne}} - f_3^{\text{ne}}) = f_3 + \frac{1}{3} \rho_0 \frac{(\vec{e}_1 \cdot \vec{u})}{v^2}; \quad (3.38)$$

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

$$\begin{aligned} f_7 &= f_9 + (f_7^{\text{ne}} - f_9^{\text{ne}}) = f_9 + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\vec{e}_7 \cdot \vec{u})}{v^2}, \\ f_{10} &= f_8 + (f_{10}^{\text{ne}} - f_8^{\text{ne}}) = f_{10} + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\vec{e}_{10} \cdot \vec{u})}{v^2}, \\ f_{11} &= f_{17} + (f_{11}^{\text{ne}} - f_{17}^{\text{ne}}) = f_{11} + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\vec{e}_{11} \cdot \vec{u})}{v^2}, \\ f_{15} &= f_{13} + (f_{15}^{\text{ne}} - f_{13}^{\text{ne}}) = f_{15} + \frac{1}{6} \rho_0 \frac{(\vec{e}_{15} \cdot \vec{u})}{v^2}; \end{aligned} \quad (3.39)$$

d) calculamos uma massa específica auxiliar como

$$\rho_{\text{aux}} = \sum_{i=0}^{18} f_i \quad (3.40)$$

e, assim, adicionamos a massa necessária para que tenhamos conservação de massa (Eq. (3.33)), ou seja,

$$f_i = f_i + \frac{(\rho - \rho_{\text{aux}})}{4}, \quad i = 7, 10, 11, 15; \quad (3.41)$$

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

$$\vec{u}_{\text{aux}} = \text{proj}_{YZ} \left( \sum_{i=1}^{18} f_i \vec{e}_i \right) \quad (3.42)$$

e adicionamos o momento necessário para que haja conservação da quantidade de movimento (Eq. (3.34)) nas direções  $\vec{y}$  e  $\vec{z}$ , isto é,

$$f_i = f_i + \rho_0 \frac{[\vec{e}_i \cdot (\vec{u} - \vec{u}_{\text{aux}})]}{2v^2}, \quad i = 7, 10, 11, 15, \quad (3.43)$$

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 para as demais extremidades ocorre de maneira semelhante.

### 3.3 Aspectos específicos da implementação numérica

Nesta seção discutiremos questões específicas da implementação numérica do LBM, como, por exemplo: técnicas para melhorar a solução obtida nas simulações através da mudança de parâmetros do modelo, maneiras de reduzir erros de compressibilidade (produto de uma inadequada escolha dos parâmetros numéricos do modelo), uma breve discussão sobre condições de parada, entre outros.

No momento da escolha dos parâmetros de uma simulação temos que fazer um balanço entre o custo da simulação e a precisão esperada de sua solução. Para obter o resultado desejado em uma simulação via LBM é necessário escolher (calcular) os parâmetros adequadamente, e posteriormente modificar os mesmos, se necessário, para melhorar a solução. Este processo deve ser seguido até se ter um conhecimento completo da natureza das diferentes fontes de erro e inacurácia próprias do modelo. Com este conhecimento, tais passos deverão ser contornados em posteriores estudos. Contudo, o objetivo desta seção, assim como o de vários dos exemplos que serão apresentados no Capítulo 4, consiste em desvendar as características do LBM via experimentos numéricos.

Em qualquer simulação numérica realizada pelo LBM é necessário, em uma primeira instância, tomar cuidado para que o valor do parâmetro  $\tau$ , intrínseco do modelo (ver Seção 2.3 no Cap. 2), não seja muito próximo do seu valor mínimo 0,5, pois podem ocorrer instabilidades numéricas. De fato, um valor igual a 0,5 indicaria viscosidade do fluido identicamente nula, situação não contemplada no modelo e que leva a um problema de transporte puro. Evidentemente, valores menores a 0,5 indicariam viscosidades negativas, o que estaria em desacordo com as leis da termodinâmica. Viu-se na Seção 2.4, que para o caso de fluidos incompressíveis, este parâmetro é definido a partir de parâmetros físicos do problema e de parâmetros numéricos próprios do *lattice* (ver Eq. (2.55)), através da equação

$$\tau = 3\nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{1}{2}, \quad (3.44)$$

onde,  $\nu$  é a viscosidade cinemática do fluido,  $\Delta t$  é o passo no tempo e  $\Delta x$  é o espaçamento do *lattice*. Não foi encontrado na literatura pesquisada um valor mínimo para  $\tau$  que mantenha a simulação numericamente estável, pois a estabilidade da simulação não depende somente de  $\tau$ , como veremos a seguir. Com efeito, as instabilidades numéricas começam a se fazer presentes quando o valor de  $\tau$  fica próximo de 0,5, sendo, portanto, uma instabilidade problema-dependente. Repare que o espaçamento  $\Delta x$  é inversamente proporcional ao tamanho do *lattice*, pois ao aumentar o número de células do *lattice* estaremos reduzindo a distância entre as mesmas.

Foi visto na Seção 2.4 que para resolvermos as equações de Navier-Stokes incompressíveis, através do modelo escolhido, é necessário que o número de Mach (definido por  $M = u_{max}/c_s$ , onde  $c_s = \Delta x/(\sqrt{3}\Delta t)$  é a velocidade do som e  $u_{max}$  é a velocidade máxima que o fluido atinge) seja pequeno, na prática utiliza-se  $M < 0,15$  (He e Luo (1997)). Na análise assintótica, estudada na Seção 2.4, mostrou-se que alguns termos omitidos para que possamos aproximar a equação de Navier-Stokes são de ordem  $\mathcal{O}(M^2)$ . Logo, uma simulação via LBM pode apresentar instabilidades numéricas ou desvios significativos da solução real do problema no

caso em que  $M$  for grande. Na Subseção 4.2.1 apresentamos alguns testes da influência do número de Mach nos resultados da simulação do escoamento de um fluido incompressível em uma cavidade cúbica.

De forma ilustrativa, na simulação de problemas transientes deve-se assegurar que as variações temporais das condições de contorno (em velocidade e pressão) ocorram de maneira muito mais lenta que a propagação das informações no *lattice* (associada à velocidade das partículas), para evitar que surjam efeitos de compressibilidade indesejados. Mais especificamente, para uma simulação que apresente período de oscilação característico igual à  $T$ , o qual poderia ser o período de oscilação da condição de contorno, devemos assegurar que

$$T \gg \frac{L}{c_s}, \quad \text{ou} \quad T_r := \frac{T}{(L/c_s)} \gg 1, \quad (3.45)$$

onde,  $L$  é o comprimento físico característico do problema e  $T_r$  é a relação entre o período característico e o tempo que leva uma dada informação para cruzar uma longitude  $L$ . No trabalho de He e Luo (1997), foi feita a simulação do escoamento de Womersley, e com os dados fornecidos nessa referência constatamos que foi satisfeita a relação  $T_r = 50$ , onde foram obtidos resultados com boa precisão e efeitos de compressibilidade praticamente imperceptíveis. Na Subseção 4.2.2 são apresentados resultados conclusivos referentes aos valores de  $T_r$  testados nas simulações do escoamento de Womersley em 3D. Nestes casos, mostramos o aparecimento de erros de compressibilidade quando esta proporção se torna pequena. Ao mesmo tempo, quantificamos e caracterizamos tal proporção em função dos erros de compressibilidade decorrentes da simulação numérica.

Seguindo estas orientações sobre o número de Mach ( $M$ ) e sobre a relação entre o período característico e a propagação das informações ( $T_r$ ), as únicas questões das quais resta cuidar é que o valor do parâmetro  $\tau$  não esteja muito próximo do valor limite 0,5, além do fato da discretização espacial ser suficiente para capturar os gradientes espaciais da solução. Estes dois últimos requisitos estão associados entre si, pois ao aumentarmos o tamanho do *lattice* estaremos reduzindo

o valor de  $\Delta x$  de forma linear e aumentando o parâmetro  $\tau$  de forma quadrática (ver Eq. (3.44)). Ao mesmo tempo, quando aumentamos o *lattice* o erro causado pela discretização diminui e os gradientes espaciais de velocidade mais altos passam a ser melhor representados. Porém, o custo computacional de se aumentar o tamanho do *lattice*, através da redução do valor de  $\Delta x$  em uma proporção  $n$ , mantendo  $T_r$  fixo, é bastante alto, sendo de ordem  $\mathcal{O}(n^3)$  em simulações bidimensionais e de ordem  $\mathcal{O}(n^4)$  nas tridimensionais, como pode ser visto na Tabela 3.2. A alternativa menos custosa para se aumentar a acurácia da solução é reduzir o valor de  $\Delta t$  e, com isso, reduzir  $M$  e aumentar  $T_r$ . Porém, ao reduzir  $\Delta t$  também reduzimos  $\tau$  e isto pode levar a instabilidades numéricas. Apresentamos na Tabela 3.2 as modificações que sofrem os parâmetros do modelo ao calibrarmos a simulação através das reduções do passo de tempo ( $\Delta t$ ) e do espaçamento ( $\Delta x$ ), em um fator  $n$ , para 2D e 3D. Nesta tabela, o símbolo (') indica o novo parâmetro,  $N$  representa o tamanho do *lattice* retangular (em número de células),  $\tau_r = \tau - 0,5$ ,  $C$  representa o custo computacional de cada período simulado e  $(\cdot)$  indica o caso tridimensional (exibido apenas quando este for diferente do bidimensional). Para fazer o cálculo do custo relativo, levamos em conta o número de células do *lattice* e quantos passos de deslocamento das distribuições são realizados durante um período, ou seja,

$$\frac{C'}{C} = (N'/N) \frac{(T'/\Delta t')}{(T/\Delta t)}. \quad (3.46)$$

Veja nesta tabela que o fato de reduzir o espaçamento do *lattice* leva a consequências indesejadas, já que aumenta o número de Mach e reduz o valor de  $T_r$ . Por esta causa, usualmente precisa-se de uma redução conjunta do passo de tempo e do espaçamento do *lattice*.

Além do fato de se ter uma simulação adequadamente calibrada, de acordo com os pontos levantados nos parágrafos anteriores, também é necessário que seja escolhida uma boa condição de parada. Isto é, uma condição de parada que estabeleça quando um sistema chegou ao estado estacionário ou quando o mesmo

Técnica	$N'/N$	$\Delta x'/\Delta x$	$T'_r/T_r$	$\tau'_r/\tau_r$	$M'/M$	$C'/C$
Reduzir $\Delta t$	1	1	$n$	$1/n$	$1/n$	$n$ ( $n$ )
Reduzir $\Delta x$	$n^2$ ( $n^3$ )	$1/n$	$1/n$	$n^2$	$n$	$n^2$ ( $n^3$ )
Reduzir $\Delta t$ e $\Delta x$	$n^2$ ( $n^3$ )	$1/n$	1	$n$	1	$n^3$ ( $n^4$ )

Tabela 3.2: Técnicas para a calibração da simulação através da mudança de parâmetros e seus custos computacionais.

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:

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_l = \frac{\sum_{i=1}^N [|\vec{A}_i - \vec{B}_i| / |\vec{B}_i|]}{N} \quad (3.47)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l^2} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N [(\vec{A}_i - \vec{B}_i)^2 / \vec{B}_i^2]}}{N} \quad (3.48)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l^\infty} = \frac{\sum_{i=1}^N |\vec{A}_i - \vec{B}_i|}{\max_i(|\vec{B}_i|)N} \quad (3.49)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l/l} = \frac{\sum_{i=1}^N |\vec{A}_i - \vec{B}_i|}{\sum_{i=1}^N |\vec{B}_i|} \quad (3.50)$$

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_{l^2/l^2} = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^N (\vec{A}_i - \vec{B}_i)^2}}{\sum_{i=1}^N \vec{B}_i^2} \quad (3.51)$$

onde,  $\vec{A}_i^2 = (\vec{A}_i \cdot \vec{A}_i)$  e  $\vec{A}_i$  e  $\vec{B}_i$  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 (3.49)–(3.51). As normas

com termos quadráticos, (3.48) e (3.51), apresentam a vantagem de ter custo computacional menor que as demais, pois apenas uma raiz quadrada é calculada.

### 3.4 Informações complementares

Nesta seção serão expostas informações sobre a implementação computacional do LBM realizada neste trabalho, incluindo um pseudo-código do algoritmo utilizado. Esta seção foi criada visando-se atingir dois objetivos principais: destacar os principais passos de uma implementação do LBM através do pseudo-código apresentado e expor uma forma de otimizar o uso dos recursos de memória e capacidade de processamento disponíveis através de uma escolha adequada de estruturas de dados e da paralelização do algoritmo.

A linguagem de programação utilizada na implementação do método foi FORTRAN90 e o compilador foi o Intel(R) Fortran Compiler 11.0 para Linux. A escolha do compilador foi feita por este ser um compilador que oferece confiabilidade, fornece otimizações específicas para processadores Intel(R) e principalmente por ele aceitar a paralelização do código através da API (Interface de Programação de Aplicativos) denominada OpenMP, a qual se baseia no uso de memória compartilhada. O hardware utilizado nas simulações foram máquinas com um processador do modelo Intel(R) Core(TM)2 Quad Q9550 (com quatro núcleos de processamento) com frequência de 2.83GHz e com 8GB de memória RAM.

#### 3.4.1 Pseudo-código

De forma sucinta será exposto a seguir o pseudo-código de uma implementação do LBM, no qual destacamos os principais passos do método. 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  $t_1$  e  $t_2$ , sendo  $t_2 = t_1 + \Delta t$ . Logo, estas variáveis ( $f_i$ ,  $f_v$  e  $f_p$ ) possuem três índices: o primeiro indica o instante de tempo ( $t_1$  ou  $t_2$ ), 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,  $f_i(t_1, 5, 7)$  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  $t_1$ .

Abaixo apresentamos o pseudo-código de uma implementação do LBM, no qual omitiu-se os dois últimos índices das variáveis  $f_i$ ,  $f_v$  e  $f_p$ , ou seja, leia-se  $f_i(a)$ ,  $f_v(a)$  e  $f_p(a)$  como  $f_i(a, 1:N_i, 1:L)$ ,  $f_v(a, 1:N_v, 1:L)$  e  $f_p(a, 1:N_p, 1:L)$ , respectivamente. Onde,  $L$  é o número de direções do *lattice* e  $N_i$ ,  $N_v$  e  $N_p$  indicam o número de células internas, de fronteira com condição de contorno de velocidade e de fronteira com condição de contorno de pressão, respectivamente. As sentenças iniciadas por “!” devem ser consideradas como comentários.

Pseudo-código:

```
!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))
!Para simplificar o algoritmo zeram-se as distribuições no instante t2
fi(t2)=0; fv(t2)=0; fp(t2)=0
!Inicia-se a iteração de colisões e propagações das distribuições
faca enquanto(nao(condicao_de_parada(fi(t1),fi(t2),fp(t1),fp(t2),fv(t1),
fv(t2))))
!Atualização das distribuições no instante de tempo t1
se (nao(fi(t2)=0)) entao atualizar_t1(fi(t1),fi(t2),fp(t1),fp(t2),
fv(t1),fv(t2))
!Colisões das distribuições que se encontram na mesma célula
```

```

colisao_i(fi(t1))
colisao_v(fv(t1))
colisao_p(fp(t1))
!Propagação das distribuições
propagacao_i(fi(t2))
propagacao_v(fv(t2))
propagacao_p(fp(t2))
fim faca
!Impressão dos resultados desejados
imprimir_resultados(fi(t1),fi(t2),fp(t1),fp(t2),fv(t1),fv(t2))

```

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 função `condicao_de_parada()`) pode ser baseada, por exemplo, na variação do campo de velocidade, conforme exposto na Seção 3.3. A função `atualizar_t1()` consiste em copiar as distribuições armazenadas no instante `t2` para o instante `t1`.

As subrotinas de colisão (`colisao_i(fi(t1))`) e propagação (`propagacao_i(fi(t2))`) das distribuições nas células internas representam uma divisão da equação de Lattice-Boltzmann (ver Eq. (2.41)) em duas etapas, conforme:

$$f_i^*(\vec{x}, t) = f_i(\vec{x}, t) + \frac{1}{\tau} [f_i^{\text{eq}}(\vec{x}, t) - f_i(\vec{x}, t)], \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (\text{colisão}) \quad (3.52)$$

e

$$f_i(\vec{x} + \Delta x \vec{e}_i, t + \Delta t) = f_i^*(\vec{x}, t), \quad i = 1, \dots, \ell, \quad (\text{propagação}), \quad (3.53)$$

onde, define-se  $t1 = t$  e  $t2 = t + \Delta t$  a cada iteração do processo e a distribuição  $f_i^*(\vec{x}, t)$  representa um termo auxiliar, o qual pode ser mapeado no algoritmo sobre a distribuição  $f_i(\vec{x}, t)$  para economia de memória. Mais especificamente, podemos descrever a subrotina de colisão nas células internas como:

```

subrotina colisao_i(Fi(t1,1:Ni,1:L))
    !Para todas as células internas
    faca desde i=1 ate i=Ni
        !Calcula-se a massa específica e a velocidade
        rho = 0
        u(1:D) = 0
        faca desde j=1 ate j=L
            rho = rho + Fi(t1,i,j)
            u(1:D) = u(1:D) + e(j,1:D)*Fi(t1,i,j)/rho_0
        fim faca
        !Realiza-se a colisão das distribuições de partículas
        faca desde j=1 ate j=L
            Fi(t1,i,j) = (1-1/tau)*Fi(t1,i,j) + 1/tau*Feq(rho,u,j)
        fim faca
    fim faca
fim da subrotina

```

Na subrotina acima as variáveis  $\tau$ ,  $\rho_0$  e  $e(j,k)$  indicam as constantes  $\tau$ ,  $\rho_0$  e  $[\vec{e}_j]_k$ , respectivamente, e as variáveis  $u$  (D-dimensional) e  $\rho$  representam a velocidade e a massa específica locais do fluido. Ainda, a função  $Feq(\rho, u, j)$  calcula a distribuição de equilíbrio associada à direção  $\vec{e}_j$  a partir da célula onde o fluido tem velocidade local  $u$  e massa específica local  $\rho$ , através da equação (2.52). Repare que as distribuições resultantes da colisão sobrescrevem as distribuições anteriores a colisão, visando economia de memória.

E a subrotina de propagação nas células internas pode ser descrita como:

```

subrotina propagacao_i(Fi(t2,1:Ni,1:L))
    !Para todas as células internas
    faca desde i=1 ate i=Ni
        !Copia-se as distribuições advindas de células vizinhas
        faca desde j=1 ate j=L
            Fi(t2,i,j) = f_vizinha(i,direcao_oposta(j),t1,j)
        fim faca
    fim faca

```

```

        fim faca
    fim faca
fim da subrotina

```

Onde, na subrotina acima a função `direcao_oposta(j)` retorna o índice da direção do *lattice* oposta a direção indicada por  $j$  e a função `f_vizinha(i,direcao_oposta(j),t1,j)` retorna a distribuição de partículas movendo-se na direção  $\vec{e}_j$  a partir da célula vizinha à célula  $i$  na direção indicada pelo índice `direcao_oposta(j)` no instante de tempo  $t1$ .

Por outro lado, as subrotinas de colisão (`colisao_v(fv(t1))` e `colisao_p(fp(t1))`) e propagação (`propagacao_v(fv(t2))` e `propagacao_p(fp(t2))`) das distribuições nas células de fronteira são baseadas nestas mesmas equações acima (Eqs. (3.52) e (3.53)) porém podem sofrer modificações para imposição das condições de contorno de acordo com o modelo de representação escolhido, conforme explicado nas Seções 3.1 e 3.2 deste capítulo.

Em particular, para os modelos de representação de condições de contorno em duas dimensões adotados neste trabalho (ver Subseções 3.1.2 e 3.1.3) podemos descrever as subrotinas de colisão e propagação da forma a seguir.

Na implementação da condição de contorno de velocidade adotada (do tipo interpolação, ver Subseção 3.1.2) a subrotina `colisao_v(fv(t1))` pode ser substituída pelo cálculo das distribuições que se deslocarão destas células para o interior na etapa de propagação, este cálculo é feito de acordo com as equações (3.13)–(3.17). Além disso, a subrotina `propagacao_v(fv(t2))` pode ser desconsiderada, visto que não faz sentido uma célula de fronteira deste tipo armazenar as distribuições que se direcionam a ela.

Já na implementação da condição de contorno de pressão adotada (do tipo colisão na célula, ver Subseção 3.1.3) a subrotina `colisao_p(fp(t1))` é equivalente à subrotina `colisao_i(fp(t1))`, ou seja, a etapa de colisão é igual à aplicada nas células interiores. E a subrotina `propagacao_p(fp(t2))` pode ser dividida em duas etapas. Na primeira ocorre um processo semelhante ao presente na subrotina

$\text{propagacao\_i}(f_i(t_2))$ , porém antes de se propagar uma distribuição verificamos se a mesma é proveniente de uma célula que faça parte do domínio tratado. A segunda parte desta subrotina consiste em calcular as distribuições de partículas desconhecidas (i.e., as que não tenham sido propagadas a partir de outras células na primeira etapa) através de equações obtidas da forma indicada na Subseção 3.1.3 (como exemplo ver Eq. (3.22)).

### 3.4.2 Otimizações do algoritmo

Apesar de não ser o foco deste trabalho, realizamos otimizações do algoritmo que viabilizaram muitas das simulações apresentadas no capítulo seguinte. As mesmas foram feitas visando-se obter o melhor aproveitamento dos recursos computacionais que dispusemos.

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 subrotina, otimizando o tempo de processamento.

Como segundo passo, resolvemos aproveitar a vantagem intrínseca do LBM de localidade (ver Seção 2.3) para realizar a paralelização do algoritmo. Esta foi feita visando-se aproveitar os múltiplos núcleos de processamento das máquinas que foram utilizadas. Sendo assim, as principais subrotinas do algoritmo foram paralelizadas com o uso da API OpenMP, a qual baseia-se no uso de memória compartilhada.

Conforme esperado, a paralelização dos principais trechos do algoritmo gerou uma redução no tempo de execução das simulação bastante significativa. Conforme pode-se observar na Figura 3.11, o ganho em termos de desempenho da simulação

com a paralelização foi maior que 95% por núcleo adicionado. Este cálculo foi feito comparando-se o tempo de execução da simulação com algoritmo não-paralelo e com algoritmo paralelizado.

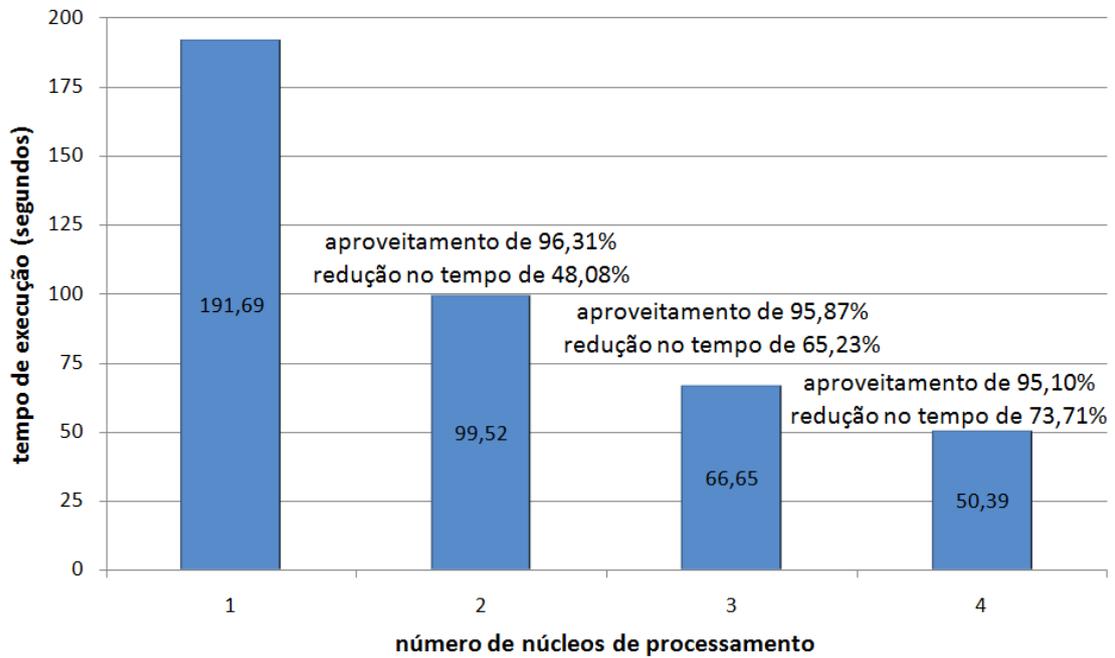


Figura 3.11: Tempo de execução de 1000 passos em uma simulação do problema da cavidade cúbica (ver Subseção 4.2.1) sobre um *lattice* tridimensional de tamanho  $50 \times 50 \times 50$ .

# Capítulo 4

## Resultados Numéricos

Neste capítulo serão examinadas as diversas implementações numéricas realizadas com os *lattices* e métodos para representação de condições de contorno escolhidos. Exploraremos aspectos relacionados ao desempenho e acurácia das simulações, informações estas que são extraídas de simulações de diversos problemas de escoamentos estacionários e transientes em duas e três dimensões.

### 4.1 Simulações em 2D

Nesta seção apresentaremos as implementações numéricas de três problemas típicos da dinâmica de fluidos incompressíveis, feitas para validar, verificar e estudar o modelo escolhido.

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.

Depois introduziremos o problema estacionário da cavidade quadrada, muito utilizado como caso de teste em dinâmica de fluidos incompressíveis, e faremos comparações dos resultados numéricos para diferentes valores do número de Reynolds com dados encontrados na literatura, através de análises do campo de velocidades.

E, 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 simulações, feitas com diferentes tamanhos de *lattice* e números 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 massa específica média  $\rho_0$  (definida em cada problema).

#### 4.1.1 Escoamento de Poiseuille

O escoamento em regime estacionário de um fluido incompressível ao longo de um canal retangular, com paredes impermeáveis e não-escorregadias, devido à diferença de pressão entre os extremos do canal é denominado escoamento de Poiseuille. O problema é ilustrado pela figura 4.1, onde  $p_{in}$  é a pressão mantida na extremidade esquerda e  $p_{out}$  na direita, optamos por  $p_{in} > p_{out}$ .

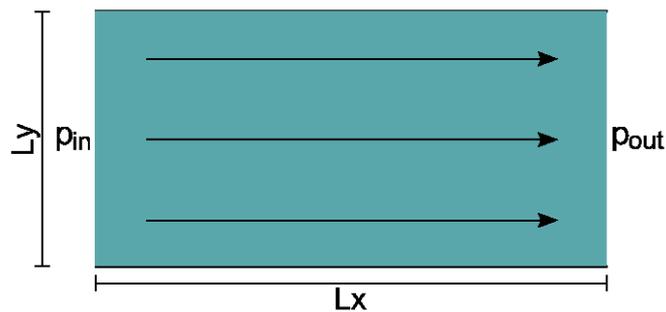


Figura 4.1: Ilustração do escoamento de Poiseuille.

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

$$\begin{aligned}
 u_x(x, y) &= \frac{\Delta p}{2\nu\rho} \frac{y}{L_y} \left(1 - \frac{y}{L_y}\right), \\
 u_y(x, y) &= 0, \\
 p(x, y) &= p_{in} + x\Delta p,
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

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

da velocidade, respectivamente. Veja que o escoamento corresponde-se com um perfil parabólico de velocidade na direção  $\vec{y}$ , sendo constante ao longo do canal e apresenta um decaimento linear da pressão na direção  $\vec{x}$ .

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

$$Re = L_y u_{max} / \nu, \quad (4.2)$$

onde,  $u_{max}$  corresponde à velocidade máxima obtida na equação (4.1).

Nas simulações numéricas implementamos as condições de contorno de pressão e de velocidade descritas no capítulo anterior para impor as pressões  $p_{in} = 1,001$  e  $p_{out} = 1$  e a velocidade nula nas paredes (ver Seção 3.1.2). Simulamos casos com três números de Reynolds diferentes 30, 130 e 330 em um canal com dimensões  $L_x = 2$  e  $L_y = 1$  e com massa específica 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  $\Delta x$  é o espaçamento e  $\Delta t$  o passo no tempo. Para cada valor do número de Reynolds realizamos a simulação sobre um tamanho de *lattice* inicial e depois fomos refinando este *lattice* para analisar a convergência do erro definido pela equação (3.47), mantendo sempre o espaçamento e o passo no tempo iguais entre si. 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 4.2 podemos ver o resultado da simulação numérica com um *lattice* de tamanho  $256 \times 128$  e número de Reynolds igual a 30 comparado com a solução exata do problema. Também expomos na Figura 4.2(b) um gráfico em escala  $\log_2 \times \log_2$  onde mostramos a convergência do erro a medida que refinamos o *lattice*. Este gráfico corresponde aos dados apresentados na Tabela 4.1. 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 4.2(c) e 4.2(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.

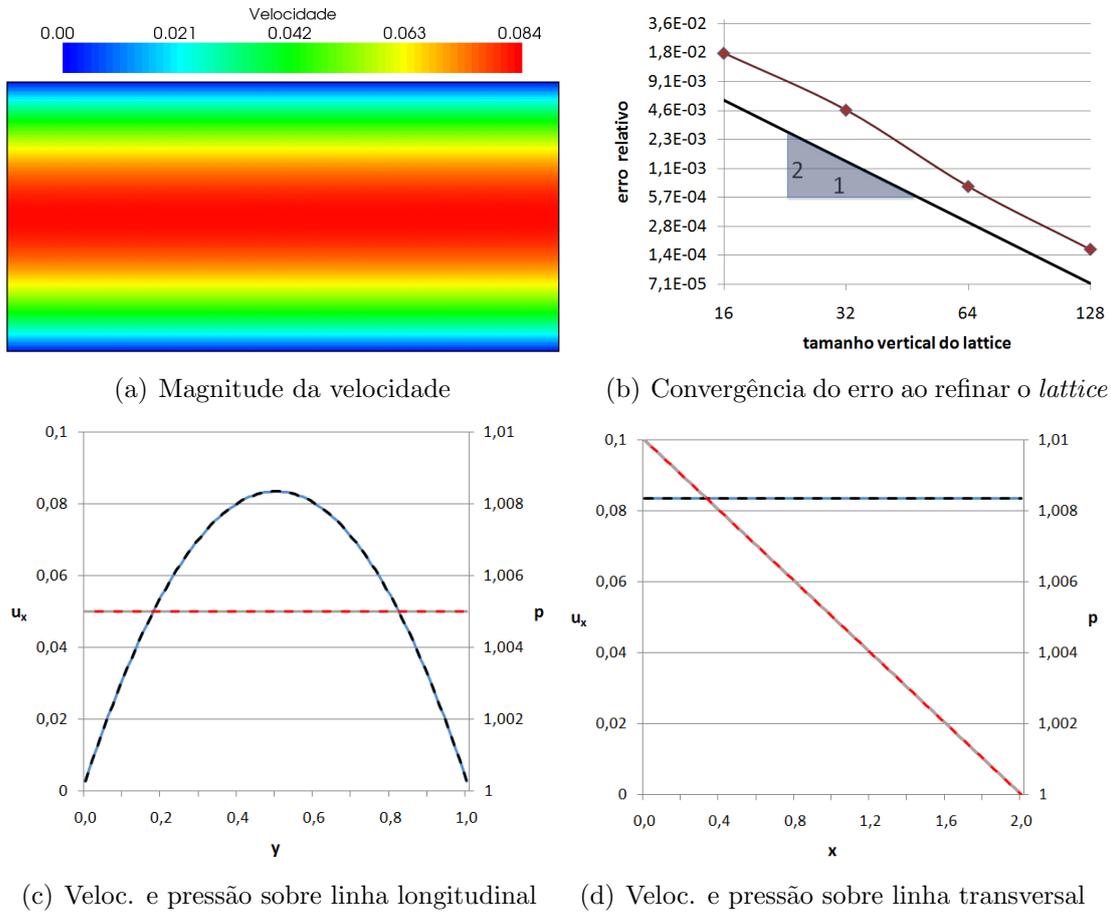


Figura 4.2: Comparações dos resultados da simulação do escoamento de Poiseuille com Reynolds 30 e *lattice*  $256 \times 128$  com a solução exata.

Nas simulações com números de Reynolds maiores que 30 também obtivemos bons resultados, conforme mostra a Tabela 4.1 com os erros relativos (ver Eq. (3.47)) ao comparar com a solução exata. Observamos também que a simulação com Reynolds 130 não alcançou convergência no *lattice* de tamanho  $32 \times 16$  e as simulações com Reynolds 330 também não o fizeram nos *lattices* de tamanhos  $32 \times 16$  e  $64 \times 32$ .

Reynolds \ <i>lattice</i>	$32 \times 16$	$64 \times 32$	$128 \times 64$	$256 \times 128$
30	$1.81 \times 10^{-2}$	$4.63 \times 10^{-3}$	$7.42 \times 10^{-4}$	$1.64 \times 10^{-4}$
130	instável	$5.58 \times 10^{-3}$	$1.37 \times 10^{-3}$	$2.16 \times 10^{-4}$
330	instável	instável	$1.57 \times 10^{-3}$	$3.47 \times 10^{-4}$

Tabela 4.1: Erros relativos na simulação do escoamento de Poiseuille.

#### 4.1.2 Cavidade quadrada

O problema da cavidade quadrada é amplamente utilizado para testar simulações numéricas da dinâmica de fluidos incompressíveis, com o objetivo de avaliar novos esquemas numéricos e de testar suas convergências. O problema, representado na Figura 4.3, consiste em uma cavidade quadrada com paredes impermeáveis e não-eskorregadias, 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.

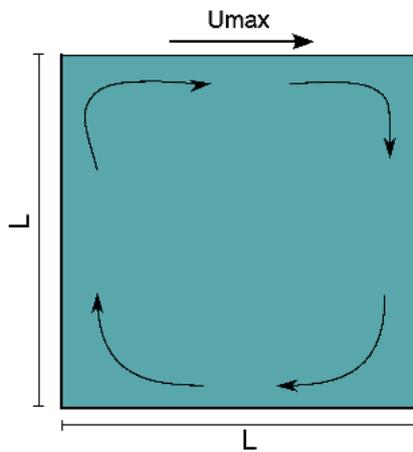


Figura 4.3: Ilustração do problema da cavidade quadrada.

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

$$Re = \frac{LU_{max}}{\nu}, \quad (4.3)$$

onde,  $\nu$  é a viscosidade cinemática do fluido (ver Eq.(2.82)).

Simulamos diferentes casos deste problema para os números de Reynolds 100, 400 e 1000 em *lattices* de tamanhos  $64 \times 64$ ,  $128 \times 128$  e  $256 \times 256$ . 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 e adotamos a massa específica 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 em multi-grid fortemente implícito acoplado (CSI-MG) (Ghia et al. (1982)).

Na Figura 4.4 (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 referenciarmos aos resultados das simulações com *lattices* de tamanho  $64 \times 64$ ,  $128 \times 128$  e  $256 \times 256$ , 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 4.4 plotamos algumas das linhas de corrente dos resultados obtidos com o *lattice* de tamanho  $256 \times 256$  para ilustrar a estrutura do escoamento estacionário do fluido.

Como pode-se observar, para número de Reynolds 100 os resultados são bem próximos dos de Ghia para todos os tamanhos de *lattice* testados e para Reynolds 400 e 1000 podemos observar que os resultados se aproximam consistentemente dos de Ghia a 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

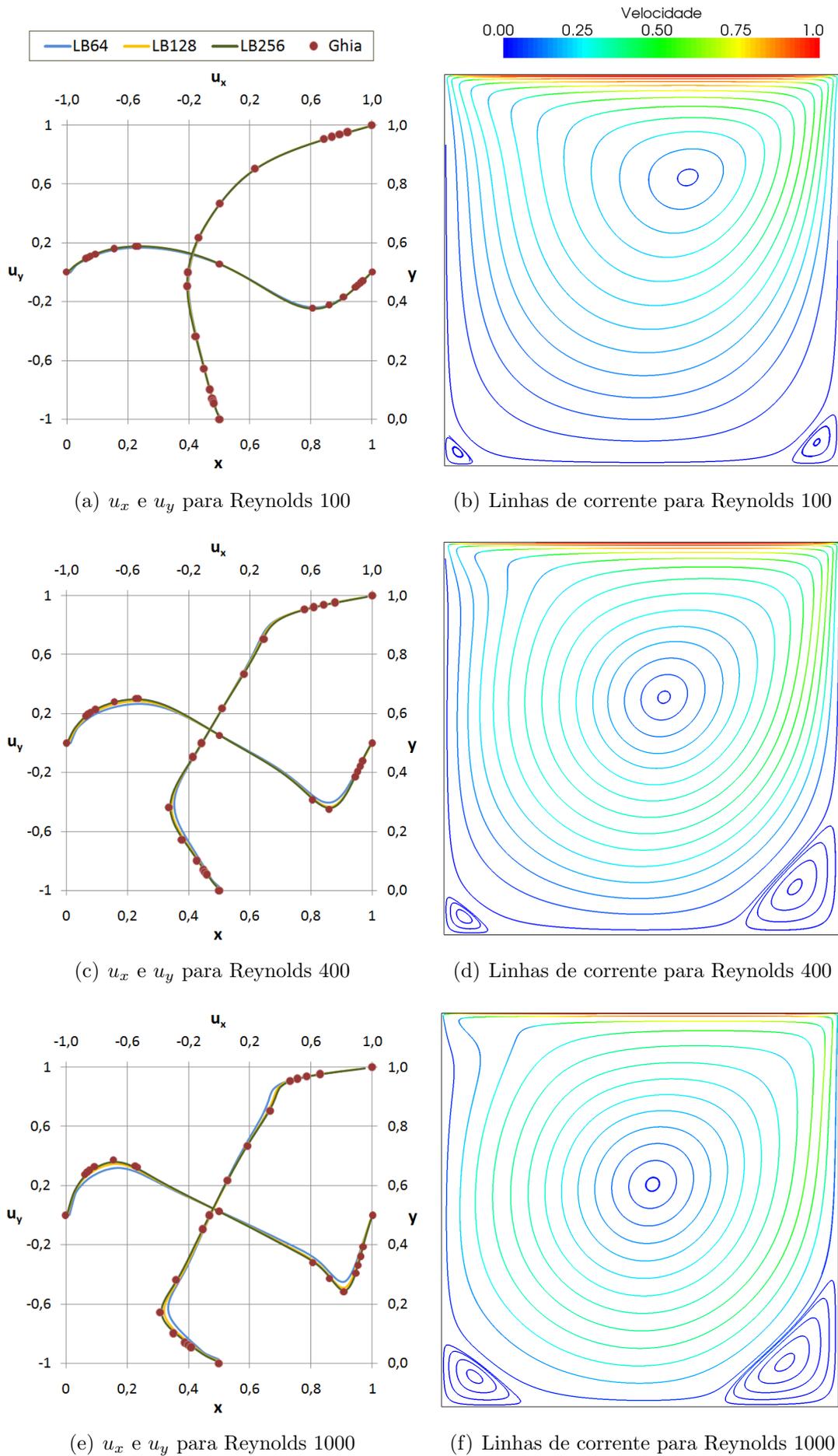


Figura 4.4: Resultados das simulações na cavidade quadrada.

literatura e exibidos na Tabela 4.2 (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.

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 4.2: Posição dos centros dos vórtices.

### 4.1.3 Escoamento de Womersley

O problema do escoamento de Womersley é característico na dinâmica de fluidos incompressíveis, dado que é possível calcular a solução analítica das equações de Navier-Stokes (Fang et al. (2002)) e assim avaliar o desempenho dos esquemas numéricos. O problema é intrinsecamente transiente e possui um caráter periódico. Semelhante ao problema de Poiseuille, confinamos um fluido incompressível em um canal 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 4.5.

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

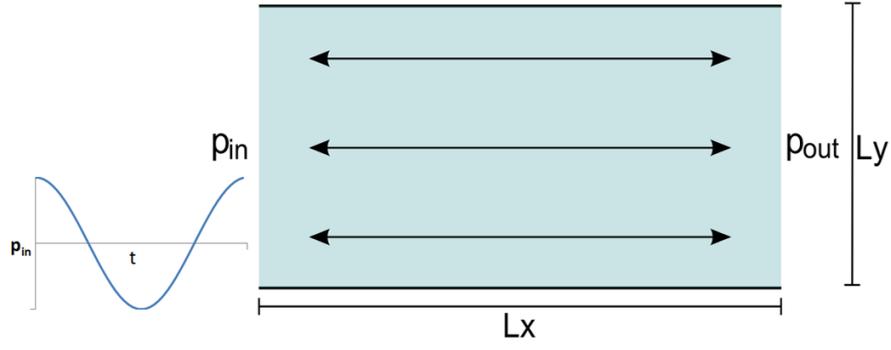


Figura 4.5: Ilustração do escoamento de Womersley em 2D.

pressão descrito por

$$\Delta p(t) = \frac{p_{out} - p_{in}(t)}{L_x} = -A \cos(\mu t) \quad (4.4)$$

onde,  $A = \max(\Delta p)$  é a amplitude do gradiente de pressão e  $\mu = 2\pi/T$  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  $p$ ), fica descrita pelas equações:

$$\begin{aligned} u_x(x, y, t) &= -\text{Real} \left[ i \frac{A}{\mu \rho} \left( 1 - \frac{\cos[\lambda(2y/L_y - 1)]}{\cos(\lambda)} \right) e^{i\mu t} \right] \\ u_y(x, y, t) &= 0 \\ p(x, y, t) &= p_{in}(t) + x\Delta p \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde,  $\rho$  é a massa específica,  $\text{Real}(\cdot)$  indica a componente real do argumento  $(\cdot)$  e  $\lambda$  é dado em função do número adimensional de Womersley  $\kappa$ , conforme:

$$\lambda^2 = -i\kappa^2, \quad \kappa = \frac{L_y}{2} \sqrt{\frac{\mu}{\nu}}. \quad (4.6)$$

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  $\kappa$ .

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 (4.5)), utilizando  $\rho_0 = p_{out}/c_s^2$ ,  $L_x = 2$ ,  $L_y = 1$  e os números de Womersley 3,5, 9 e 15 em *lattices* de tamanhos  $64 \times 32$ ,  $128 \times 64$  e  $256 \times 128$ , respectivamente. Os resultados são apresentados nas Figuras 4.6–4.11. Especificamente, nas Figuras 4.6, 4.8 e 4.10 mostra-se a magnitude do campo de velocidade nos casos de número de Womersley 3,5, 9 e 15 respectivamente. Isto é realizado para 4 instantes diferentes do período, segundo indicado nas figuras. Por outro lado, as Figuras 4.7, 4.9 e 4.11 apresentam o perfil da componente  $u_x$  da velocidade ao longo de uma linha vertical (na direção  $\vec{y}$ ) localizada no centro longitudinal do canal. Nestas figuras a solução numérica obtida é comparada com a solução analítica, apresentada na equação (4.7), para diferentes instantes de tempo ao longo de um período.

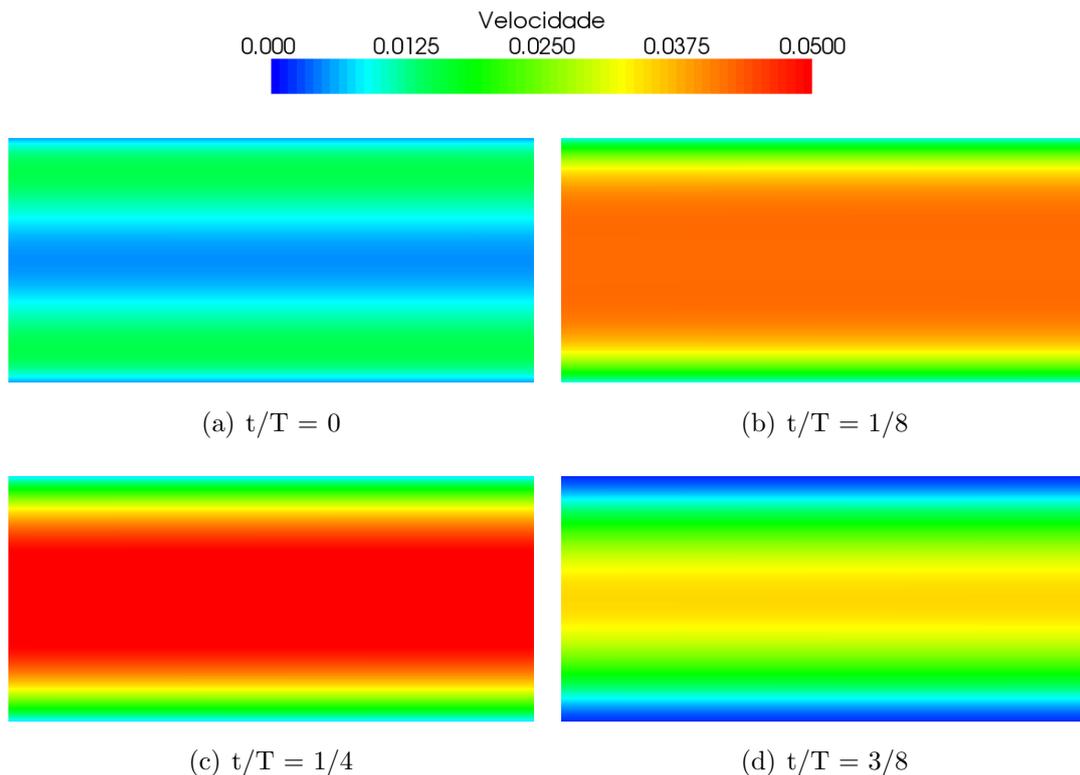


Figura 4.6: Magnitude da velocidade em 4 instantes para Womersley 3,5.

Da análise dos resultados, conclui-se que o método de Lattice-Boltzmann conseguiu reproduzir acuradamente as características de um escoamento de Womersley. Inclusive para os números de Womersley mais elevados, onde, os

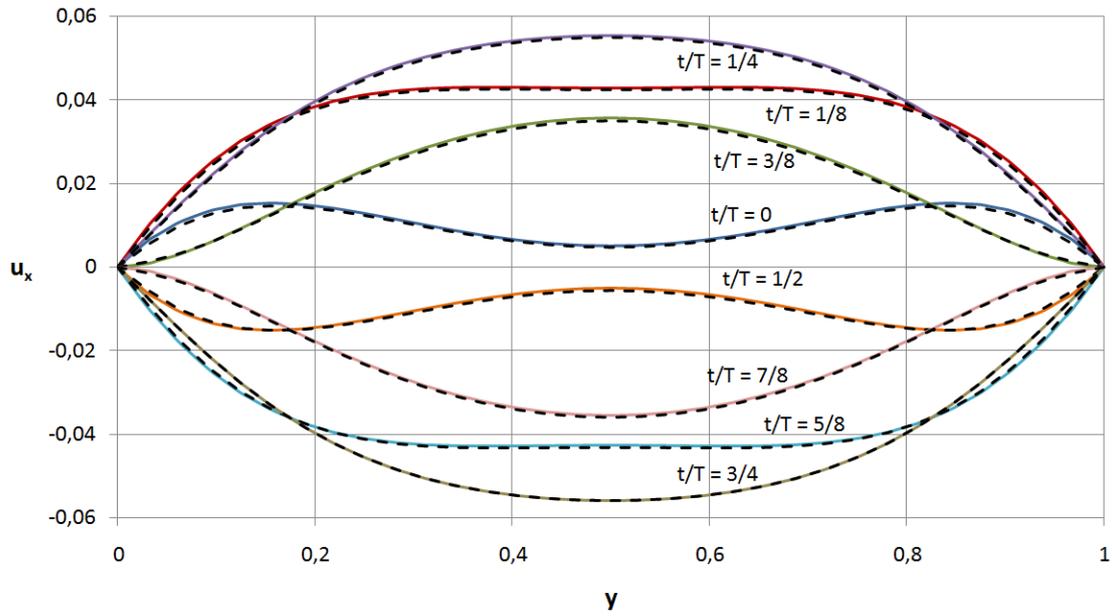


Figura 4.7: Componente  $u_x$  ao longo de uma linha vertical para Womersley 3,5.

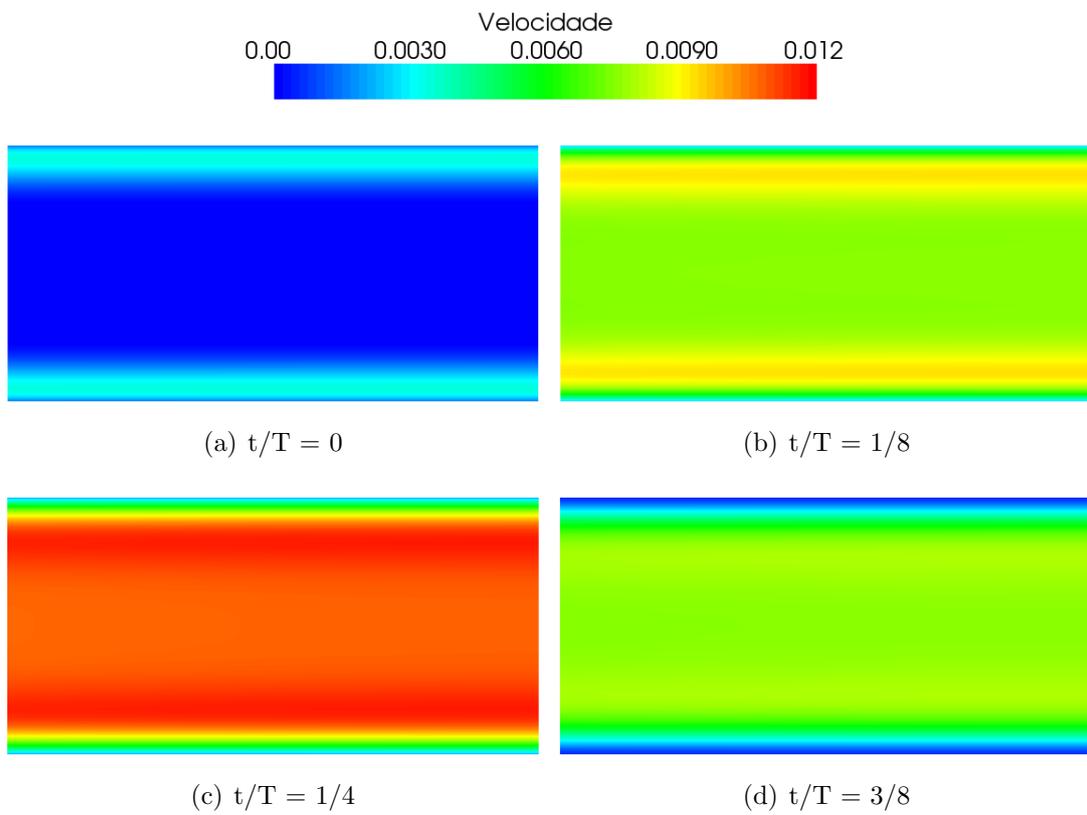


Figura 4.8: Magnitude da velocidade em 4 instantes para Womersley 9.

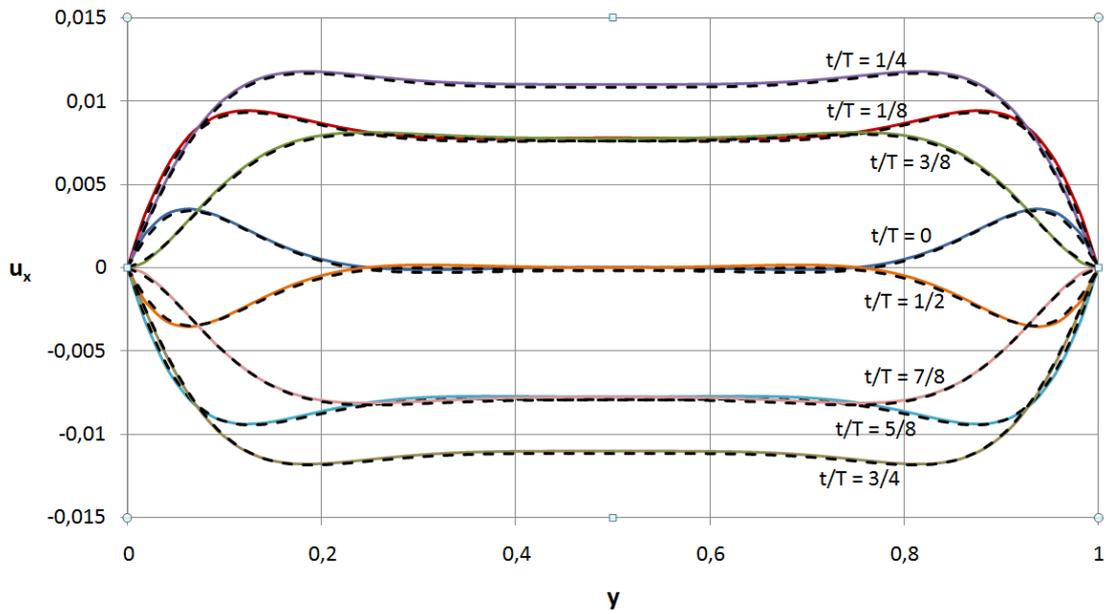


Figura 4.9: Componente  $u_x$  ao longo de uma linha vertical para Womersley 9.

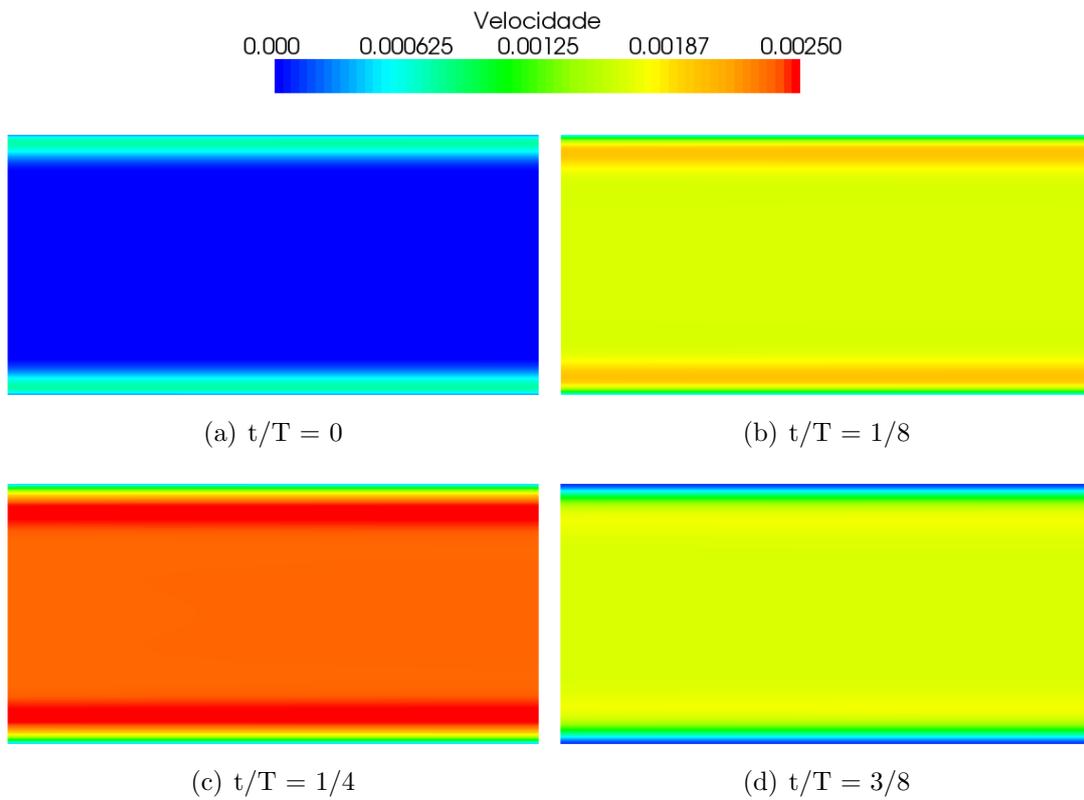


Figura 4.10: Magnitude da velocidade em 4 instantes para Womersley 15.

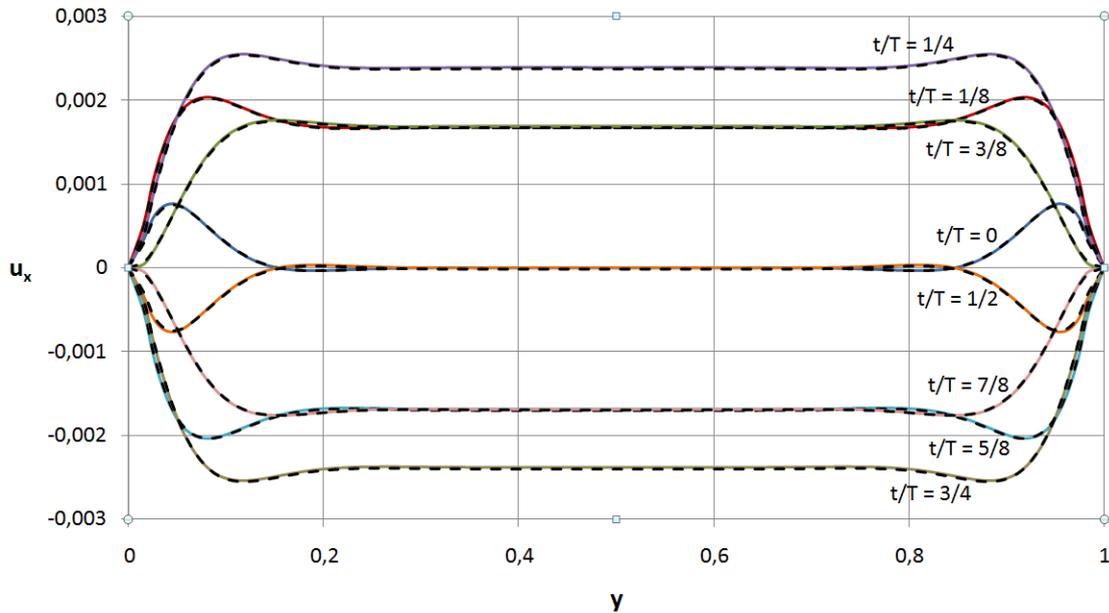


Figura 4.11: Componente  $u_x$  ao longo de uma linha vertical para Womersley 15.

algoritmos numéricos tendem a apresentar maiores dificuldades na representação do fenômeno. Os erros relativos médios das simulações ao longo do período (de acordo com a medida expressa pela equação (3.51)) para os números de Womersley 3,5, 9 e 15 são 1,3%, 1,4% e 0,79% nos *lattices*  $64 \times 32$ ,  $128 \times 64$  e  $256 \times 128$ , respectivamente.

Escolhemos para estas simulações números de passos por período (denotado por  $N_T = T/\Delta t$ ) suficientes para assegurar que o erro na solução seja menor que 2% segundo a equação (3.51), são eles: 15.744, 18.500, 38.400 para os valores de Womersley 3,5, 9 e 15, respectivamente. Os demais parâmetros das simulações são determinados a partir destes valores. As simulações foram consideradas convergidas quando a diferença relativa média (calculada através da equação (3.51)) 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 11, 46 e 96 ciclos para os números de Womersley 3,5, 9 e 15, respectivamente. Estes resultados nos trazem noções dos parâmetros a serem usados nas simulações visando obter erros da mesma ordem para os diferentes números de Womersley. Um estudo mais aprofundado sobre relações entre desempenho e acurácia das simulações será desenvolvido na próxima

seção em simulações tridimensionais.

## 4.2 Simulações em 3D

Nesta seção exploraremos vários aspectos relacionados às simulações de três problemas em 3D, como: desempenho, acurácia, convergência, erros de compressibilidade, entre outros. Visto que nosso objetivo principal, em termos de simulações, está nas aplicações tridimensionais, aproveitaremos as implementações dos casos teste para obter o máximo de informações que possam ser úteis em outras aplicações, como em problemas da hemodinâmica computacional.

O problema estacionário da cavidade cúbica foi uma das problemáticas escolhidas para ser estudada como caso teste. 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 canal cilíndrico. Como no caso bidimensional, este problema possui solução analítica e a mesma é caracterizada pelo 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 podem ser grandes. Também aplicaremos as técnicas de calibração das simulações, apresentadas na Seção 3.3, a fim de analisar como o erro da solução diminui para os diferentes números de Womersley.

Na parte final da seção, iremos modelar um caso que se assemelha às situações encontradas no âmbito da hemodinâmica computacional. O problema escolhido é caracterizado pelo escoamento sanguíneo pulsátil em um tubo tridimensional cilíndrico de paredes rígidas com um curvatura de  $90^\circ$ . Neste caso modelaremos um

problema mais complexo do ponto de vista computacional que os anteriores, pois trabalharemos com números de Reynolds e Womersley altos e com uma relação de aspecto geométrica grande, características estas encontradas no regime fisiológico do sistema arterial.

#### 4.2.1 Cavidade cúbica

Este problema é descrito como o escoamento estacionário de um fluido incompressível em uma cavidade cúbica, composta de paredes impermeáveis e não escorregadias, devido à difusão dos efeitos viscosos provocados pelo movimento imposto na parede superior da cavidade. Tal parede se move com velocidade constante (denominada  $U_{max}$ ) na direção  $\vec{x}$ , enquanto as demais paredes permanecem imóveis, conforme mostra a Figura 4.12.

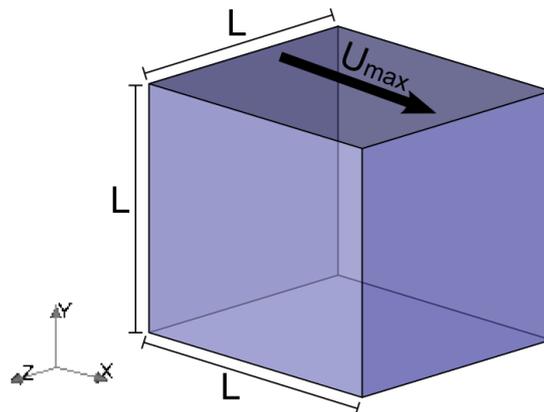


Figura 4.12: Figura ilustrativa do escoamento na cavidade cúbica.

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

$$Re = \frac{LU_{max}}{\nu}, \quad (4.7)$$

onde,  $\nu$  é a viscosidade cinemática do fluido (medida no modelo escolhido através da equação (2.82)).

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 × 100 × 100, 180 × 180 × 180 e 200 × 200 × 200 e implementamos as condições de contorno de velocidade descritas na Subseção 3.2.2. As simulações foram feitas tomando-se o lado da cavidade e a velocidade máxima unitárias e adotamos a massa específica 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 equação (3.51)).

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  $c_s = \Delta x/(\sqrt{3}\Delta t)$ , onde  $\Delta x$  é o espaçamento e  $\Delta t$  o passo no tempo. 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 do tipo essencialmente não-oscilatório (ENO) (Yang et al. (1998)). Na Figura 4.13 plotamos, para os diferentes números de Reynolds, a componente da velocidade  $u_y$  ao longo da linha na direção  $\vec{x}$  que passa pelo centro geométrico da cavidade cúbica juntamente com a componente da velocidade  $u_x$  ao longo de uma linha na direção  $\vec{y}$  que passa pelo mesmo centro. Utilizamos as notações LB50, LB100, LB180 e LB200 para nos referenciar 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 o número de Reynolds 100 os resultados da solução via LBM já são bem próximos dos de Yang para o *lattice* de tamanho 100 × 100 × 100, enquanto que para os casos de Reynolds 400 e 1000 podemos observar que as soluções via LBM se aproximam consistentemente das de Yang a 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, sem ter

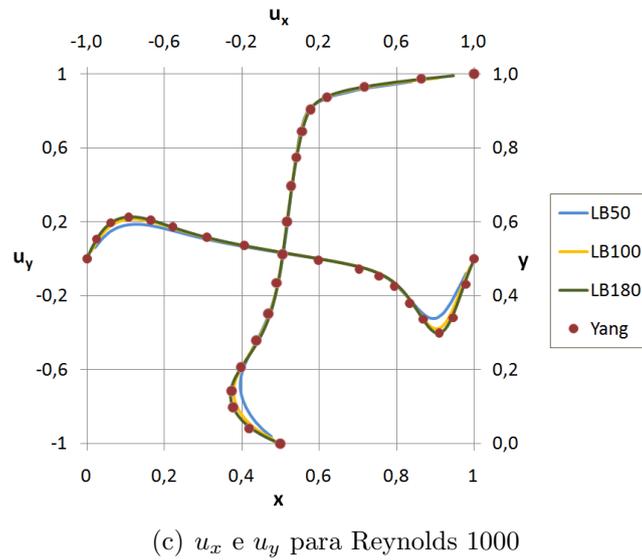
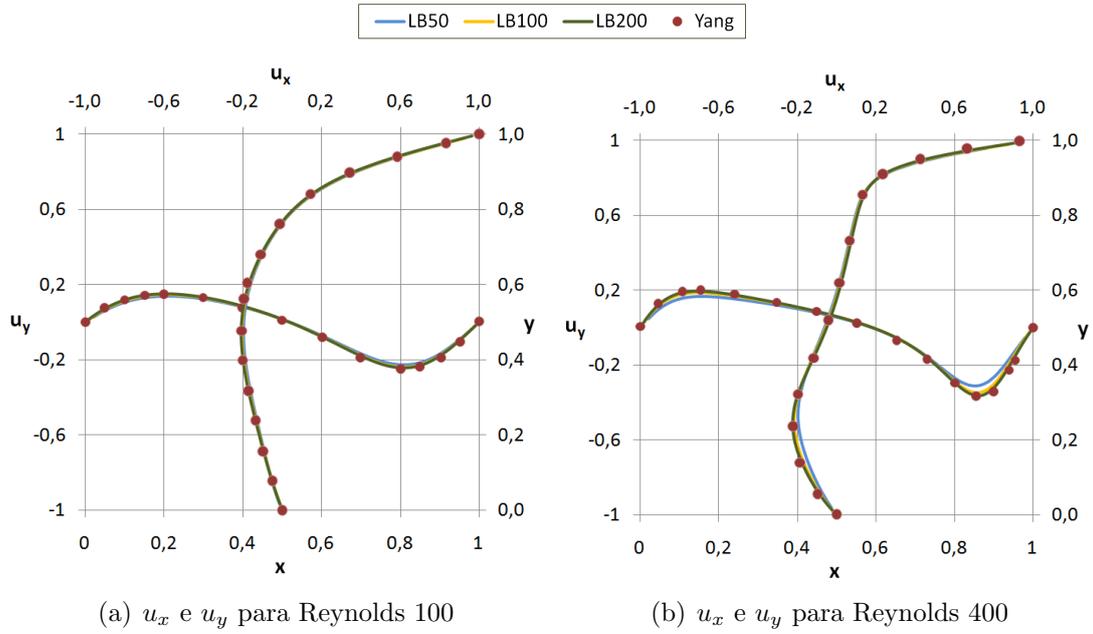
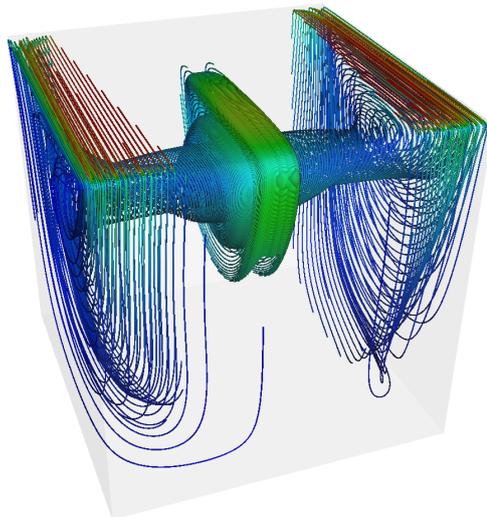
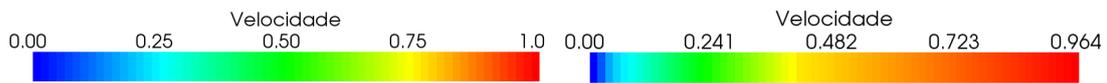


Figura 4.13: Componentes  $u_x$  e  $u_y$  ao longo de linhas nas direções  $\vec{y}$  e  $\vec{x}$ .

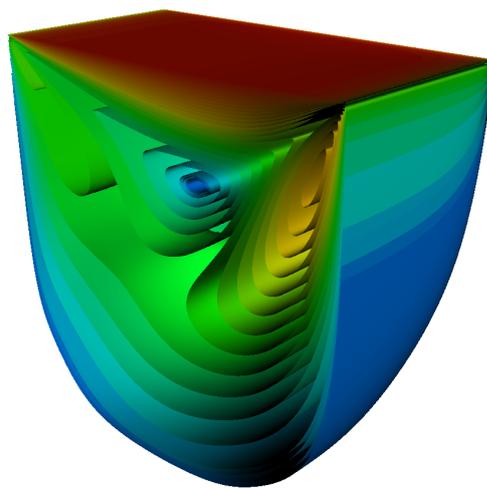
que refinar o *lattice*, ou se poderíamos obter resultados semelhantes aumentando o número de Mach e, portanto, reduzindo o custo computacional. Para tanto, repetimos a simulação com número de Reynolds 100 e *lattice* de tamanho  $100 \times 100 \times 100$ , modificando o número de Mach para 0,0425 (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, concluimos que a redução do número de Mach não gerou o resultado esperado, pois, ao compararmos

os resultados das duas simulações (sem reduzir  $M$  e reduzindo  $M$ ) com a simulação com *lattice* maior, encontramos diferenças relativas médias (calculadas através da equação (3.50)) 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. No segundo teste direcionado neste sentido, resolvemos dobrar o número de Mach para 0,34, simulando o caso com número de Reynolds 1000 e *lattice* de tamanho  $50 \times 50 \times 50$ . Percebemos que ao aumentar o número de Mach, as diferenças relativas médias entre as velocidades das duas simulações (sem aumentar  $M$  e aumentando  $M$ ) e as da simulação com *lattice* de tamanho  $100 \times 100 \times 100$  foram de 12,1% e 13,1%, respectivamente, sendo que o custo da segunda simulação diminuiu para quase a metade. Observamos aqui uma variação mais evidente, porém, podemos concluir que o ganho em acurácia não justifica a diminuição do número de Mach com o conseqüente aumento no custo computacional.

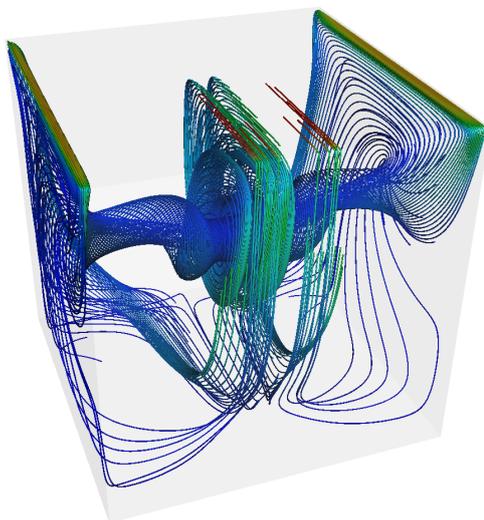
Como forma de ilustrar os resultados das simulações em *lattice* de tamanho  $200 \times 200 \times 200$  para os números de Reynolds 100, 400 e 1000, exibimos na Figura 4.14 imagens geradas em 3D para mostrar as principais características do escoamento tridimensional. Na coluna da esquerda, plotamos linhas de corrente calculadas a partir do campo de velocidade, onde podemos observar o vórtice central gerado em cada caso e a natureza tridimensional do escoamento do fluido. Na coluna da direita, desta mesma figura, plotamos as mesmas iso-superfícies da magnitude da velocidade para os três números de Reynolds. Aqui volta a ficar claro como o vórtice central muda de posição em função do número Reynolds, questão que fora observada na coluna da direita da Figura 4.4 da Seção 4.1, correspondente ao caso 2D. Observa-se também que, no caso de Reynolds 1000, surge (para as iso-superfícies avaliadas) um vórtice no canto inferior na parede anterior da cavidade.



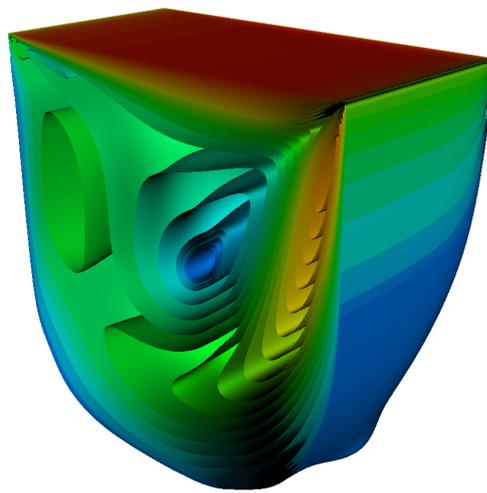
(a) Linhas de correntes para Reynolds 100



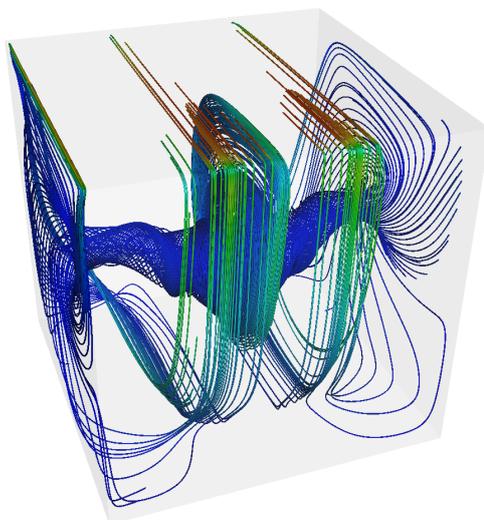
(b) Iso-superfícies para Reynolds 100



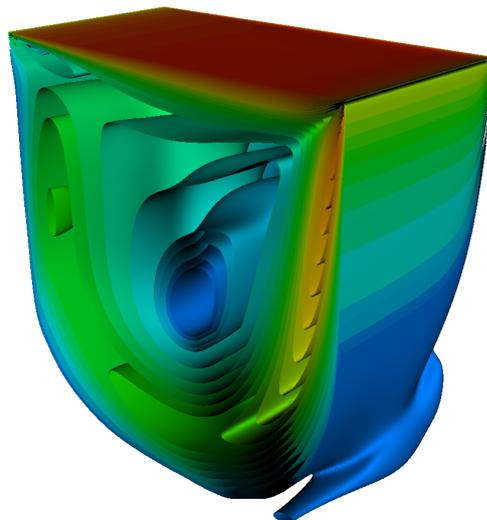
(c) Linhas de corrente para Reynolds 400



(d) Iso-superfícies para Reynolds 400



(e) Linhas de corrente para Reynolds 1000



(f) Iso-superfícies para Reynolds 1000

Figura 4.14: Linhas de correntes e iso-superfícies da magnitude da velocidade.

### 4.2.2 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 incompressível 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 4.15.

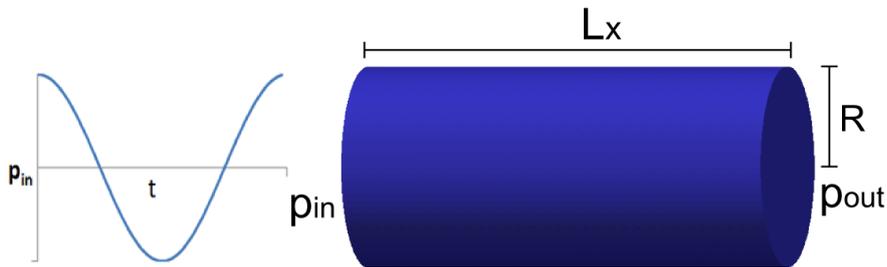


Figura 4.15: Figura ilustrativa do escoamento de Womersley em 3D.

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

$$\Delta p(t) = \frac{p_{out} - p_{in}(t)}{L_x} = -A \cos(\mu t) \quad (4.8)$$

onde,  $A = \max(\Delta p)$  é a amplitude do gradiente de pressão,  $\mu = 2\pi/T$  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)):

$$\begin{aligned}
u_x(r, \theta, x, t) &= -\text{Real} \left\{ \frac{A}{i\rho\mu} \left[ 1 - \frac{J_0(\kappa \frac{r}{R} i^{\frac{3}{2}})}{J_0(\kappa i^{\frac{3}{2}})} \right] e^{i\mu t} \right\} \\
u_r(r, \theta, x, t) &= u_\theta(r, \theta, x, t) = 0 \\
p(r, \theta, x, t) &= p_{in}(t) + x\Delta p
\end{aligned} \tag{4.9}$$

onde,  $\rho$  é a massa específica,  $r$  é a coordenada radial,  $i = \sqrt{-1}$ ,  $\text{Real}(\cdot)$  indica a componente real do argumento  $(\cdot)$ ,  $J_0(\cdot)$  é a função de Bessel de ordem zero e  $\lambda$  é dado em função do número de Womersley  $\kappa$ , conforme:

$$\lambda^2 = -i\kappa^2, \quad \kappa = R\sqrt{\frac{\mu}{\nu}}. \tag{4.10}$$

Neste problema, como no caso 2D, os fenômenos físicos ficam caracterizados pelo número adimensional de Womersley  $\kappa$ .

Realizamos simulações deste problema para diferentes números de Womersley, mantivemos o número de Reynolds em 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 (3.51)) entre a componente axial dos campos de velocidade nos instantes de tempo  $t$  e  $t - T$  fosse menor que  $10^{-5}$ . Nestas simulações fazemos uso das técnicas de calibração das simulações apresentadas na Seção 3.3, a fim de analisar a sensibilidade da solução numérica e a sua proximidade com respeito à solução analítica. As técnicas de incremento no número de passos por período (denominado  $N_T$ ), e do aumento do tamanho do *lattice*, são detalhadas, para este problema específico, na Tabela 4.3. Nesta tabela, mostramos as mudanças relativas nos parâmetros do modelo, mantendo os números de Reynolds e Womersley fixos, com respeito a um fator de mudança  $n$  em um dos parâmetros. Para tanto, utilizamos as seguintes notações: o símbolo  $(')$  indica o novo parâmetro,  $m$  representa a dimensão axial do *lattice* (em células),

$M$  é o número de Mach,  $T_r = T/(L/c_s)$  é a proporção entre o período e o tempo de propagação das partículas sobre o comprimento característico  $L = L_x$  e  $\tau_r = \tau - 0,5$ .

Técnica	$m'/m$	$N'_T/N_T$	$\Delta t'/\Delta t$	$\Delta x'/\Delta x$	$T'_r/T_r$	$\tau'_r/\tau_r$	$M'/M$
Aumentar $N_T$	1	$n$	$1/n$	1	$n$	$1/n$	$1/n$
Aumentar <i>lattice</i>	$n$	1	1	$1/n$	$1/n$	$n^2$	$n$

Tabela 4.3: Técnicas de calibração da simulação para o escoamento de Womersley.

Primeiramente, aplicamos tais técnicas na simulação do escoamento em um canal de comprimento  $L_x = 2$ , com número de Womersley  $\kappa = 3,5$  e um número inicial de 1312 passos por período, sobre um *lattice* de tamanho  $64 \times 32 \times 32$ . Aqui, 64 indica o tamanho do *lattice* na direção axial  $\vec{x}$  e os outros dois valores nas direções transversais. Neste teste, para efeito de análise das técnicas, montamos a Tabela 4.4, aplicando as técnicas de aumento da variável  $N_T$  e aumento do tamanho do *lattice*, exibindo os erros relativos provenientes da comparação entre a solução numérica e a exata (calculados através da equação (3.51)), e os erros de compressibilidade. Esses últimos foram calculados a partir da diferença entre os fluxos de fluido nos dois extremos do canal.

tamanho do <i>lattice</i>	$N_T$	custo	$\tau$	erro rel.	erro compres.
$64 \times 32 \times 32$	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 4.4: Erros relativos e de compressibilidade para Womersley 3,5.

Analisando a Tabela 4.4, percebemos que, ao aumentar  $N_T$  os resultados são consideravelmente melhores. Em particular, essa é a maneira existente para redução dos erros de compressibilidade, porém, devemos tomar cuidado para que o valor de  $\tau$  não esteja muito próximo de 0,5, pois a simulação se

tornaria instável. Esta melhora nos resultados está limitada pela discretização espacial, logo, é necessário aumentar o tamanho do *lattice* para se obter melhores resultados. Veja que, ao refinar o *lattice*, temos que aumentar  $N_T$  para atingir o erro de compressibilidade anterior e, por consequência, os custos aumentam consideravelmente.

Com a construção da Tabela 4.4 e possível também desvendar a natureza dos erros na solução. Com efeito, a discretização espacial nos provê uma forma de nos aproximarmos da solução exata, porém não nos fornece um controle total sobre o erro de compressibilidade, o que fica em evidência ao compararmos simulações com igual número de passos  $N_T$  e diferente tamanho do *lattice*. De forma complementar, o número de passos  $N_T$ , apesar de não nos possibilitar reduzir o erro relativo com respeito à solução do problema, fornece um caminho para eliminar os efeitos de compressibilidade artificial produto do esquema numérico. Logo, deste tipo de comparação obtemos uma radiografia explícita das técnicas necessárias para levar a cabo simulações computacionais de escoamentos incompressíveis via o método de Lattice-Boltzmann.

Como segunda análise, resolvemos associar a proporção entre o comprimento físico do canal, denotado por  $L_x$ , e o diâmetro do canal com o número de passos por período ( $N_T$ ) necessário para que o erro de compressibilidade seja pequeno (próximo 1%). Foram realizadas simulações para os problemas com número de Womersley fixo em 3,5 e relações de aspecto ( $L_x \times 2R$ )  $1 \times 1$ ,  $2 \times 1$ ,  $4 \times 1$ ,  $8 \times 1$  e  $16 \times 1$ . Dado que o raio  $R$  foi mantido fixo, o comprimento do canal  $L_x$  foi modificado em cada caso. A variável  $N_T$  foi duplicada, a partir do valor inicial  $N_T = 1312$ , até que o erro de compressibilidade se tornasse próximo de 1%. Estes erros estão expressos na Tabela 4.5, onde podemos observar que o aumento necessário em  $N_T$  está linearmente associado com o comprimento do canal. Encontramos erros de compressibilidade próximos de 1% quando foi atingida a relação  $T_r = 47$ , conforme mostra a Tabela 4.6, logo, tal relação é suficiente para obtermos resultados com poucos efeitos de compressibilidade em escoamentos com relação de aspecto menor

ou igual a  $16 \times 1$ . Além disso, plotamos na Figura 4.16 o perfil de velocidade (*warps*) ao longo do canal para os problemas apresentados na Tabela 4.5 que obtiveram erros de compressibilidade próximos de 1%, no instante de tempo  $t/T = 0$ . Verificamos através desta figura que o perfil de velocidade não se modifica ao longo do canal, mesmo no canal com aspecto de  $16 \times 1$ .

$L_x \times 2R \setminus N_T/1312$	1	2	4	8	16	32
$1 \times 1$	2,91%	0,70%	–	–	–	–
$2 \times 1$	16,7%	3,67%	0,88%	–	–	–
$4 \times 1$	166%	18,5%	4,00%	0,97%	–	–
$8 \times 1$	instável	168%	19,1%	4,16%	1,00%	–
$16 \times 1$	instável	instável	167%	19,4%	4,13%	1,06%

Tabela 4.5: Erros de compressibilidade para diferentes comprimentos de canal.

$L_x \times 2R \setminus N_T/1312$	1	2	4	8	16	32
$1 \times 1$	23,50	47,00	–	–	–	–
$2 \times 1$	11,75	23,50	47,00	–	–	–
$4 \times 1$	5,87	11,75	23,50	47,00	–	–
$8 \times 1$	2,94	5,87	11,75	23,50	47,00	–
$16 \times 1$	1,47	2,94	5,87	11,75	23,50	47,00

Tabela 4.6: Proporção entre o período e o tempo de propagação das partículas sobre o *lattice*, denominada  $T_r = T/(L/c_s)$ .

Veja que através do emprego destas técnicas é possível nos aproximarmos sistematicamente da solução analítica (Eq. (4.9)). Assim, o objetivo de revelar a natureza do método de Lattice-Boltzmann com relação aos erros implícitos na sua formulação, visando a modelagem de fluidos incompressíveis, é alcançado.

Com o uso das técnicas acima citadas, foram realizadas simulações em um canal de comprimento  $L_x = 2$ , para os números de Womersley 3,5, 7 e 20, obtendo bons resultados nos *lattices* de tamanhos  $64 \times 32 \times 32$ ,  $128 \times 64 \times 64$  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 (3.51)), menores que 5%. Estes resultados são mostrados através das

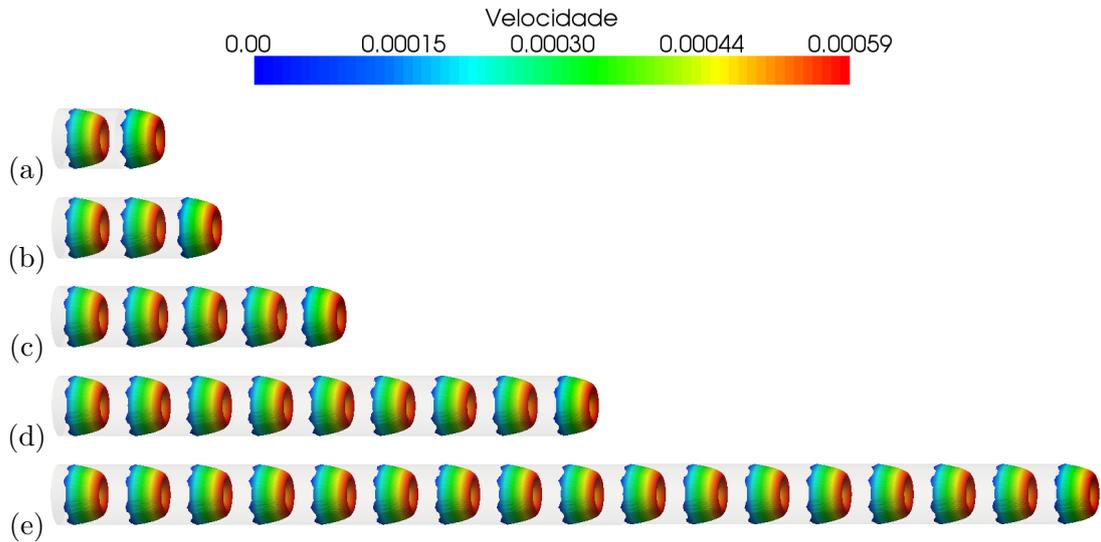


Figura 4.16: Velocidade em canais com relação de aspecto igual a: (a)  $1 \times 1$ , (b)  $2 \times 1$ , (c)  $4 \times 1$ , (d)  $8 \times 1$  e (e)  $16 \times 1$ , para Womersley 3,5.

Figuras 4.17-4.22. Mais especificamente, nas Figuras 4.18, 4.20 e 4.22, 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. Além disso, exibimos nas Figuras 4.17(a), 4.19(a) e 4.21(a) linhas de corrente ao longo do canal e o perfil de velocidade (*warps*) nos extremos e no meio do canal, para os instantes de tempo indicados. Podemos perceber que o perfil da velocidade não se modifica ao longo do canal e que as pequenas irregularidades sobre as paredes ficam mais perceptíveis, devido à técnica de visualização empregada. Por último, nas Figuras 4.17(b) e 4.19(b) mostramos algumas iso-superfícies da velocidade com o intuito de mostrar que o perfil de velocidade permanece inalterado ao longo do canal. Logo, observamos que não há qualquer fenômeno de propagação de ondas, o que é característico de simulações inadequadamente calibradas (onde o erro de compressibilidade é significativo). Também na Figura 4.21(b) exibimos apenas a coloração de acordo com a velocidade axial, pois a velocidade é praticamente constante na parte central do canal.

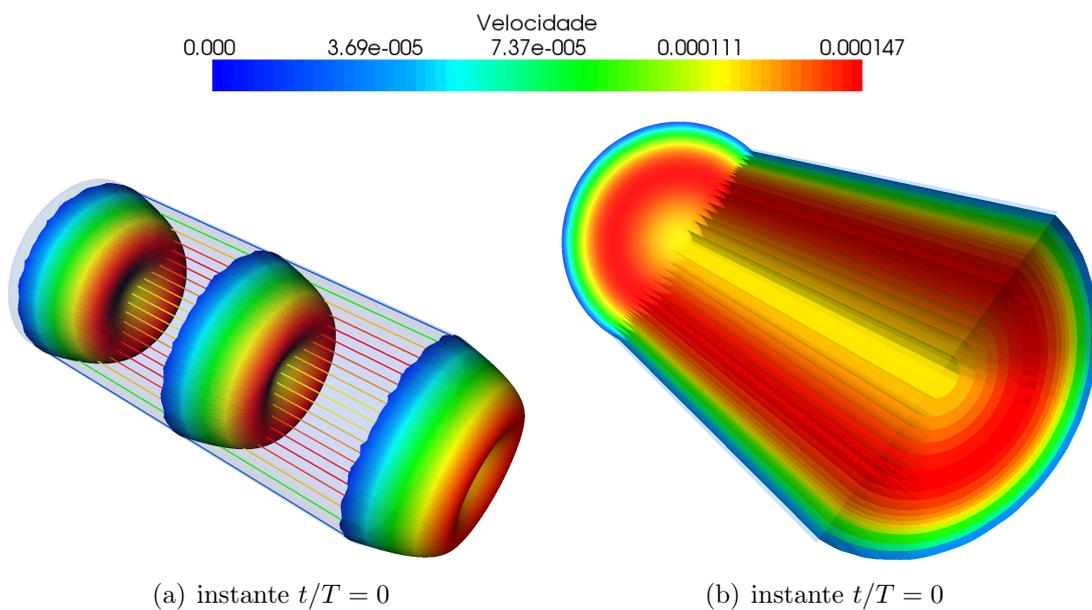


Figura 4.17: Linhas de corrente e iso-superfícies para Womersley 3,5.

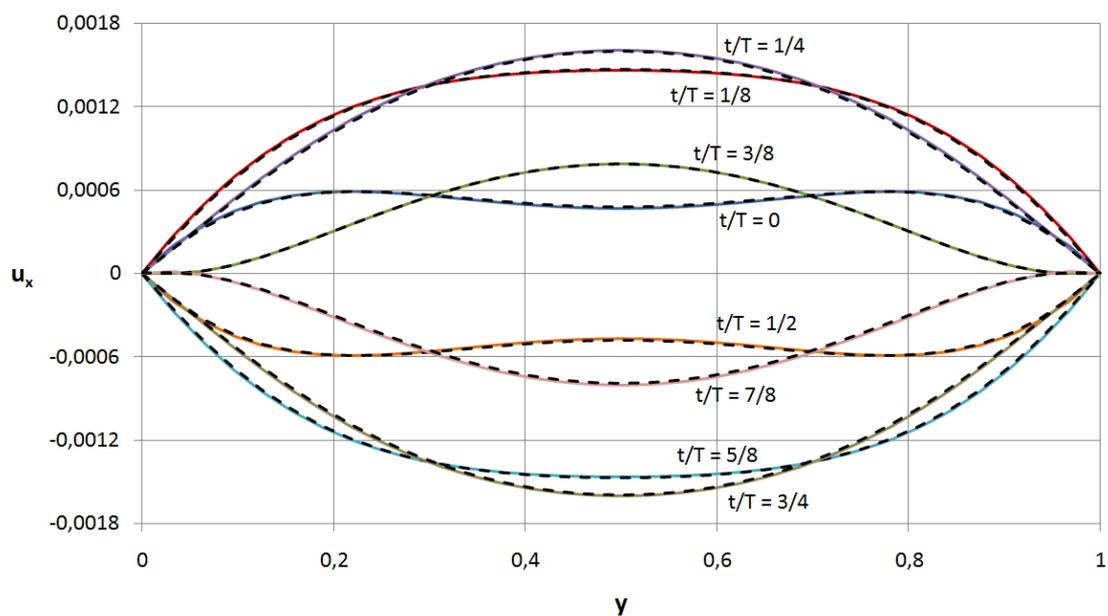


Figura 4.18: Componente  $u_x$  sobre uma linha transversal para Womersley 3,5.

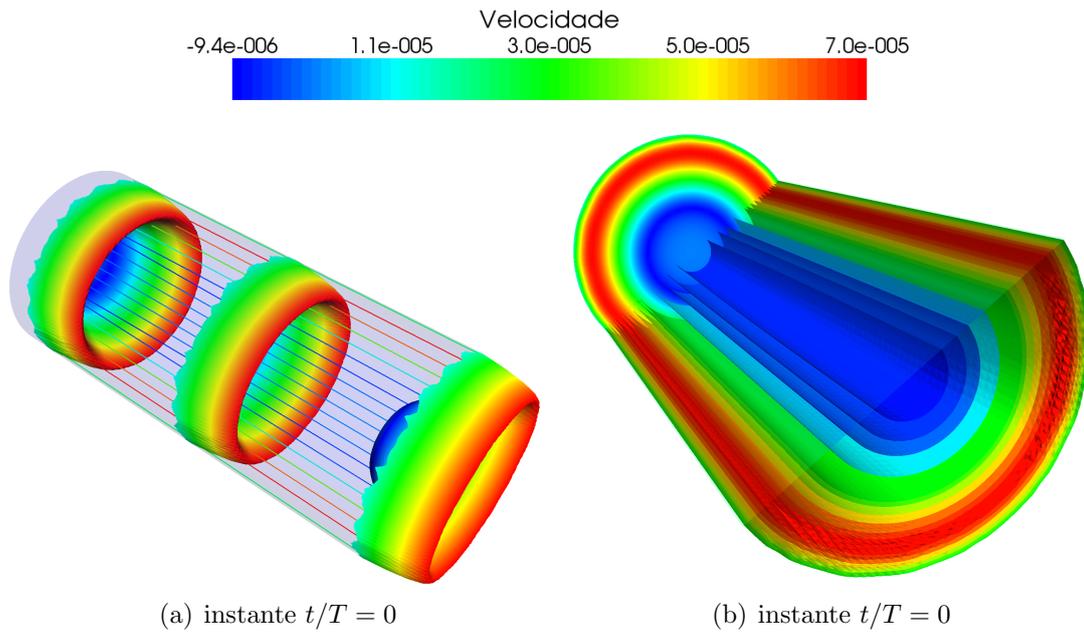


Figura 4.19: Linhas de corrente e iso-superfícies para Womersley 7.

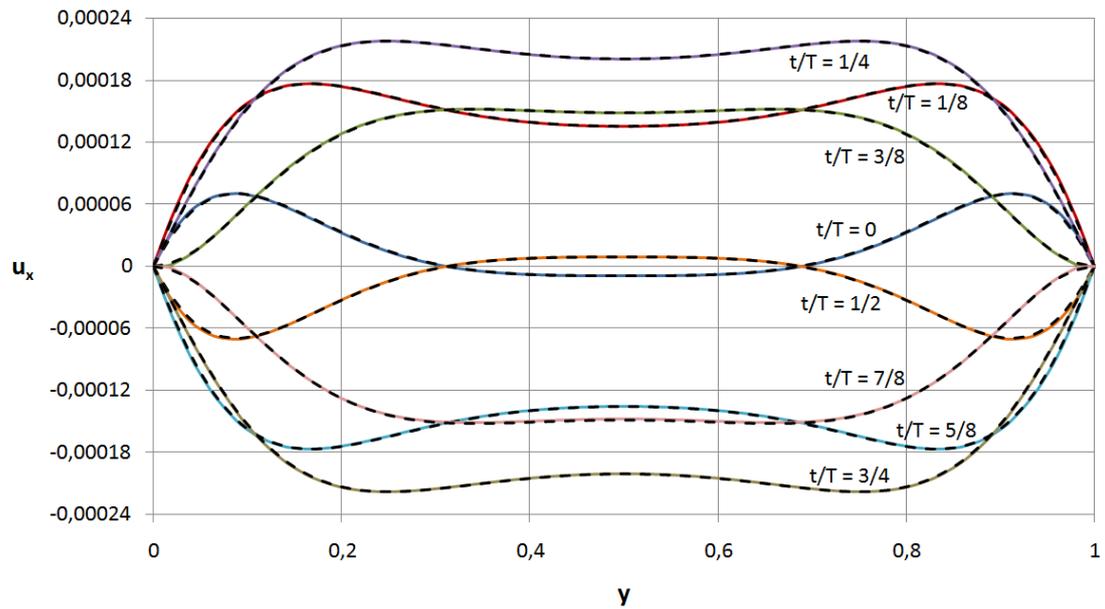


Figura 4.20: Componente  $u_x$  sobre uma linha transversal para Womersley 7.

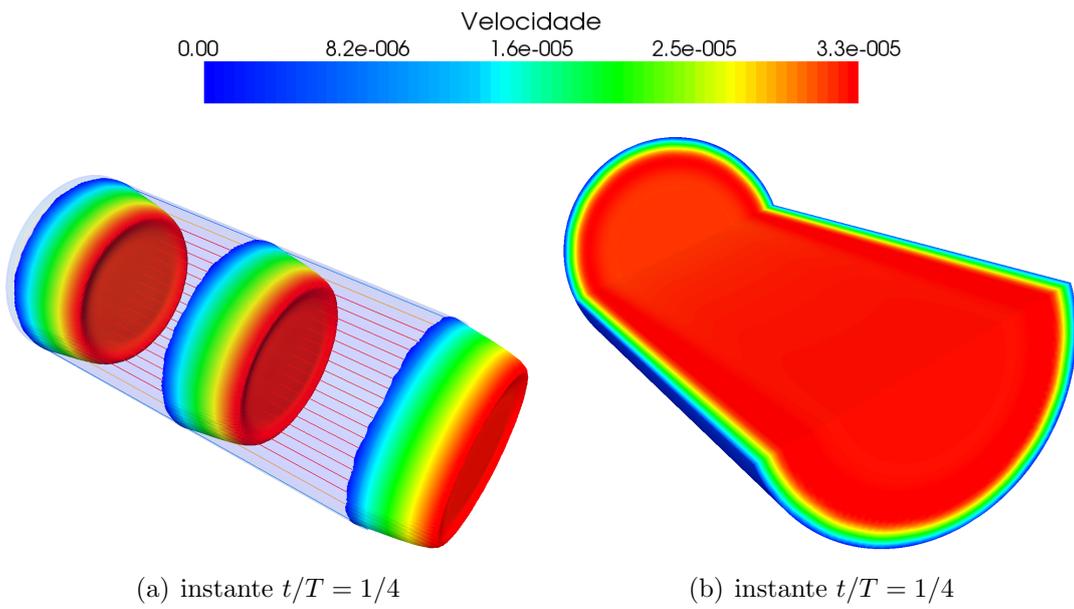


Figura 4.21: Linhas de corrente e velocidade axial para Womersley 20.

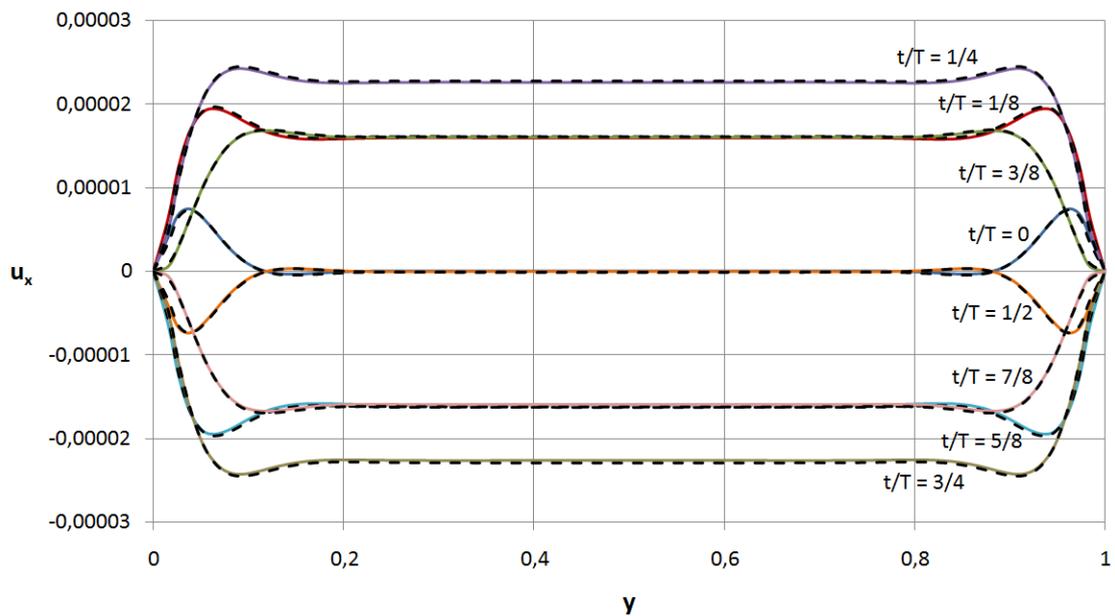


Figura 4.22: Componente  $u_x$  sobre uma linha transversal para Womersley 20.

### 4.2.3 Escoamento transiente em um canal cilíndrico curvo

Nesta seção resolvemos aplicar os conhecimentos adquiridos com o estudo do LBM apresentado acima, em particular sobre a calibração dos parâmetros do modelo, à modelagem de um caso que se assemelha às situações encontradas no âmbito da hemodinâmica computacional. O problema a ser modelado é caracterizado pelo escoamento sanguíneo pulsátil em um tubo tridimensional cilíndrico de paredes rígidas com um curvatura de  $90^\circ$ . Como ao longo de todo este trabalho, modelamos o sangue como um fluido Newtoniano.

O formato do tubo no qual realizaremos a simulação do escoamento sanguíneo é ilustrado através da Figura 4.23. O diâmetro interno deste tubo é definido como  $D = 0,62\text{cm}$ , o comprimento da seção reta do tubo anterior à curva é definida como  $L_{in} = 3,6D$ , o comprimento da seção reta do tubo posterior à curva é definida como  $L_{out} = 10D$  e o raio de curvatura mede  $R = 1,86\text{cm}$ .

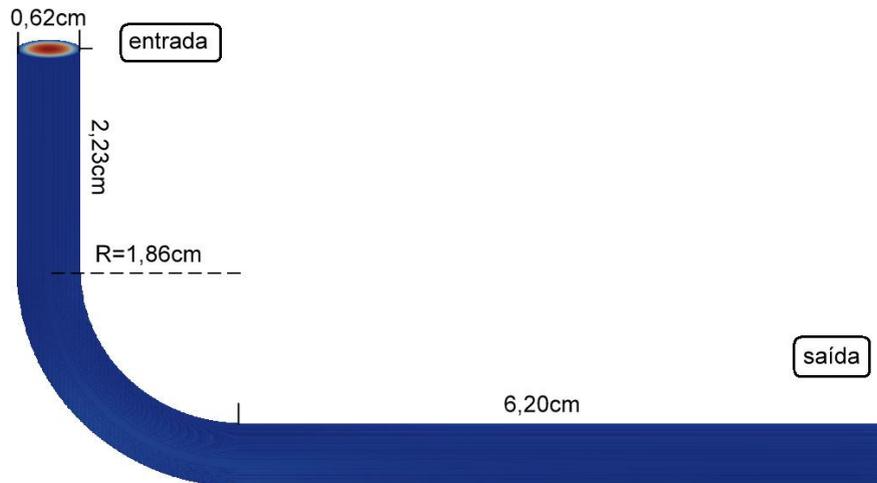


Figura 4.23: Ilustração da geometria do canal.

O escoamento sanguíneo é comandado por um pulso periódico, o qual gera uma velocidade média na entrada do canal dada por:

$$\bar{u}_{in}(t) = U \left[ 1 - \cos \left( \frac{2\pi t}{T} + C \right) \right], \quad (4.11)$$

onde, adotamos a constante  $C$  nula,  $t$  é a variável temporal,  $T = 0,75\text{s}$  representa o

período de pulsação e  $U = 16,9\text{cm/s}$  representa a velocidade média do escoamento na entrada do canal ao longo de um período. A partir dos valores da velocidade média  $\bar{u}_{in}(t)$  gerada pelo pulso é imposto um perfil de velocidade parabólico na entrada do canal. Por outro lado, a condição de contorno na saída é pressão fixa e igual a uma pressão de referência, como  $p_{out} = 1$ .

Empregando a viscosidade cinemática do sangue  $\nu = 0,035\text{cm}^2/\text{s}$ , podemos calcular as constantes adimensionais que caracterizam o escoamento. Assim, obtemos um número de Reynolds médio (denominado  $Re$ ) igual a 300, calculado da forma:

$$Re = \frac{DU}{\nu}, \quad (4.12)$$

e o número de Womersley (denominado  $\kappa$ ) é igual a 4,8, calculado da forma:

$$\kappa = \frac{D}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{T\nu}}. \quad (4.13)$$

Observe que os números de Reynolds e de Womersley e a geometria do canal se condizem com os encontrados no regime fisiológico do sistema arterial, fornecendo uma situação mais complexa que as vistas nas seções anteriores do ponto de vista da simulação computacional.

A relação de aspecto geométrica do canal, dada pela proporção entre o seu comprimento e o diâmetro do mesmo, é de aproximadamente  $18 \times 1$ . Um valor alto, porém comumente encontrado em problemas provenientes da hemodinâmica computacional. Pode-se observar na Figura 4.24, que o comprimento do canal é suficiente para recuperar, na parte final do mesmo (correspondente à saída), o perfil parabólico de velocidade presente na entrada do mesmo. Nesta mesma figura, percebe-se como o perfil de velocidade se altera quando o fluido passa pela curva do canal, isto se deve em especial ao número de Reynolds alto do problema, o qual chega 900 quando calculado a partir da velocidade máxima do escoamento. Para efeitos de análise visual mostramos em detalhe, ainda nesta figura, uma aproximação da região curva em que o perfil de velocidade sofre as

maiores alterações devido às características geométricas do domínio. Nesta imagem em detalhe, pode-se perceber a boa representação dos altos gradientes espaciais do campo de velocidade presentes, isto se deve ao alto refinamento do *lattice* adotado, consistindo em aproximadamente 90 células ao longo do diâmetro do canal.

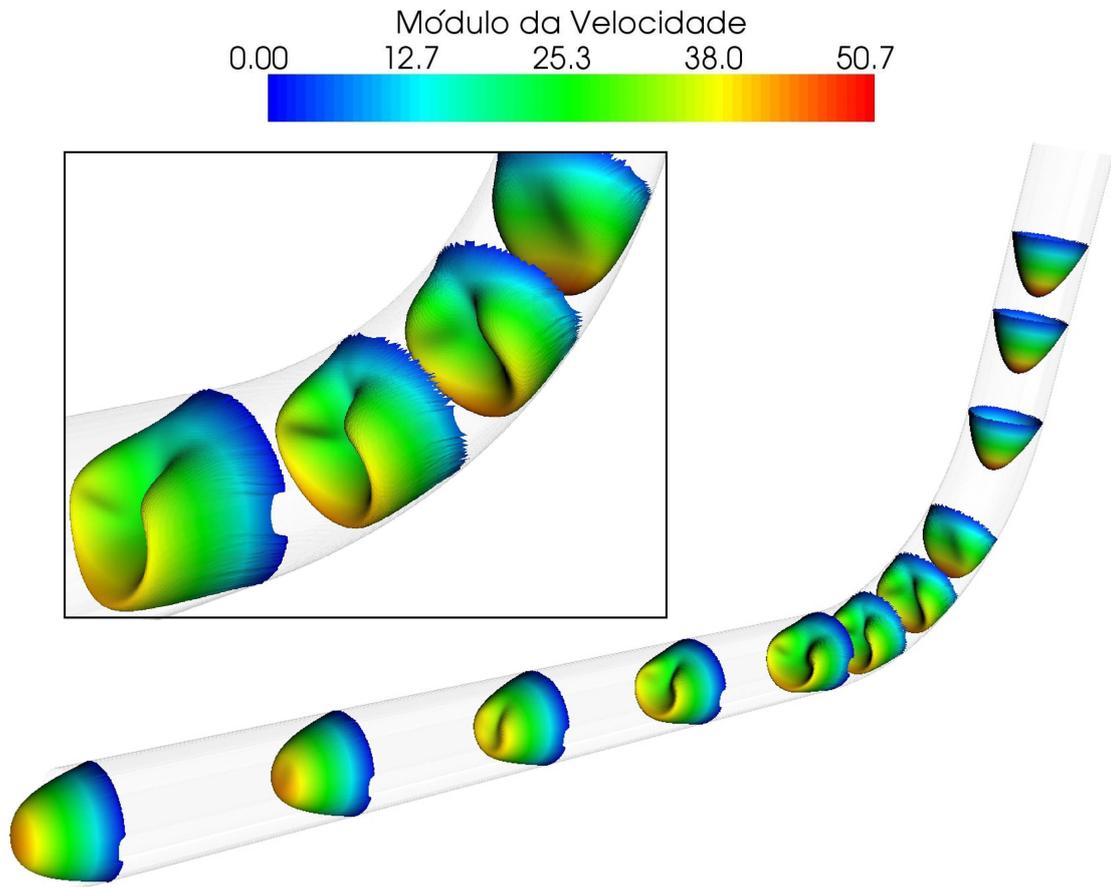


Figura 4.24: Perfis de velocidade ao longo do canal em  $t/T = 0,5$ .

Já na Figura 4.25 vemos um corte longitudinal do canal onde pode-se observar novamente a mudança do perfil de velocidade ao longo da região curvada e a recuperação do mesmo após esta região, além da exibição do campo vetorial de velocidade em detalhe na curva do canal. Como forma de demonstrar a complexidade tridimensional do problema, exibem-se na Figura 4.26 as linhas de corrente setadas inicialmente sobre um plano que corta o canal ao meio na região de entrada segundo mostrado na mencionada figura. Assim sendo, após a passagem pela região curvada as linhas de corrente sofrem uma reconfiguração tridimensional devido à circulação secundária que será comentada a seguir.

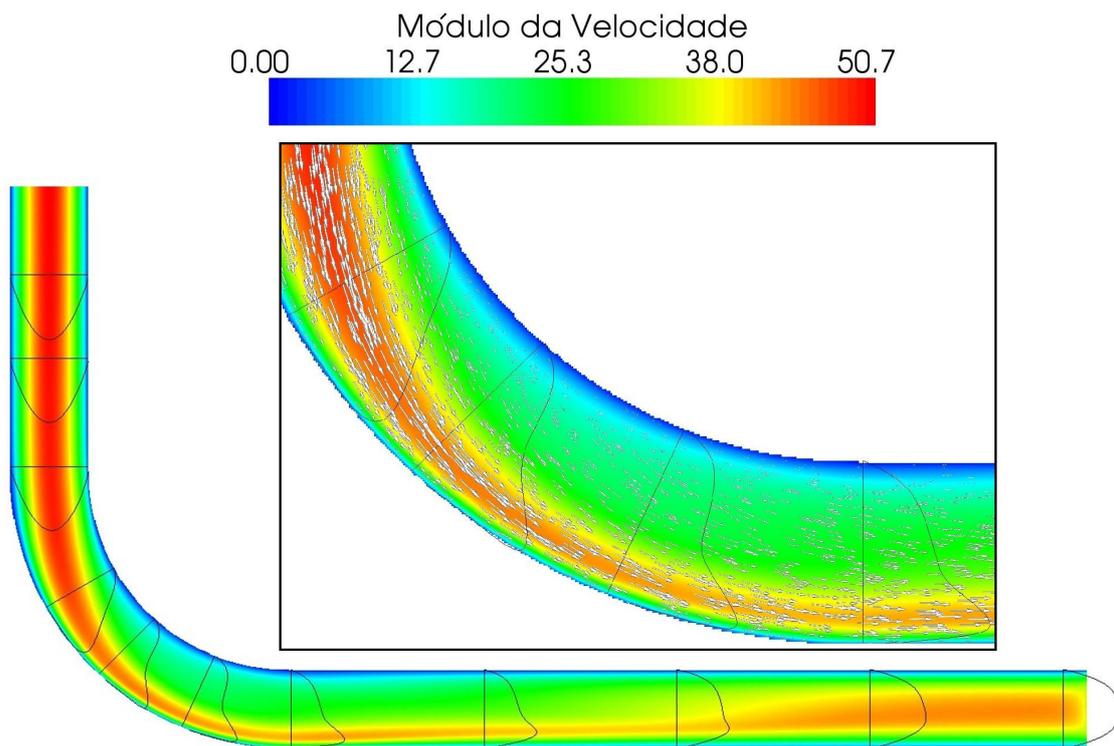


Figura 4.25: Perfis de velocidade sobre um corte longitudinal em  $t/T = 0,5$ .

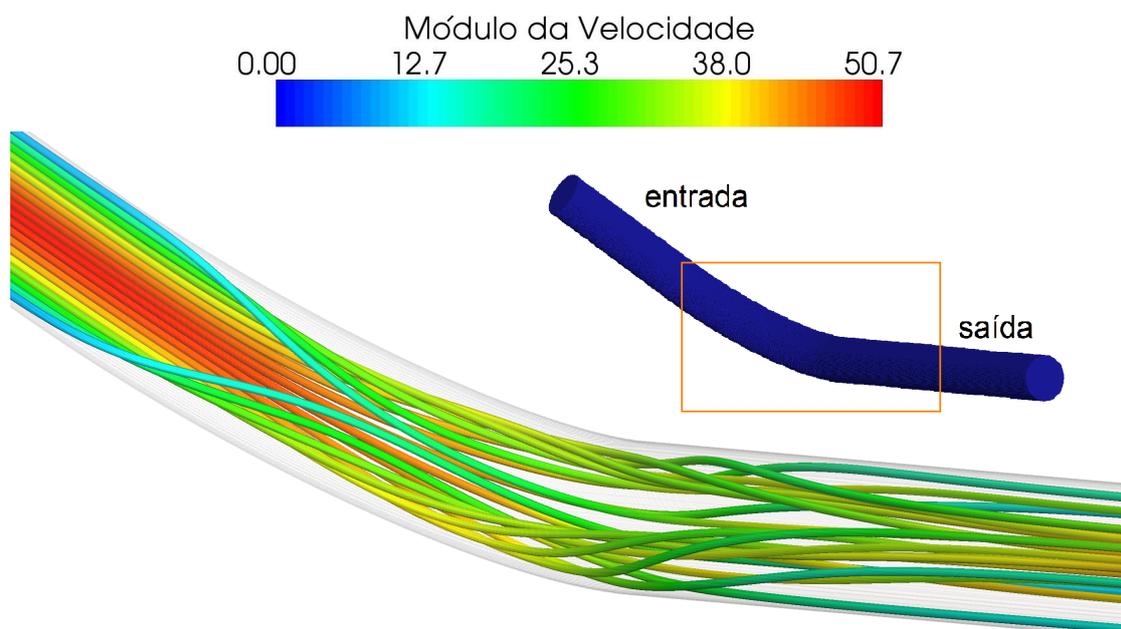


Figura 4.26: Linhas de corrente na região curva do canal em  $t/T = 0,5$ .

Com o intuito de mostrar o mencionado fluxo secundário que dá lugar à estrutura complexa das linhas de corrente, são incluídos na Figura 4.27 cortes transversais ao longo do canal que põem em evidência a estrutura dos vórtices secundários. Todas estas imagens foram geradas no instante de tempo  $t/T = 0,5$ , no qual fluxo atinge sua velocidade máxima.

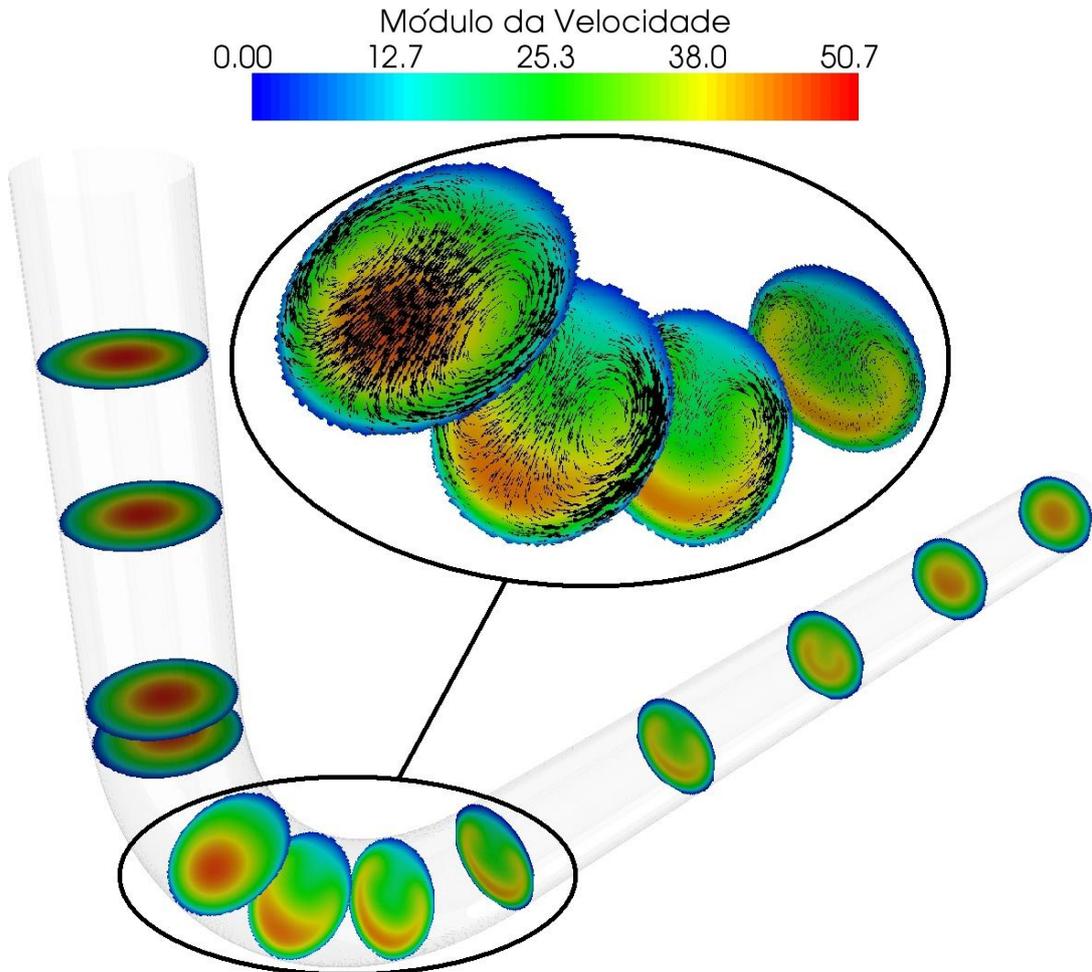


Figura 4.27: Estrutura dos vórtices secundários sobre cortes transversais em  $t/T = 0,5$ .

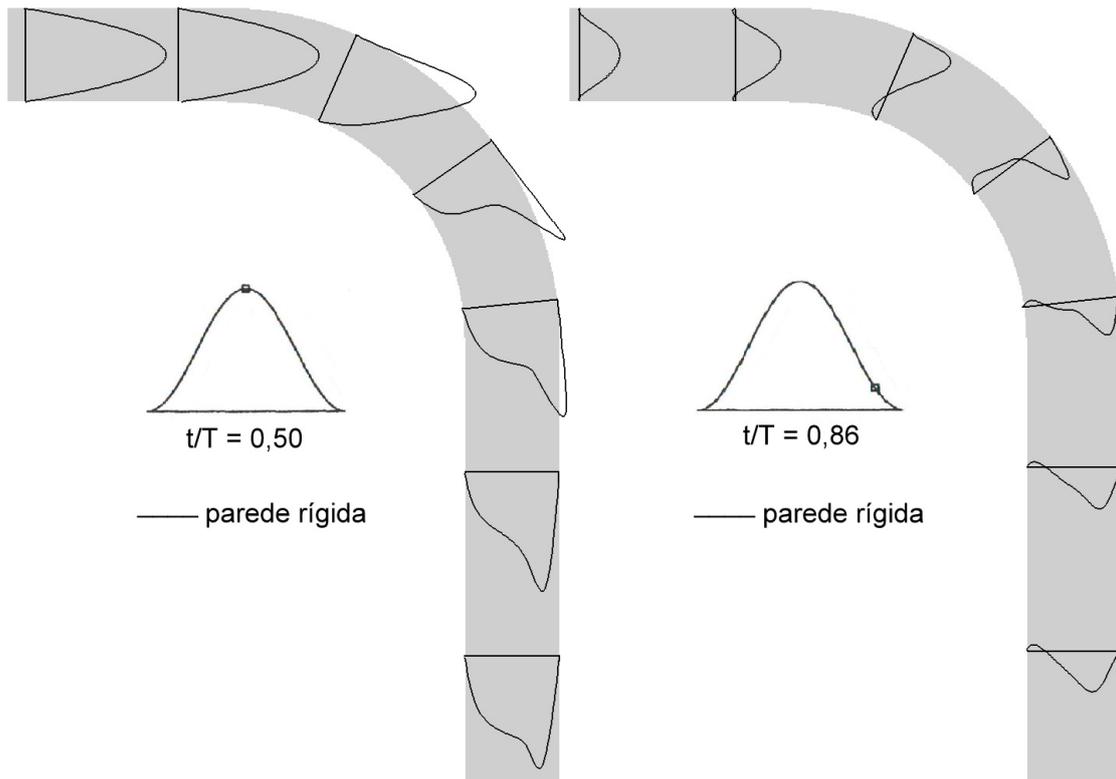
Devido ao alto valor da relação de aspecto deve-se tomar especial cuidado para que a pressão do fluido varie suavemente, fazendo com que os efeitos de compressibilidade do fluido sejam suprimidos. Mais especificamente, de acordo com as expressões (2.85) e (2.86), devemos satisfazer a relação:

$$T_r := \frac{T}{(L/c_s)} \gg 1, \quad (4.14)$$

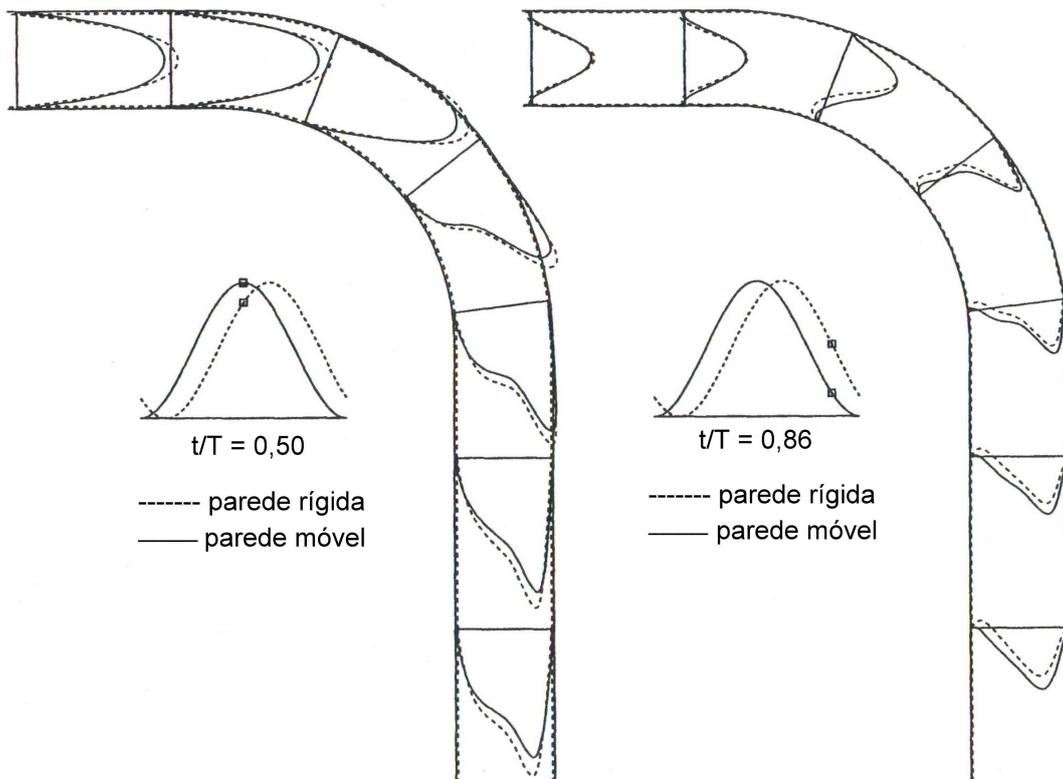
ou seja, deve-se garantir que o tempo característico do problema, definido pelo período de oscilação  $T$ , seja muito maior que o tempo de propagação do som sobre o comprimento característico do problema  $L$  (definido por  $L/c_s$ ), conforme explicado na Seção 3.3 e visto na análise assintótica da Seção 2.4. Para satisfazer esta relação, foi necessário trabalhar com uma velocidade do som (definida como  $c_s = v/\sqrt{3}$ ) elevada, devido ao grande comprimento do canal e ao pequeno tempo de oscilação. Porém, trabalhar com velocidade do som alta implica em tornar a velocidade das partículas (definida como  $v = \Delta x/\Delta t$ ) grande. Assim, tem-se que encontrar um equilíbrio entre o passo de tempo e o número de células do *lattice* (associado a  $\Delta x$ ) que faça com que a velocidade do som seja alta o suficiente para minimizar os efeitos de compressibilidade e que, ao mesmo tempo, o parâmetro de relaxação  $\tau$  (ver equação (3.44)) esteja suficientemente distante de um valor que torne a simulação instável. Este é um dos principais desafios que se deve enfrentar em situações com esta. Nas simulações realizadas adotamos a proporção  $T_r \approx 30$ , com a qual obtivemos erros de compressibilidade, calculados através da diferença entre o fluxo de fluido na entrada e na saída do canal, menores que 2%.

Para efeitos de verificação dos resultados obtidos realizamos uma comparação entre os obtidos neste trabalho via LBM e os resultados retirados da literatura (ver Verdonck e Perktold (2000)), obtidos através de um esquema numérico de elementos finitos. Nesta referência são exibidos resultados de duas simulações similares ao caso analisado neste trabalho, sendo um caso com paredes distensíveis e outro com paredes fixas porém com a constante  $C$  da equação (4.11) próxima, mas diferente, de zero (o valor exato de  $C$  não foi especificado na referência e por isso aqui foi considerado  $C = 0$ ). Devido ao fato de não termos exatamente os mesmos problemas simulados, apresentamos na Figura 4.28 os perfis de velocidade do fluido ao longo de um corte longitudinal do canal da simulação feita no presente trabalho (ver Figura 4.28(a)) e das simulações encontradas na referência acima citada (ver Figura 4.28(b)) para os efeitos de comparação da morfologia dos perfis de velocidade. Pode-se concluir que os perfis apresentados nestas figuras têm

formatos semelhantes, dadas as diferenças entre os problemas simulados. Estes resultados são comparados em dois instantes de tempo correspondentes a  $t/T = 0,5$  e  $t/T = 0,86$ , segundo indicado.



(a) Simulação via LBM realizada no presente trabalho.



(b) Simulação via elementos finitos (imagem retirada e adaptada de Verdonck e Perktold (2000))

Figura 4.28: Perfis de velocidade sobre um corte longitudinal em dois instantes de tempo dentro do período.

# Capítulo 5

## Conclusão

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. 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. A paralelização realizada nos algoritmos implementados neste trabalho foi capaz de reduzir o tempo de execução das simulações de forma quase linear em relação ao aumento do número de processadores, ou seja, tivemos um ganho em desempenho próximo de 95% por processador adicionado.

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 1000 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  $1 \times 1$  até cerca de  $18 \times 1$ . O método mostrou-se capaz de fornecer soluções aproximadas acuradas para todos estes problemas. 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. Em particular, foi efetuada a modelagem do escoamento pulsátil sanguíneo em um canal cilíndrico curvo (caso que se assemelha às situações encontradas em problemas de hemodinâmica computacional). Empregando o LBM neste problema, com seus parâmetros corretamente calibrados, foi possível reproduzir os resultados encontrados na literatura. Aqui vale a pena enfatizar que se trata da simulação de um escoamento transiente com número de Reynolds da ordem de 300 e número de Womersley da ordem de 5, e onde o domínio de análise possui uma relação de aspecto geométrica de aproximadamente  $18 \times 1$ .

Como sequência deste trabalho pretendemos estendê-lo primeiramente a outras geometrias de distritos arteriais do corpo humano de pacientes específicos, isto é, geometrias obtidas a partir do processamento de imagens médicas. Depois, procurar-se-á estudar o acoplamento entre simulações unidimensionais e tridimensionais de forma que possamos acoplar o escoamento tridimensional via LBM com a circulação sanguínea global governada por um modelo simplificado do sistema arterial humano. Juntamente com estas extensões desenvolveremos uma versão paralelizada do algoritmo empregando hardware específico (como máquinas multi-core e/ou placas gráficas) para que isto nos permita viabilizar a simulação de problemas em larga escala. E, como objetivo complementar, visamos incorporar

os efeitos não Newtonianos (característicos de um fluido não Newtoniano como o sangue) à modelagem do escoamento sanguíneo.

## Referências Bibliográficas

- T. Abe. Derivation of the lattice boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the boltzmann equation. **J. Comp. Phys.**, 131:241–246, 1997.
- A.M. Artoli, A.G. Hoekstra, e P.M.A. Slood. Mesoscopic simulations of systolic flow in the human abdominal aorta. **Journal of Biomechanics**, 39(5):873–884, 2006. ISSN 0021-9290.
- A.M. Artoli, D. Kandhai, H.C.J. Hoefsloot, A.G. Hoekstra, e P.M.A. Slood. Lattice bgk simulations of flow in a symmetric bifurcation. **Future Gener. Comput. Syst.**, 20(6):909–916, 2004. ISSN 0167-739X.
- 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):3493–3502, 2007.
- R. Benzi, S. Succi, e M. Vergassola. Theory and application of the lattice boltzmann equation. **Phys. Rep.**, 222(3):147, 1992.
- P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, e M. Krook. A model for collision processes in gases: small amplitude processes in charged and neutral one-component system. **Phys. Rev.**, 94:511–525, 1954.
- J.E. Broadwell. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method. **J. Fluid Mech.**, 19:401–414, 1964.
- N. Cao, S. Chen, S. Jin, e D. Martinez. Physical symmetry and lattice symmetry in lattice boltzmann method. **Phys. Rev. E**, 55:R21–24, 1997.

- C. Cercignani. **The Boltzmann equation and its applications**. New York : Springer-Verlag, 1988.
- C. Cercignani. **Mathematical Methods in Kinetic Theory**. Springer, 1990.
- H. Chen, S. Chen, e W.H. Matthaeus. Recovery of the navier-stokes equations using a lattice-gas boltzmann method. **Phys. Rev. A.**, 45:5339–42, 1992.
- S. Chen, H. Chen, D. Martinez, e W.H. Matthaeus. Lattice boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. **Phys Rev. Lett.**, 67:3776–79, 1991.
- S. Chen e G.D. Doolen. Lattice boltzmann method for fluid flows. **Annual Review of Fluid Mechanics**, 30(1):329–364, 1998.
- B. Chopard, A. Dupuis, A. Masselot, e P. Luthi. Cellular automata and lattice boltzmann techniques: an approach to model and simulate complex systems. **Advances in Complex Systems**, 05:103–246, 2002.
- D. d’Humières, P. Lallemand, e U. Frisch. Lattice gas models for 3d hydrodynamics. **Europhys. Lett.**, 2:291–297, 1986.
- A. Dupuis. **From a lattice Boltzmann model to a parallel and reusable implementation of a virtual river**. Tese de Doutorado, University of Geneva / Suíça, 2002.
- H.-P. Fang, R.-Z. Wan, e Z.-F. Lin. Lattice boltzmann model with nearly constant density. **Physical Review E**, 66(3):036314, 2002.
- U. Frisch, B. Hasslacher, e Y. Pomeau. Lattice gas cellular automata for the navier-stokes equations. **Phys. Rev. Lett.**, 56:1505, 1986.
- U. Ghia, K. N. Ghia, e C. T. Shin. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. **Journal of Computational Physics**, 48:387–411, 1982.

- Guo, Zheng, e Shi. An extrapolation method for boundary conditions in lattice boltzmann method. **Phys. Fluids**, 14(6):2007–2010, 2002.
- 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: 1949–61, 1976.
- X. He, G. Duckwiler, e D.J. Valentino. Lattice boltzmann simulation of cerebral artery hemodynamics. **Computers & Fluids**, 2008 (in press).
- X. He e L.S. Luo. Lattice boltzmann model for the incompressible navier–stokes equation. **J. Stat. Phys.**, 88:927–944, 1997.
- X. He e L.S. Luo. A priori derivation of the lattice boltzmann equation. **Phys. Rev. E**, 55:6333–36, 1997b.
- F.J. Higuera e J. Jiménez. Boltzmann approach to lattice gas simulations. **Europhys. Lett.**, 9:663–668, 1989.
- F.J. Higuera, S. Succi, e R. Benzi. Lattice gas dynamics with enhanced collisions. **Europhys. Lett.**, 9:345–349, 1989.
- M. Hirabayashi, M. Ohta, K. Baráth, D.A. Rüfenacht, e B. Chopard. Numerical analysis of the flow pattern in stented aneurysms and its relation to velocity reduction and stent efficiency. **Math. Comput. Simul.**, 72(2-6):128–133, 2006. ISSN 0378-4754.
- T. Inamuro, M. Yoshino, e F. Ogino. A non-slip boundary condition for lattice boltzmann simulations. **Phys. Fluids**, 7(12):2928–2930, 1995.
- L. Kadanoff. On two levels. **Physics Today**, 39:7–9, 1986.
- B. Keating, G. Vahala, J. Yepez, M. Soe, e L. Vahala. Entropic lattice boltzmann representations required to recover navier-stokes flows. **Physical Review E**, 75(3):036712, 2007.

- J.M.V.A. Koelman. A simple lattice boltzmann scheme for navier-stokes fluid flow. **Europhys. Lett.**, 15:603–607, 1991.
- 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. **J Biomech**, 31(5):453–462, 1998.
- O. Pelliccioni, M. Cerrolaza, e M. Herrera. Lattice boltzmann dynamic simulation of a mechanical heart valve device. **Math. Comput. Simul.**, 75(1-2):1–14, 2007. ISSN 0378-4754.
- 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, Part 2), MAY 2006. ISSN 1539-3755.
- Y.H. Qian. **Lattice gas and lattice kinetic theory applied to the Navier-Stokes equations**. Tese de Doutorado, Universit ´e Pierre et Marie Curie, Paris, 1990.
- Y.H. Qian, D. d’Humières, e P. Lallemand. Lattice bgk models for navier-stokes equation. **Europhys. Lett.**, 17:479–484, 1992.
- Y.H. Qian, J. Lebowitz, e S. Orszag. Special issue on lattice gas. **J. Stat. Phys.**, 81, 1995a.
- Y.H. Qian, S. Succi, e S. Orszag. Recent advances in lattice boltzmann computing. **Ann. Rev. Comp. Phys.**, 3:195, 1995b.
- D. H. Rothman e S. Zaleski. **Lattice-gas cellular automata: simple models of complex hydrodynamics**. Cambridge University Press, 2004.
- 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, JAN 5 1998. ISSN 0031-9007.

- X.W. Shan, X.F. Yuan, e H.D. Chen. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the navier-stokes equation. **JOURNAL OF FLUID MECHANICS**, 550:413–441, MAR 10 2006. ISSN 0022-1120.
- S. Succi. Lattice boltzmann equation: failure or success. **Physica A**, 240:221–228, 1997.
- P. Verdonck e K. Perktold. **Intra and Extracorporeal cardiovascular fluid dynamics - volume 2: Fluid-structure interaction**. Wit Press, 2000.
- D.A. Wolf-Gladrow. **Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models, an introduction**. Springer, 2000.
- 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(3):553–563, 1955.
- 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.
- Q. Zou e X. He. On pressure and velocity boundary conditions for the lattice boltzmann bgk model. **American Institute of Physics**, 9(6):1591–1598, 1997.